

“Con fundamento en los artículos 21 y 27 de la Ley Federal del Derecho de Autor y como titular de los derechos moral y patrimonial de la obra titulada **“Estados Atrapados en Redes Hexagonales Deformadas bajo un Modelo de Amarre Fuerte”**, Tesis para obtener el grado de **Maestro en Ciencias (Física)**, otorgo de manera gratuita y permanente a la Facultad de Ciencias de la Universidad Autónoma de San Luis Potosí, la autorización para que difunda la obra en cualquier medio, incluido el electrónico, y la divulgue entre sus usuarios, profesores, estudiantes o terceras personas, sin que pueda percibir por tal divulgación una contraprestación.”

Fecha presentación: 13/12/2019

Fecha autorización: 06/12/2019

Nombre y Firma de AUTORES

Oliver Josué Rentería López
Oliver Rentería

Estudiante

John Alexander Franco Villafañe
John Alexander Franco

Asesor

Co-asesor (si aplica)

UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE SAN LUIS POTOSÍ



ESTADOS ATRAPADOS EN REDES HEXAGONALES DEFORMADAS BAJO UN MODELO DE AMARRE FUERTE

TESIS

QUE PARA OBTENER EL TÍTULO DE
MAESTRO EN CIENCIAS (FÍSICA)

PRESENTA

OLIVER JOSUÉ RENTERÍA LÓPEZ

ASESOR: DR. JOHN ALEXANDER FRANCO VILLAFANE

Agradecimientos

Antes que nada, quiero agradecer al Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología (CONACYT) por la beca de maestría 476501 con número de becario 628041, así como el proyecto CB-A1-S-18696. El apoyo económico recibido facilitó muchísimo el tiempo cursado en este programa.

Quiero dar las gracias a mi asesor de tesis Dr. John Alexander Franco Villafañe por proponer este trabajo de tesis y orientarme en él, además de siempre resolver mis dudas al respecto.

A mi familia quiero darles las gracias por la motivación y apoyo que me han brindado durante estos últimos dos años, y por darme ánimos para continuar en este programa con el fin de obtener el título. Sin ustedes este logro hubiera sido más difícil.

Finalmente, quiero agradecer a las amistades que hice en esta maestría. Ustedes hicieron que mi tiempo aquí fuera divertido, único, y cómico.

Resumen

El objetivo de esta tesis es determinar los estados atrapados que aparecen en redes hexagonales de grafeno (y redes basadas en la geometría del grafeno) con diferentes fronteras y tamaños. Para poder hacer esto, primero se presenta la teoría del modelo de amarre fuerte, y con esta teoría se propone una energía de interacción que decae exponencialmente conforme aumenta la distancia entre los átomos situados en la red. Con dicha energía de interacción se propone un Hamiltoniano que describe las interacciones del sistema, y se determina el eigensistema correspondiente. Los estados atrapados conocidos comúnmente existen en el borde o frontera de una red. Lo que nosotros estamos buscando son los estados atrapados que están confinados dentro del bulto de la red y no en las orillas, y para buscar estos estados se aplican deformaciones sobre las redes. Dichas deformaciones que se proponen cambian las posiciones de todos los átomos de las redes en una manera controlada.

Para crear las diferentes redes y hacer todos los cálculos se desarrollaron nuevos algoritmos en el programa Wolfram Mathematica. Primero se enfocó en buscar los estados atrapados para las redes tipo grafeno, es decir, redes hexagonales basadas en la geometría del grafeno. Se buscaron los estados atrapados para dos tipos de redes hexagonales con frontera rectangular y en forma de rombo, y para cada tipo se utilizaron tres tamaños de red diferente. Para considerar que un estado fuera atrapado, este tenía que cumplir al menos dos criterios: que el estado permaneciera confinado en los mismos sitios (dentro del bulto de la red) en las tres redes de tamaño diferente y que sus eigenvalores fueran aproximadamente iguales. Con estos criterios se logró filtrar los posibles estados atrapados y se reportan en el Capítulo 3 de esta tesis.

Posteriormente, se propuso un modelo simple que describe cómo es que aparecen los estados atrapados dentro de las redes tipo grafeno. Además de la parte matemática del modelo, también se hicieron programas que separan en distancias controladas y de acuerdo a los parámetros propuestos dos cadenas y dos redes tipo grafeno entre sí, para simular la deformación que se le aplicaron a las redes anteriormente. Los resultados obtenidos en esta parte están de acuerdo con los estados atrapados que se lograron identificar cuando se deformaron las redes.

En la parte final de la tesis se buscaron los estados atrapados para redes con los parámetros reportados del grafeno. Para esto, se buscó en la literatura lo que otros autores reportan como las distancias interatómicas aceptadas del grafeno, así como energías de interacción a primeros, segundos, y terceros vecinos. De dichas energías se determinó los parámetros restantes para la propuesta desarrollada en esta tesis. Ya con todos los parámetros calculados y en las unidades correspondientes, se procedió a determinar los eigensistemas para las diferentes redes de grafeno deformadas. Con los mismos dos criterios mencionados anteriormente se filtraron los estados atrapados de las gráficas de los eigenvectores y se reportan en el Capítulo 5 de esta tesis. Estos resultados también están de acuerdo con lo que plantea el modelo teórico que se propuso.

Índice general

1. Introducción	1
2. Eigenvalores de una Red Tipo Grafeno bajo un Modelo de Amarre Fuerte	4
3. Eigenvectores y Estados Atrapados de Redes Tipo Grafeno	14
4. El Modelo de los Estados Atrapados	37
5. Parámetros para el Modelo de Amarre Fuerte y Estados Atrapados del Grafeno	66
6. Conclusiones	86
A. Código de los programas creados en Wolfram Mathematica 11	88
Bibliografía	106

Capítulo 1

Introducción

El grafeno es hoy en día una de las estrellas en el horizonte de la ciencia de los materiales y la física de la materia condensada. Es una sustancia muy conocida, bastante estudiada y con bastantes propiedades interesantes. Este material estrictamente bidimensional exhibe una calidad de cristal y electrónica excepcionalmente alta y, a pesar de su corta historia, ya ha revelado una gran cantidad de aplicaciones. Hasta la fecha es el material más delgado conocido debido a su espesor de un solo átomo, lo cual se denomina como monocapa. El grafeno, constituido por átomos de carbono, se puede fabricar por diferentes métodos como el raspado (peeling, en inglés) mecánico o el crecimiento epitaxial [1, 2, 3].

Es de gran interés científico las propiedades y aplicaciones del grafeno. Una de estas propiedades, según la referencia [4], es que el grafeno exhibe muchas firmas de transporte poco comunes y es un conductor inesperadamente bueno a pesar de ser un sistema bidimensional. De acuerdo al artículo citado en [5], el grafeno puede sostener densidades de corriente hasta seis órdenes de magnitud más altas que las del cobre y muestra un récord en su conductividad térmica y rigidez.

Ahora que se han mencionado algunas propiedades interesantes del grafeno, a continuación se describen unas aplicaciones del grafeno y de los materiales en base al grafeno de acuerdo a lo que reportan Huang et al [6]. Unas de las áreas más exploradas para el grafeno son los transistores de efecto de campo (FET, por sus siglas en inglés) y los dispositivos de memoria. Los materiales en base al grafeno han sido extensivamente estudiados en el campo de la energía fotovoltaica a causa de su buena conductividad electrónica y transparencia óptica. Hasta la fecha, se han reportado bastantes estudios sobre aplicaciones fotovoltaicas basadas en el grafeno, en las que se utilizan materiales basados en grafeno como electrodos transparentes, receptores de electrones, y absorbentes de luz. Otras aplicaciones del grafeno incluyen plataformas de detección, tales como sensores de transistores de efecto de campo, sensores electroquímicos, y sensores fluorescentes. Hay un interés por el diseño de materiales en base al grafeno utilizando películas delgadas de grafeno con periodicidad y tamaño bien controladas y propiedades electrónicas ajustables. Dichos materiales incluyen electrodos de grafeno estampado, nanocintas y nanomallas (nanoribbons y nanomeshes, respectivamente, en inglés).

Con la geometría del grafeno se pueden construir nanoestructuras como las anteriormente mencionadas cintas de grafeno, las cuales se pueden obtener mediante la litografía de alta resolución [7] o mediante procesos de corte controlados [8]. El comportamiento electrónico de todas estas nanoestructuras está determinado principalmente por la forma en que los átomos de carbono se arreglan geoméricamente (su estructura) y por el confinamiento (frontera) en el material, que permiten la observación de efectos tales como los llamados efectos de atrapamiento. La posibilidad de atrapar portadores de carga, aplicando externamente deformaciones a la geometría de la estructura, podrían utilizarse para desarrollar novedosas aplicaciones tecnológicas. Las propiedades electrónicas del grafeno bajo ciertas deformaciones geométricas (estiramientos o contracciones) es un campo reciente y muy activo de la materia condensada en los sistema de baja dimensionalidad [9, 10]. Por otra parte, es bien conocido que es posible observar estados atrapados en materiales por la presencia de defectos o impurezas en la estructura, o por efectos de borde en la frontera del material [11]. Sin embargo, el estudio de los estados atrapados inducidos por deformaciones es muy escaso en la literatura hasta la fecha. Esta es un área de oportunidad para generar nuevo conocimiento y es donde esta tesis se enmarca. Se busca entender, a través de un modelo de amarre fuerte, cómo se pueden inducir estados atrapados debido

a deformaciones geométricas en la estructura. Principalmente, se busca estados atrapados que conecten dos extremos del grafeno, a través del bulto y no por su frontera, además de su dinámica a lo largo de la estructura de bandas. Esto debido a su potencial aplicación en el transporte electrónico a ciertas energías.

Los estados atrapados que se quieren encontrar son como los estados ligados que se conocen de la mecánica cuántica. Un estado ligado es un tipo de estado cuántico en donde una partícula, sujeta a un potencial, permanece localizado dentro de una región del espacio. A continuación se encuentra una imagen que muestra un ejemplo de un potencial y un estado ligado.

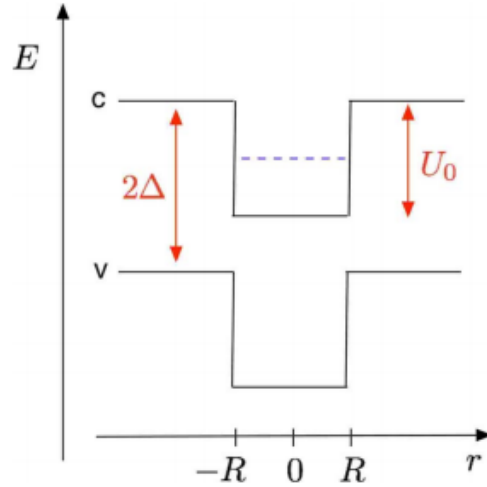


Figura 1.1: Un punto cuántico en una sola capa de grafeno con un término de masa constante Δ . Un potencial electrostático con altura U_0 da lugar a un estado ligado (línea punteada) en la banda de conducción (c) que define un punto cuántico de radio R . La banda de valencia es representado por (v). Figura adaptada de la referencia [12].

Los estados atrapados que se esperan encontrar no son exactamente como el estado ligado que aparece en la Figura 1.1, pero se espera que sea similar en el sentido que estén confinados dentro de una región del espacio dentro del bulto de las redes deformadas de grafeno.

A continuación se explicará de manera breve el contenido de los siguientes capítulos de esta tesis. El Capítulo 2, cuyo título es **Eigenvalores de una Red Tipo Grafeno bajo un Modelo de Amarre Fuerte** y que comienza en la página 4, plantea la teoría detrás del modelo de amarre fuerte. Con esta teoría se construye un Hamiltoniano \hat{H} que describe las interacciones energéticas entre todos los posibles pares de átomos que se encuentran dentro de un arreglo bidimensional cualquiera. Los elementos de matriz del Hamiltoniano \hat{H} se calculan a partir de una energía de interacción que se propuso, la cual decae exponencialmente conforme aumenta la distancia entre los dos pares de átomos de interés. En este capítulo y lo que resta de la tesis se hicieron varios programas en Wolfram Mathematica 11 para facilitar todos los cálculos y gráficas que se requirieron en esta tesis. En este segundo capítulo se hicieron programas que construyen redes hexagonales con geometría en base del grafeno, y posteriormente se calcularon los eigenvalores al diagonalizar la matriz del Hamiltoniano \hat{H} . Con los datos de los eigenvalores se construyeron histogramas para mejor visualizar la distribución de las energías de interacción con expectativas de obtener información sobre los estados atrapados.

En el Capítulo 3, cuyo título es **Eigenvectores y Estados Atrapados de Redes Tipo Grafeno** y que empieza en la página 14, se aplicaron deformaciones a redes con geometría en base al grafeno con diferentes fronteras y tamaños. El término de “geometrías no convencionales” nace a partir de las deformaciones que se aplican a las redes. Dichas deformaciones se hicieron en el eje x al alejar todos los átomos respecto a un punto fijo. Esto se puede imaginar como si se estirara la red en ambos extremos del eje x . Después de aplicar la deformación a la red, se determinó el eigensistema de la nueva configuración. Se graficaron los eigenvectores correspondientes a todos los eigenvalores para cada tipo de red de diferente tamaño. Se buscaron los estados

atrapados en las gráficas de los eigenvectores en cada tamaño de red del mismo tipo. La idea era encontrar estados atrapados que permanecen en las mismas posiciones al ir creciendo la red y que sus respectivos eigenvalores fueran cercanos entre sí. Los estados que sí cumplieron ambos requisitos se reportaron como estados atrapados.

En el Capítulo 4, cuyo título es **El Modelo de los Estados Atrapados** y que comienza en la página 37, se plantea y se desarrolla un modelo para la aparición de los estados atrapados para redes con geometría en base al grafeno. Este modelo se propuso tanto numérica como teóricamente. Para la parte numérica, se crearon varios programas que por iteraciones separaban en el eje x dos redes o cadenas entre sí. Dichas separaciones simulan las deformaciones que se aplicaron en el Capítulo 3. Esto se hizo para ver en qué momento y qué tipo de estados atrapados aparecen. Para la parte teórica se propuso un modelo de amarre fuerte para una cadena lineal y para dos cadenas acopladas y en ambos casos se consideró interacciones a primeros vecinos. El objetivo aquí era proponer un Hamiltoniano \hat{H} para ambos modelos que describiera la interacción en las cadenas para poder operarlo sobre un estado particular de cada sistema y finalmente obtener los eigenvalores de los estados atrapados.

El Capítulo 5, cuyo título es **Parámetros para el Modelo de Amarre Fuerte y Estados Atrapados del Grafeno** y que inicia en la página 66, trata sobre el cálculo de las dimensiones y energías conocidas del grafeno bajo un modelo de amarre fuerte, para posteriormente determinar los eigenvectores como se había hecho antes y buscar los estados atrapados en redes de grafeno de diferente tamaño y con diferentes fronteras. A diferencia de los capítulos anteriores, las gráficas y los resultados presentados sí tienen unidades asignadas. En este último capítulo se reportan resultados en la misma manera que se hizo en el Capítulo 3.

Finalmente, en el Capítulo 6, que comienza en la página 86 se presentan las conclusiones generales de la tesis y las visiones a futuro de la misma. Después, en el Apéndice A, cuyo título es **Código de los programas creados en Wolfram Mathematica 11** y que inicia en la página 88, se encuentran los códigos de los programas más relevantes que se crearon para esta tesis. Tales programas son los que se utilizaron para crear y deformar redes de diferente tamaño y frontera, determinar los eigensistemas de dichas redes, exportar gráficas de los eigenvalores, eigenvectores e histogramas, entre otras cosas. Se crearon otros programas para la manipulación de conjuntos grandes de imágenes, pero no se incluyen en este apartado. Por último, la **Bibliografía** se encuentra en la página 106.

Capítulo 2

Eigenvalores de una Red Tipo Grafeno bajo un Modelo de Amarre Fuerte

Hoy en día el modelo atómico que es aceptado ampliamente es el que propuso Schrödinger, el cual demuestra que hay distintos tipos de orbitales alrededor del núcleo de un átomo. Estos orbitales son regiones en el espacio en donde existe una cierta probabilidad de encontrar al electrón. La forma y tamaño que adquieren estos orbitales dependen del nivel de energía que tenga el electrón de interés. Es claro que entre mayor sea el número atómico, mayor será la complejidad de los orbitales.

Los átomos constituyen la materia, y en éste trabajo nos enfocaremos particularmente en los sólidos bidimensionales. Una característica de los sólidos es que sus átomos se encuentran relativamente quietos y están ordenados en comparación con los líquidos y gases. En otras palabras es un arreglo de átomos. Dependiendo de cómo se distribuyen los átomos en un sólido, esto puede dar lugar a simetrías en su estructura atómica, la cual se conoce como estructura cristalina.

Todos los sólidos contienen electrones. Los electrones están ligados al núcleo mediante una fuerza de Coulomb. Entre más cercano esté un electrón al núcleo, mayor será su energía de enlace. Dada la estructura ordenada de los átomos, los electrones de conducción en los cristales están arreglados en bandas de energía, en donde los valores de energía que tienen los electrones son permitidos. Entre éstas bandas de energía hay regiones no permitidas de energía, en donde no pueden existir electrones con tales estados de energía. A estas regiones se les conocen como bandas prohibidas.

A continuación se muestra una figura de litio en donde se ve cómo evoluciona su espectro de energía conforme se van añadiendo átomos. En el caso del Li sólido se aprecia las bandas de energía y las bandas prohibidas anteriormente descritas.

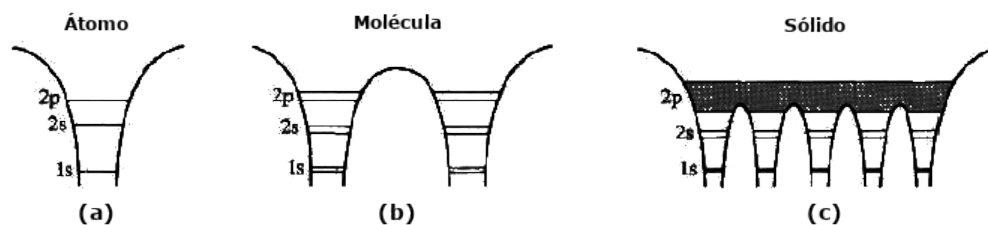


Figura 2.1: Evolución del espectro de energía para Li de un átomo (a), a una molécula (b), a un sólido (c). Figura adaptada de la referencia [13].

Nuestro interés es determinar la estructura de bandas electrónicas de un sólido dado un arreglo de átomos. Primero debemos saber cómo se describe la función de onda de una partícula, y para esto necesitamos la ecuación de Schrödinger, la cual describe la evolución temporal de un electrón de masa m debido a un

potencial $U(\mathbf{r})$:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi(\mathbf{r}, t) + U(\mathbf{r}) \Psi(\mathbf{r}, t). \quad (2.1)$$

Como el potencial $U(\mathbf{r})$ es independiente del tiempo, la función de onda del electrón $\Psi(\mathbf{r}, t)$ se puede separar en un producto de una función que depende de las coordenadas espaciales con una función que depende solo del tiempo

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \psi(\mathbf{r}) e^{-iEt/\hbar}, \quad (2.2)$$

y sustituyendo en la de Schrödinger para un electrón libre, es decir, con $U(\mathbf{r}) = 0$, se obtiene una ecuación de eigenvalores

$$\hat{H}\psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r}), \quad (2.3)$$

en donde $\hat{H} = -\hbar^2 \nabla^2 / 2m + U(\mathbf{r})$ es el Hamiltoniano del electrón. Nuestro objetivo es determinar las energías de interacción de todos los electrones entre sí en el sistema, o en otras palabras, la estructura de bandas electrónicas.

Los electrones de valencia de cada átomo de una red cristalina se comportan como un gas de electrones [14], y éstos están siendo afectados por el potencial $U(\mathbf{r})$ de la misma red. Para determinar la estructura de bandas electrónicas de un sólido, se debe de resolver la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo (ecuación (2.3)) con el fin de encontrar las energías permitidas (eigenvalores) de los electrones del sólido. Esto es un procedimiento muy laborioso si se quiere hacer exactamente debido a la cantidad numerosa de átomos dentro del sólido. Un enfoque alternativo es el **modelo de amarre fuerte** (tight binding, en inglés), el cual es una aproximación suficientemente buena a temperaturas muy por encima del cero absoluto. Esta suposición no es válida a temperaturas bajas (acercándose al cero absoluto) porque las funciones de onda de los electrones empiezan a superponerse entre sí, lo cual implica que los electrones interaccionan entre ellos mismos y en este modelo de amarre fuerte no describe adecuadamente el comportamiento de los electrones. Bajo este modelo es más simple resolver el problema debido a que solamente se toma en cuenta un electrón del sólido, asumiendo que el potencial de la red cristalina es periódico. Con este requisito, si se desplaza el potencial en un sitio de la red por un vector \mathbf{R} , el potencial será el mismo, es decir:

$$U(\mathbf{r} + \mathbf{R}) = U(\mathbf{r}). \quad (2.4)$$

Debido a la periodicidad del potencial, los estados estacionarios de los electrones independientes tienen la siguiente propiedad la cual es conocida como el *Teorema de Bloch* [15]:

Los eigenestados ψ del Hamiltoniano $\hat{H} = -\hbar^2 \nabla^2 / 2m + U(\mathbf{r})$ de un electrón, en donde $U(\mathbf{r} + \mathbf{R}) = U(\mathbf{r})$ para todo \mathbf{R} en una red de Bravais, pueden elegirse para tener la forma de una onda plana multiplicada por una función con la periodicidad de la red de Bravais:

$$\psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}), \quad (2.5)$$

en donde

$$u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r} + \mathbf{R}) = u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \quad (2.6)$$

para todo \mathbf{R} en la red de Bravais. Las ecuaciones (2.5) y (2.6) implican que

$$\psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r} + \mathbf{R}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}} \psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}). \quad (2.7)$$

El teorema de Bloch a veces se establece en esta forma alternativa: los eigenestados de \hat{H} se pueden elegir de modo que asociado con cada Ψ exista un vector de onda \mathbf{k} tal que

$$\psi(\mathbf{r} + \mathbf{R}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}}\psi(\mathbf{r}), \quad (2.8)$$

para cada \mathbf{R} en la red de Bravais.

Ahora, regresemos al modelo de amarre fuerte. Se necesita arribar a una ecuación que nos permita determinar la estructuras de bandas electrónicas del sólido. El siguiente análisis matemático está basado en la referencia [13].

Suponemos que se tiene un sólido cuyos átomos son idénticos y están caracterizados por un orbital atómico $\varphi_\alpha(\mathbf{r})$. Aquí el índice α indica el estado orbital del átomo. Por simplicidad se asume que se tiene un átomo por celda unitaria. El objetivo es determinar la solución de la ecuación de Schrödinger (2.3) en términos de combinaciones lineales de los orbitales atómicos, entonces se hace una expansión de las funciones de onda de Bloch como sigue,

$$\psi_k(\mathbf{r}) = \sum_m \sum_\alpha e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_m} c_\alpha(\mathbf{k}) \varphi_\alpha(\mathbf{r} - \mathbf{R}_m), \quad (2.9)$$

en donde se introdujo el índice m , el cual describe el vector de red \mathbf{R}_m y el orbital atómico localizado en el sitio m , $\varphi(\mathbf{r} - \mathbf{R}_m)$. De la ecuación anterior, $c_\alpha(\mathbf{k})$ son los coeficientes de expansión y estos deben ser determinados de la ecuación de Schrödinger. Es fácil mostrar que la ecuación (2.9) es la función de Bloch que satisface el requisito $\psi_k(\mathbf{r} + \mathbf{R}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}}\psi_k(\mathbf{r})$. Esto se muestra en seguida,

$$\begin{aligned} \psi_k(\mathbf{r} + \mathbf{R}) &= \sum_m \sum_\alpha e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_m} c_\alpha(\mathbf{k}) \varphi_\alpha(\mathbf{r} - \mathbf{R}_m + \mathbf{R}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}} \sum_m \sum_\alpha e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{R}_m - \mathbf{R})} c_\alpha(\mathbf{k}) \varphi_\alpha[\mathbf{r} - (\mathbf{R}_m - \mathbf{R})] \\ &= e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}} \psi_k(\mathbf{r}). \end{aligned} \quad (2.10)$$

Para simplificar la notación, se denota $\varphi_\alpha(\mathbf{r} - \mathbf{R}_m)$ por $\varphi_{\alpha m}$. Sustituyendo la ecuación (2.9) en (2.3) se tiene que

$$\sum_\alpha \sum_m e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_m} c_\alpha(\mathbf{k}) \hat{H} \varphi_{\alpha m} = E \sum_\alpha \sum_m e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_m} c_\alpha(\mathbf{k}) \varphi_{\alpha m}. \quad (2.11)$$

Ahora, se multiplica la ecuación anterior por $\varphi_{\alpha' m'}^*$ y se toma una integral sobre todo el volumen del sólido. Para simplificar la notación de este paso se recurre a la notación de Dirac para los kets y bras típicamente utilizada en los textos de mecánica cuántica, y de esta manera se tiene que

$$\sum_\alpha \sum_m e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_m} c_\alpha(\mathbf{k}) \langle \varphi_{\alpha' m'} | H | \varphi_{\alpha m} \rangle = E \sum_\alpha \sum_m e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_m} c_\alpha(\mathbf{k}) \langle \varphi_{\alpha' m'} | \varphi_{\alpha m} \rangle. \quad (2.12)$$

Dado que el conjunto de bases de φ es ortonormal, es decir,

$$\langle \varphi_{\alpha' m'} | \varphi_{\alpha m} \rangle = \delta_{m' m} \delta_{\alpha' \alpha}. \quad (2.13)$$

aplicando la relación de ortonormalidad (2.13) en la ecuación (2.12), expandiendo las sumatorias del lado derecho de la ecuación (2.12) para que solo sobrevivan los términos etiquetados con α' y m' , y multiplicando ambos lados de la ecuación por $e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_{m'}}$, se obtiene

$$\sum_\alpha H_{\alpha' \alpha}(\mathbf{k}) c_\alpha(\mathbf{k}) = E c_{\alpha'}(\mathbf{k}), \quad (2.14)$$

en donde

$$H_{\alpha'\alpha} = \sum_m e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{R}_m - \mathbf{R}_{m'})} \langle \varphi_{\alpha'm'} | H | \varphi_{\alpha m} \rangle. \quad (2.15)$$

La ecuación (2.14) representa un conjunto de ecuaciones lineales con respecto a los coeficientes $c_\alpha(\mathbf{k})$. El número de ecuaciones que se tiene en este conjunto es igual al número de orbitales, N_{orb} , en un átomo, y por lo tanto se obtienen N_{orb} soluciones. Los eigenvalores y las eigenfunciones serán funciones del vector de onda \mathbf{k} , y por consiguiente la solución representará N_{orb} bandas.

Para poder resolver la ecuación que aparece en (2.15) es necesario conocer los elementos de matriz del Hamiltoniano \hat{H} .

A modo de ejemplo, supongamos que se tiene una red unidimensional de átomos idénticos, como se ilustra a continuación.

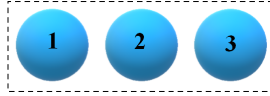


Figura 2.2: Una red unidimensional de átomos idénticos. Se distinguen los átomos etiquetados como 1, 2 y 3.

Estamos interesados en cómo interaccionan entre sí los átomos etiquetados como 1, 2 y 3. Las interacciones entre átomos distintos se denota por $\Delta(d_{ij})$, en donde $i, j = 1, 2, 3$, pero $i \neq j$. Para determinar los eigenvalores E_i , en donde $i = 1, 2, 3$, se debe diagonalizar la ecuación de Schrödinger (2.14) en donde el Hamiltoniano \hat{H} es la matriz siguiente (del modelo de amarre fuerte):

$$\hat{H} = \begin{pmatrix} E_1 & \Delta(d_{12}) & \Delta(d_{13}) \\ \Delta^*(d_{12}) & E_2 & \Delta(d_{23}) \\ \Delta^*(d_{13}) & \Delta^*(d_{23}) & E_3 \end{pmatrix}. \quad (2.16)$$

Esta aproximación se puede extender a N átomos, y por ende la matriz del Hamiltoniano \hat{H} sería de $N \times N$ elementos.

En base al enfoque de amarre fuerte anteriormente descrito, se implementaron tres programas en Wolfram Mathematica para determinar los eigenvalores de una red bidimensional de átomos. En el primero se estudia un caso general en donde se construyó un arreglo aleatorio en dos dimensiones de átomos idénticos y se determinaron los eigenvalores del sistema además de un histograma de dichos eigenvalores asumiendo una interacción que decae exponencialmente conforme aumenta la distancia entre los átomos. Esta suposición se hizo para que la interacción entre átomos alejados fuera pequeña en comparación con átomos cercanos entre sí. En seguida se muestra la interacción anteriormente mencionada,

$$H_{ij} = A e^{-\gamma d_{ij}}, \quad (2.17)$$

En esta ecuación H_{ij} es el elemento ij del Hamiltoniano, A es la amplitud de la energía de interacción, γ es el factor de decaimiento y d_{ij} es la distancia entre el i -ésimo y j -ésimo átomo.

Después de esto, se construyó un segundo programa en donde la posición de los átomos ya no era al azar sino ordenada de tal manera que se sitúan en una red hexagonal. El grafeno, constituido por átomos de carbono, toma la forma de una red hexagonal y por eso se decidió hacer un programa que representara dicha red. Finalmente se hizo un tercer programa en donde se muestra un histograma de los eigenvalores de la red hexagonal. Cabe mencionar que las distancias y energías están en unidades arbitrarias. Para los tres programas se define un radio mínimo de interacción a partir del cual la interacción entre los átomos es nula.

El código de los tres programas mencionados se encuentran en la Apéndice A, y a continuación se explica lo que hace el código de cada programa.

En el primer programa cuyo nombre es Gráfica, eigenvalores e histograma de una red aleatoria de átomos.nb se construye una red aleatoria bidimensional de átomos idénticos y se determinan los eigenvalores con su

respectivo histograma. Aunque la información que proporcionarían los eigenvalores y el histograma no sería útil debido a que provienen de una red aleatoria, se determinan para saber que el programa que se hizo sí funciona. Al inicio del programa se le solicita al usuario un valor n que especifica el número de átomos. También se le solicita al usuario que defina la cota inferior, min , y la cota superior, max , que determinan el tamaño de la red en donde se van a graficar los átomos. El radio de interacción es entonces definido en función de los parámetros anteriores: $r = Abs|10^{\frac{(max-min)}{n}}|$. Físicamente, el radio de interacción representa una región circular del espacio cuyo origen son las coordenadas de cualquier átomo, y si cualquier otro átomo diferente se encuentra dentro de esta región entonces existe una interacción entre ambos átomos de acuerdo a la ecuación (2.17). En el caso de que un átomo no esté adentro del radio de interacción de cualquier otro átomo la interacción se considera como despreciable y se toma como cero. Después, al factor de decaimiento γ y a la amplitud A que aparecen en la ecuación (2.17) se les asigna el valor de 1. Esto se hizo solo para ver el comportamiento exponencial decreciente de la energía de interacción sin tener que preocuparnos por cómo cambiaría al tener diferentes valores de A y γ .

Luego, se crea una tabla de posiciones aleatorias para los átomos. Cada átomo tiene coordenadas (x, y) en donde los valores de x y y son números reales tales que estén acotados entre los valores min y max que el usuario definió. Se construye una gráfica en donde se muestran los átomos en sus posiciones aleatorias. Posteriormente, se crea una gráfica en donde se muestran los radios de interacción como círculos, y el centro de cada círculo corresponde a las coordenadas de un átomo. Se combinan estas dos gráficas y lo que se obtiene se muestra en seguida.

Átomos en posiciones aleatorias en 2D y sus radios de interacción

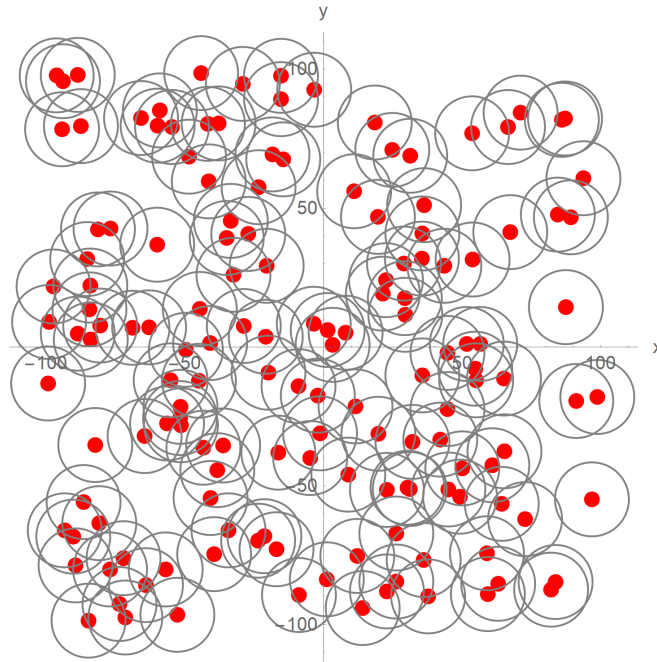


Figura 2.3: Una red aleatoria de átomos idénticos. Los puntos en rojo son las posiciones de los átomos y los círculos son los radios de interacción. Los valores de los parámetros para la creación de esta red son: $n = 150$, $min = -100$ y $max = 100$.

En la página 89 se describe detalladamente lo que hace el resto del programa. Para resumir, lo que se hace es calcular todas las distancias entre todos los pares de átomos, construir el Hamiltoniano \hat{H} para determinar sus eigenvalores, y graficar el histograma de dichos eigenvalores. Se exporta el histograma del programa como una imagen y lo que se obtuvo se muestra a continuación en la siguiente página.

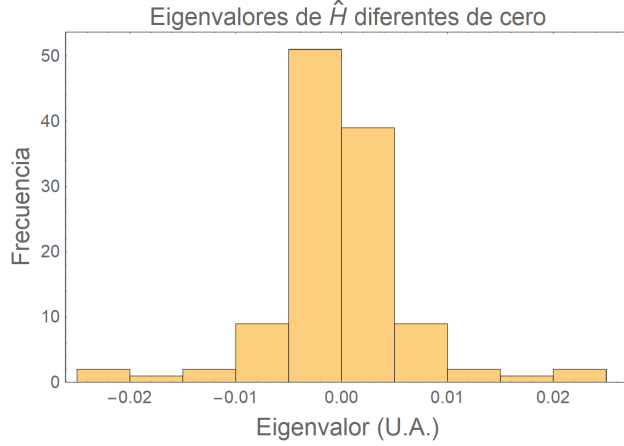


Figura 2.4: El histograma correspondiente a la red aleatoria mostrada en la Figura 2.3.

Observando el histograma de la Figura 2.4, al cual le pertenece la red aleatoria de la Figura 2.3, se nota que la mayoría de los eigenvalores se localizan alrededor del eigenvalor cero (en unidades arbitrarias). Sin embargo, la información que muestra esta gráfica no es de gran interés debido a que proviene de una red aleatoria, y por lo tanto la distribución de eigenvalores puede cambiar cada vez que se corre el programa. El propósito de incluir esta gráfica es para mostrar que el programa sí funciona.

En el segundo programa cuyo nombre es Gráfica y eigenvalores de una red de grafeno en 2D.nb se construye una red hexagonal de grafeno y se determinan los eigenvalores con base al modelo de amarre fuerte. Al inicio de este programa se le solicita al usuario varios datos: la longitud de la apotema a de los hexágonos del grafeno, dos enteros n y m que sirven para la construcción de la red hexagonal, y el radio de interacción r de cada átomo. En seguida están definidos varios parámetros que permanecen fijos, tales como $l = \frac{2}{\sqrt{3}}a$ que es la longitud de un lado de cualquier hexágono en función de la apotema que el usuario especificó, el factor de decaimiento $\gamma = 1$ y la amplitud $A = 1$ que son las mismas constantes que se encuentran en la ecuación (2.17).

A continuación en el código se definen dos vectores \mathbf{a}_1 y \mathbf{a}_2 en donde

$$\mathbf{a}_1 = \frac{3l}{2}\mathbf{i} + a\mathbf{j}, \quad (2.18)$$

y

$$\mathbf{a}_2 = \frac{3l}{2}\mathbf{i} - a\mathbf{j}, \quad (2.19)$$

los cuales sirven para generar la red hexagonal; son los vectores base de la red. Estos vectores determinan la geometría del hexágono. Para simplificar la construcción de la red hexagonal, ésta se dividió en dos subredes las cuales se denominan tradicionalmente red A y red B. Primero se construyó la subred A con los vectores de las ecuaciones (2.18) y (2.19), y posteriormente se construyó la subred B al tomar todas las posiciones de los átomos de la subred A y sumándole $2l$ en la dirección x . Esto significa que la subred B se genera apartir de una traslación de los átomos de la subred A. Una red hexagonal obtenida con este programa se muestra en la siguiente página.

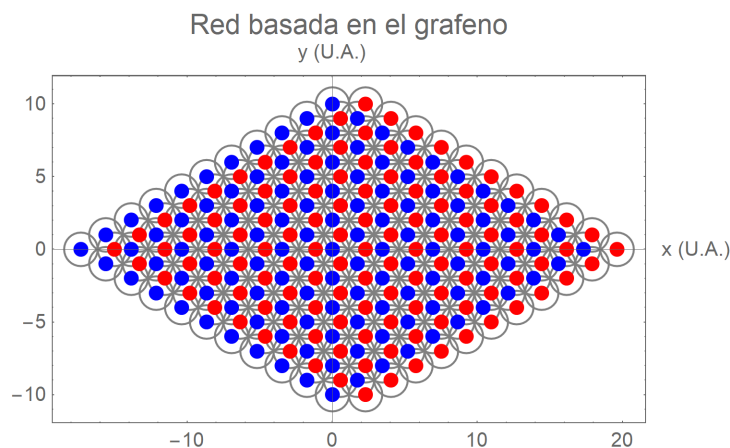


Figura 2.5: Una red tipo grafeno con 242 átomos de carbono, con interacción a primeros vecinos. A esta red le corresponde los siguiente valores en el código: $a = 1$, $n = 5$, $m = 5$ y $r = l$. Aunque los puntos son de color diferente, ambos representan átomos de carbono. Esto se hizo para diferenciar las dos subredes entre sí.

En el tercer programa titulado como *Histograma de eigenvalores de grafeno en 2D.nb* se analizan los eigenvalores de la red hexagonal creada en el programa anterior. Se crea una lista cuyo contenido son los eigenvalores guardados en *Lista de EV.dat* (ver página 90 en el Apéndice A para más detalles de la creación de esta lista) pero de tal manera que solamente los eigenvalores diferentes de cero estén en esta lista. Con esta lista se crea un histograma y se exporta como una imagen.

Con estos mismos dos últimos programas anteriormente descritos, se obtuvo la gráfica y su histograma correspondiente cuando la interacción era a terceros vecinos, esto es, $r = 2l$. Los demás parámetros permanecieron constantes. La gráfica de dicha red se muestra a continuación.

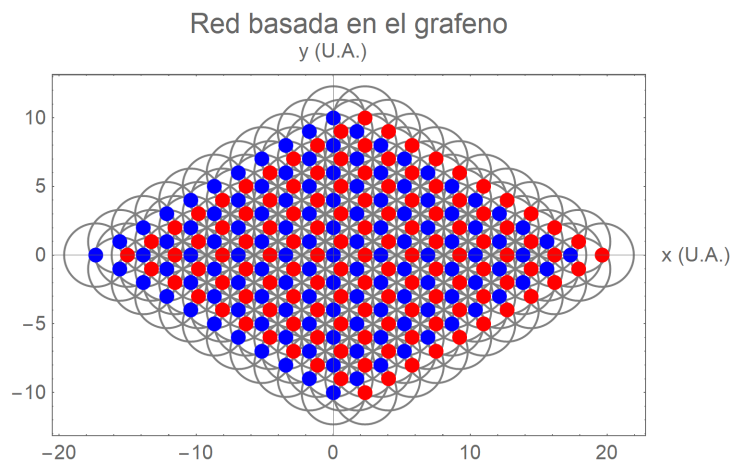


Figura 2.6: Una red tipo grafeno con 242 átomos de carbono, con interacción a terceros vecinos. A esta red le corresponde los siguiente valores en el código: $a = 1$, $n = 5$, $m = 5$ y $r = 2l$.

No se incluye el histograma correspondiente a la Figura 2.6 cuando $\gamma = 1$ porque la interacción a terceros vecinos es del mismo orden que la interacción a primeros vecinos, lo cual no representa al grafeno. Se tiene que utilizar otros valores de γ .

Después, se corrieron los programas de nuevo pero esta vez con los valores de $\gamma = 5$ y $\gamma = 9$ para analizar los resultados y poder hacer una conclusión al respecto. Las redes que muestran el programa son las mismas que en las Figuras 2.5 y 2.6, por lo que solo se muestran los histogramas para diferentes valores de γ a continuación.

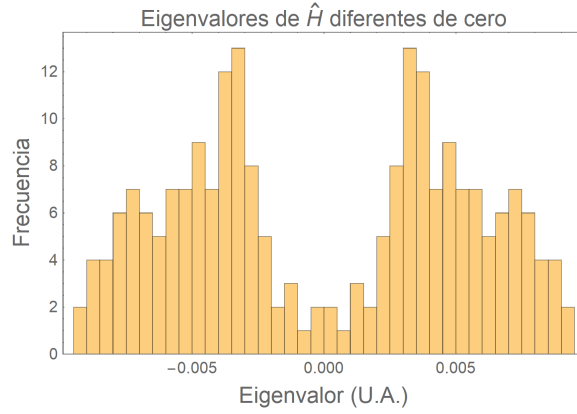


Figura 2.7: Histograma correspondiente a la red hexagonal de la Figura 2.5. En este caso se tuvo interacción a primeros vecinos con un valor de $A = 1$ y $\gamma = 5$ en el código.

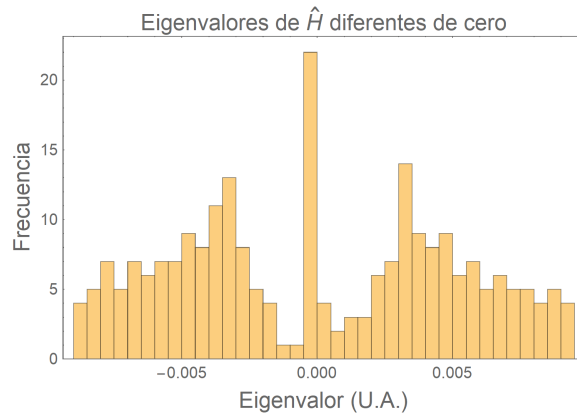


Figura 2.8: Histograma correspondiente a la red hexagonal de la Figura 2.6. En este caso se tuvo interacción a terceros vecinos con un valor de $A = 1$ y $\gamma = 5$ en el código.

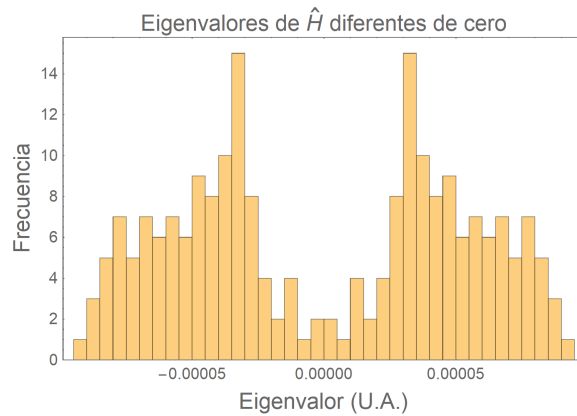


Figura 2.9: Histograma correspondiente a la red hexagonal de la Figura 2.5. En este caso se tuvo interacción a primeros vecinos con un valor de $A = 1$ y $\gamma = 9$ en el código.

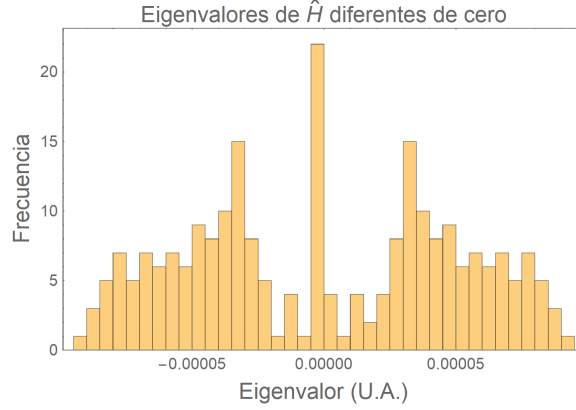


Figura 2.10: Histograma correspondiente a la red hexagonal de la Figura 2.6. En este caso se tuvo interacción a terceros vecinos con un valor de $A = 1$ y $\gamma = 9$ en el código.

Si se observan los histogramas, se nota que para interacciones a primeros vecinos, para cualquier valor de γ , el histograma es simétrico, es decir, usando el modelo del amarre fuerte, la distribución de los eigenvalores de la red hexagonal es simétrica. En el caso de la red aleatoria, el histograma de la Figura 2.4 muestra una distribución asimétrica de los eigenvalores, como es de esperarse. Pero, para la red hexagonal, la distribución de los eigenvalores tiene una forma definida. Para $\gamma = 5$, los histogramas de las Figuras 2.7 y 2.8 tienen un poco de semejanza con la excepción del pico de la distribución de los eigenvalores cercanos a cero en la Figura 2.8. Ahora para $\gamma = 9$, los histogramas de las Figuras 2.9 y 2.10 ya se parecen demasiado entre sí, nuevamente con la excepción del pico de la distribución de los eigenvalores cercanos a cero en la Figura 2.10. Los histogramas anteriores de las Figuras 2.7, 2.8, 2.9, y 2.10, se pueden comparar con la densidad de estados por celda unitaria del grafeno según lo reporta Neto et al [16]. A continuación se muestra dicha gráfica.

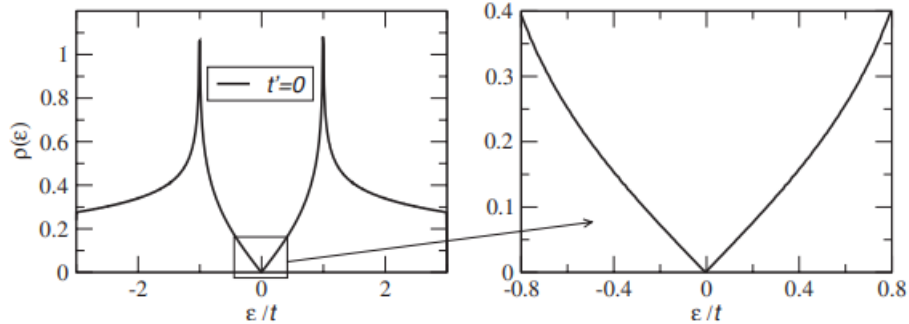


Figura 2.11: Densidad de estados por celda unitaria del grafeno como función de la energía (en unidades de t , en donde t es el salto de energía a los vecinos más cercanos de diferente subred) y t' es el salto de energía a los segundos vecinos más cercanos. En este caso se tiene $t' = 0$. En la izquierda se muestra la gráfica entera y en la derecha una amplificación alrededor del origen. Figura adaptada de la referencia [16].

Tanto la Figura 2.7 como la Figura 2.9, las cuales corresponden a redes basadas en el grafeno asumiendo interacciones a primeros vecinos pero con diferente valor de factor de decaimiento en el argumento de la exponencial, tienen bastante semejanza con la densidad de estados por celda unitaria del grafeno que se muestra en la Figura 2.11. En dicha gráfica de densidad de estados se tiene que $t' = 0$, lo cual significa que el salto de energía a los segundos vecinos es cero, y por consecuencia se entiende que no hay interacción a los segundos vecinos, pero sí a los primeros vecinos. Este resultado concuerda con la distribución de los eigenvalores en la Figura 2.7 y 2.9 porque en ambas solo se consideran interacciones a primeros vecinos.

En conclusión, se puede notar que mientras mayor sea el valor de γ , mayor será la semejanza entre los histogramas de la distribución de eigenvalores para una red hexagonal usando el modelo de amarre fuerte para interacciones a primeros y terceros vecinos. El histograma de la interacción a primeros vecinos es

simétrico mientras que para la interacción a terceros vecinos el histograma es asimétrico pero muy similar al histograma previo, salvo por un pico de distribución de eigenvalores cercanos a cero. Esto es debido a que, para valores suficiente grandes de γ , la energía de interacción entre primeros y terceros vecinos es aproximadamente igual, y por ende los histogramas de ambos modelos son muy similares entre sí.

Capítulo 3

Eigenvectores y Estados Atrapados de Redes Tipo Grafeno

En el capítulo anterior se presentó la teoría del modelo de amarre fuerte, y se discutió cómo se crearon unos programas en Wolfram Mathematica en base a este modelo para visualizar la distribución de los eigenvalores de una red bidimensional aleatoria de átomos iguales; posteriormente una red tipo grafeno. Sin embargo, solo con los eigenvalores no obtenemos la suficiente información para estudiar los estados atrapados. Por lo tanto, se creó otro programa en donde se determinan y se grafican los eigenvectores de redes tipo grafeno.

A partir de la página 92 en el Apéndice A se encuentra el código del programa que hizo para graficar los eigenvectores de redes tipo grafeno, y el título de este programa de **Eigensistema de una red de grafeno 2D.nb**. En resumen, este programa determina el eigensistema de una red tipo grafeno en base al modelo de amarre fuerte y grafica puntos representando los átomos de la red tipo grafeno, pero los componentes de los eigenvectores determinan los colores de dichos puntos. Estos colores están normalizados de tal manera que los colores cargados hacia un lado del espectro representan los componentes más grandes mientras que los colores cargados hacia el lado opuesto representan los componentes más pequeños.

En la Figura 3.1 se muestran algunas gráficas hechas con el programa que se acaba de describir. En este programa el parámetro q denota el número de eigenvalor (recordar que hay k eigenvalores).

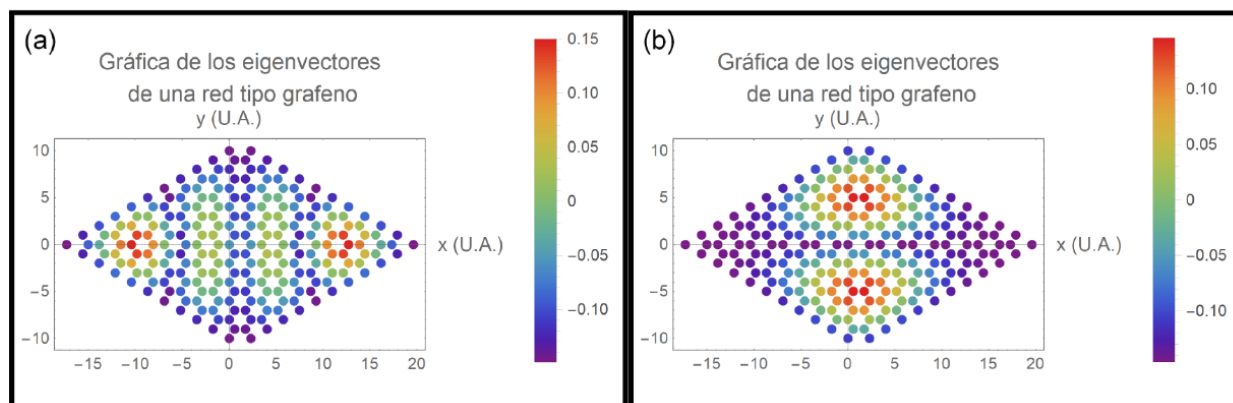


Figura 3.1: Décimo eigenvalor ($q = 10$) de una red tipo grafeno con 242 átomos de carbono con interacción (a) a primeros vecinos, y (b) a terceros vecinos. A ambas gráficas le corresponden los siguientes valores en el código: $a = 1$, $n = 5$, $m = 5$, $\gamma = 5$, $A = 1$ y $q = 10$.

Observando la última figura de los eigenvectores, y también otras gráficas similares (que no se incluyen aquí) pero de diferente tamaño y diferente eigenvalor, se notó que no hay estados atrapados dentro de una red tipo grafeno excepto por los que aparecen en las orillas de la red, pero esos no son interesantes en este trabajo porque se sabe que esos ya existen. Los estados atrapados que nos interesan son los que aparecen dentro

del bulto de la red y alejados de las orillas de la red finita. Es claro entonces que con la geometría actual que posee esta red tipo grafeno no se va a obtener dichos resultados, por lo que es necesario crear un nuevo programa que modifique controladamente la red.

Lo que ahora se propone es deformar la red tipo grafeno comprimiendo o expandiendo en la dirección x y/o y respecto a un punto fijo. La manera en cómo se deformará la red depende de la regla que se establecerá para cambiar las coordenadas de cada átomo, es decir, las ecuaciones que determinarán las nuevas posiciones. Se creó un programa cuyo nombre es *Deformación de una red de grafeno en 2D.nb* cuyo código se encuentra en el Apéndice A en la página 94. En el siguiente párrafo se resume lo que hace el programa.

Como en los programas anteriores se crea una red tipo grafeno al solicitar al usuario los mismos parámetros que antes. Después, se aplican deformaciones lineales a todos los átomos de la red de acuerdo a las siguientes ecuaciones:

$$x'_i = x_i + \delta x(x_i - x_0), \quad (3.1)$$

y

$$y'_i = y_i + \delta y(y_i - y_0). \quad (3.2)$$

en donde x'_i y y'_i son las nuevas coordenadas en x y y , respectivamente, después de aplicar la deformación, x_i y y_i son las coordenadas originales, δx y δy son los parámetros de deformación que indican qué tanto se va recorrer cada átomo, y x_0 y y_0 son las coordenadas del punto fijo. Las posiciones de todos los átomos van a cambiar respecto al punto fijo (x_0, y_0) . En este capítulo solo se aplicaron deformaciones en la dirección x , es decir, se utilizó únicamente la ecuación (3.1).

A continuación se muestra una imagen en donde se comparan dos redes creadas en este programa. La red de la izquierda es sin deformación y la red de la derecha es con la deformación.

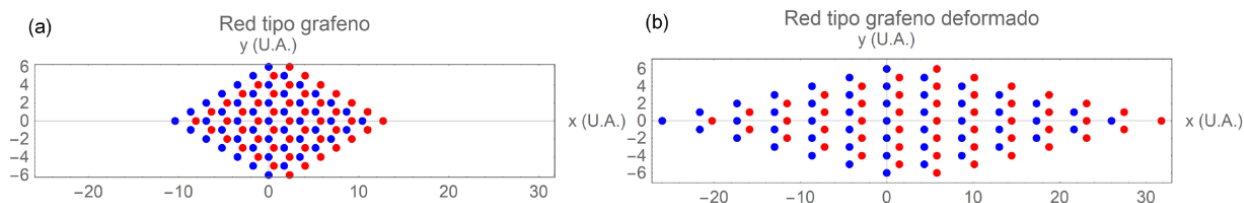


Figura 3.2: Red tipo grafeno con 98 átomos con su estructura (a) no deformada y (b) deformada. A esta red le corresponden los siguientes valores en el código: $a = 1$, $n = 3$, $m = 3$, $\gamma = 5$, $A = 1$, $x_0 = 0$, $y_0 = 0$, $\delta x = 1.5$, $\delta y = 0$.

Como se puede observar en la Figura 3.2, se hizo una deformación en la dirección x por una cantidad de $\delta x = 1.5$ con el punto fijo siendo el origen $(0, 0)$. Esto se puede visualizar como si la red con la estructura de panal perfecta se estirara de ambos extremos en la dirección x para dar lugar a la nueva red deformada que se muestra en la Figura 3.2.

Así, se tiene a disposición un programa que deforma redes dependiendo de los parámetros que el usuario especifique. Hay que recordar que nuestro enfoque es explorar estados atrapados dentro del bulto de la red tipo grafeno, pero en geometrías sin deformación los únicos estados atrapados que existen son los que se ubican en la orilla de la red hexagonal finita. Ahora que podemos deformar la red tipo grafeno prístina, podemos observar los eigenvectores del sistema para identificar de alguna manera si existen estados atrapados que surgen dentro del bulto de la red.

Se hizo un nuevo programa cuyo título es *Eigensistema de una red deformada de grafeno en 2D.nb* y el código se encuentra en el Apéndice A en la página 96. En resumen, lo que hace este programa es calcular todos los eigenvalores y eigenvectores para la red tipo grafeno deformado, y exporta como imágenes todas las gráficas de los eigenvectores.

Con este programa actual y el anterior *Deformación de una red de grafeno en 2D.nb* ya se pueden buscar los

estados atrapados dentro del bulto de una red tipo grafeno deformado.

Se corrieron varias veces ambos programas para buscar estados atrapados dentro de la red tipo grafeno deformado. Se variaron parámetros como el tamaño de la red y el valor de δx para las deformaciones en la dirección x . Se obtuvo una cantidad numerosa de gráficas para analizar. Después de un laborioso proceso de analizar todas las imágenes de una sola red, se apuntó el número y el valor numérico del eigenvalor de las gráficas que potencialmente contenían estados atrapados dentro del bulto. Para algunos parámetros de interacción entre los átomos de la red y ciertas deformaciones se observaron estados potencialmente atrapados en el bulto, además de los conocidos estados atrapados en las orillas dejando fijo el número de sitios en la red. Ahora nuestro interés es saber si esos mismos estados permanecen en los mismos lugares si se aumenta el tamaño de la red y se deja constante los demás parámetros (apotema, radio de interacción, factor de decaimiento, amplitud, coordenadas del punto fijo y las deformaciones en x y en y). Sin importar el tamaño de la red se busca que los estados atrapados estén siempre en los mismos lugares. Esto es sumamente importante porque muestra que los estados que se encuentran atrapados en los mismos sitios de la red dependen de la deformación aplicada y del radio de interacción y no del tamaño de la red.

Lo que se hizo fue fijar valores específicos de los parámetros de la red y correr los programas pero para diferentes tamaños de la red para ver si los estados atrapados que aparecen dentro del bulto permanecen en los mismos lugares al crecer la red. Los parámetros comunes de la redes son los siguientes: $a = 1, r = 3l, \gamma = 5, A = 1, x_0 = 0, y_0 = 0, \delta x = 0.8$, y $\delta y = 0$. El tamaño de las redes estudiadas fueron de 242, 578 y 882 átomos. Una vez generadas todas las gráficas de los eigenvectores correspondientes a las tres redes de diferente tamaño pero con los demás parámetros iguales, se compararon los valores numéricos de los eigenvalores y de ahí se observaron las gráficas para ver si los potenciales estados atrapados permanecían en las tres redes. Para establecer cuáles de los eigenestados son buenos candidatos a ser estados atrapados dentro del bulto en la red deformada, proponemos que deben cumplir los siguientes criterios:

- (I) Los estados atrapados deben aparecer en la misma posición dentro del bulto sin importar el tamaño de la red.
- (II) Los eigenvectores que cumplan el criterio anterior deben tener aproximadamente el mismo eigenvalor.

Si ambos requisitos se cumplen para los tres tamaños de la red, entonces los estados atrapados correspondientes son candidatos a permanecer atrapados a pesar de crecer a infinito la red.

Antes de mostrar los resultados obtenidos, primero se muestra una gráfica de todos los eigenvalores correspondientes a las tres redes deformadas. La gráfica consiste en tres conjuntos de datos, en donde cada conjunto representa una red deformada de tamaño específico. El eje x corresponde a los eigenvalores (en unidades arbitrarias) mientras que el eje y corresponde a un valor arbitrario para cada tamaño de la red. El significado de este valor arbitrario es separar los eigenvalores de cada red entre sí y tener cada conjunto de eigenvalores en su propia línea horizontal. Los eigenvalores están representados por puntos de un color específico según corresponde al tamaño de la red que pertenece. El objetivo de construir esta gráfica es para fijarnos que los eigenvalores de los potenciales estados atrapados sean aproximadamente igual para las tres redes de diferente tamaño. Encima de esta gráfica se graficaron líneas verticales en los eigenvalores correspondientes al promedio de los tres eigenvalores para cada potencial estado atrapado. Se encontraron siete potenciales estados atrapados y estos cumplen con el primer criterio establecido anteriormente. Al fijarnos en cada línea vertical, se debe observar tres puntos de color diferente muy cercanos a dicha línea. Esto significa que los eigenvalores son aproximadamente iguales para el potencial estado atrapado en cual nos estamos fijando, y con esto se cumple el segundo criterio y así se puede considerar como un estado que permanece atrapado sin importar el tamaño de la red. A continuación en la siguiente página en la Figura 3.3a se muestra la se ha descrito en este párrafo, y posteriormente en los incisos restantes ((b)-(e)) de la misma imagen se muestran partes de la misma gráfica pero amplificadas para observar mejor los eigenvalores que están cercanos entre sí.

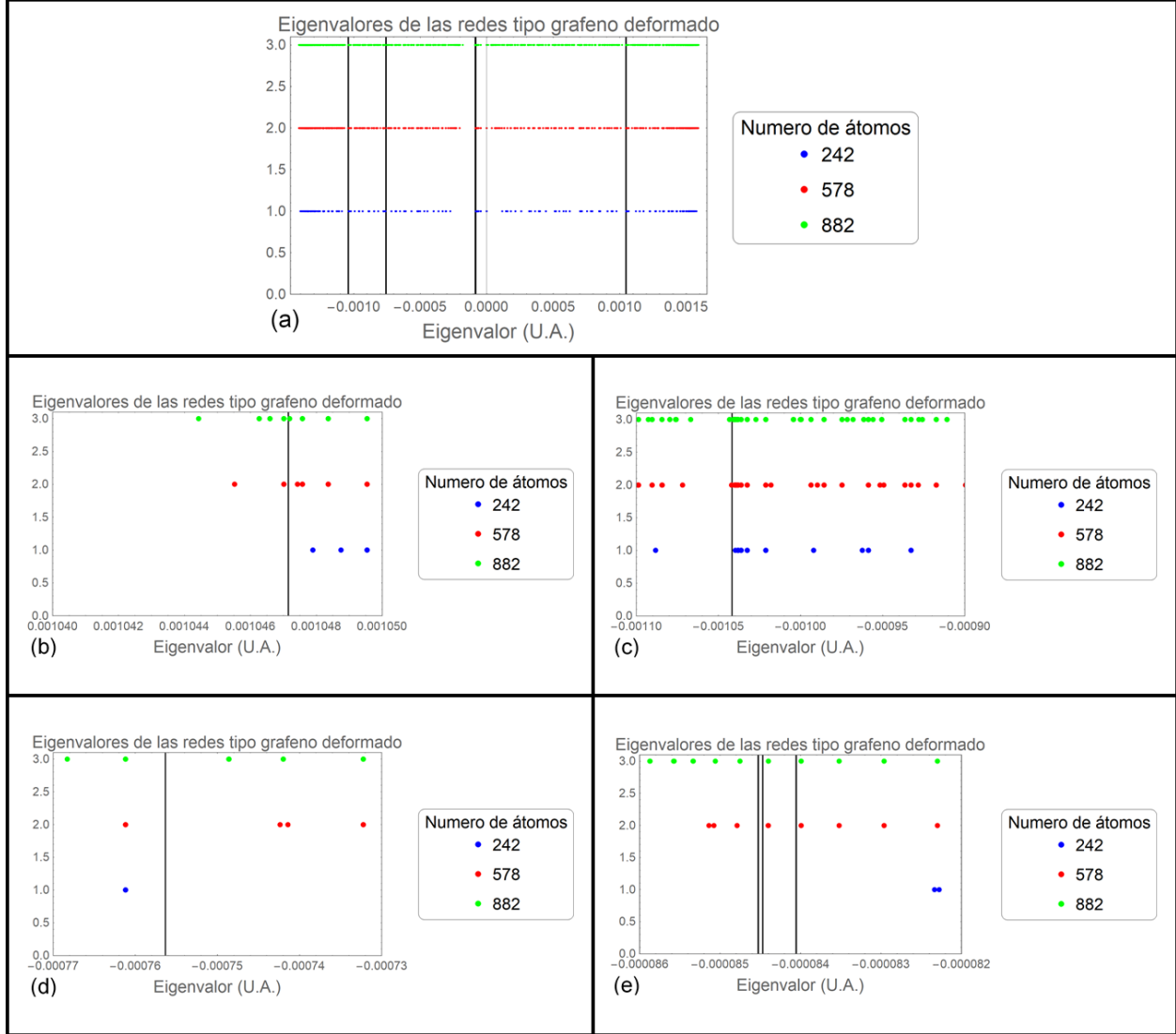


Figura 3.3: (a) Todos los eigenvalores (en unidades arbitrarias) para las redes deformadas con 242, 578 y 882 átomos de tamaño, con parámetros $a = 1, r = 3l, \gamma = 5, A = 1, x_0 = 0, y_0 = 0, \delta x = 0.8$ y $\delta y = 0$. Los promedios de los eigenvalores para cada estado potencialmente atrapado están señalados por las líneas negras verticales. (b) Eigenvalores de las tres redes deformadas, amplificadas en la región $1.04 \times 10^{-3} \leq x \leq 1.05 \times 10^{-3}$. Los eigenvalores, que corresponden a los potenciales estados atrapados, para las redes de 242, 578 y 882 átomos son $1.04875 \times 10^{-3}, 1.04552 \times 10^{-3},$ y 1.04719×10^{-3} , respectivamente. El promedio de estos eigenvalores se encuentra en $x = 1.04715 \times 10^{-3}$ y se señala con la línea vertical negra. (c) Eigenvalores de las tres redes deformadas, amplificadas en la región $-1.1 \times 10^{-3} \leq x \leq -9 \times 10^{-4}$. Los eigenvalores para las redes de 242, 578 y 882 átomos son $-1.03972 \times 10^{-3}, -1.0421 \times 10^{-3},$ y -1.04322×10^{-3} , respectivamente. Aquí también la línea vertical corresponde al promedio de estos eigenvalores de los potenciales estados atrapados en las tres redes, y corresponde a $x = -1.04168 \times 10^{-3}$. (d) Eigenvalores de las tres redes deformadas, amplificadas en la región $-7.7 \times 10^{-4} \leq x \leq -7.3 \times 10^{-4}$. Los eigenvalores para las redes de 242, 578 y 882 átomos son $-7.16684 \times 10^{-4}, -7.42392 \times 10^{-4},$ y -8.09959×10^{-4} , respectivamente. El promedio de estos eigenvalores se encuentra en $x = -7.56345 \times 10^{-4}$. (e) Eigenvalores de las tres redes deformadas, amplificadas en la región $-8.6 \times 10^{-5} \leq x \leq -8.2 \times 10^{-5}$. En este caso hubieron cuatro potenciales estados atrapados que se identificaron. Los eigenvalores para la red de 242 átomos son $-8.23334 \times 10^{-5}, -8.22783 \times 10^{-5}, -8.15018 \times 10^{-5},$ y -8.15018×10^{-5} . Los eigenvalores para la red de 578 átomos son $-8.51371 \times 10^{-5}, -8.50789 \times 10^{-5}, -8.4791 \times 10^{-5},$ y -8.47888×10^{-5} . Los eigenvalores para la red de 882 átomos son $-8.61079 \times 10^{-5}, -8.60543 \times 10^{-5}, -8.58751 \times 10^{-5},$ y -8.58719×10^{-5} . Los promedios de estos eigenvalores corresponden a $x = -8.45261 \times 10^{-5}, -8.44705 \times 10^{-5}, -8.4053 \times 10^{-5}, -8.40542 \times 10^{-5}$.

Debido al nivel de amplificación que se muestra en la Figura 3.3a, no es fácil observar si hay potenciales estados atrapados cerca de los promedios de sus eigenvalores correspondientes, es decir, no se ve con claridad si los puntos de diferentes colores están muy cercanos a las líneas verticales. Lo que se hizo entonces fueron varias amplificaciones de la Figura 3.3a en varias regiones para poder visualizar mejor las líneas verticales y los puntos de diferentes colores alrededor de éstas. A continuación se discuten sobre dichas amplificaciones de la Figura 3.3a.

En la Figura 3.3b se observa que por donde pasa la línea vertical hay puntos verdes y rojos cercanas a ella, mientras que el punto azul más cercano está más alejado al respecto. Uno podría pensar que lo que nos muestra esta gráfica no es un estado atrapado porque los puntos no tocan la línea vertical, sin embargo hay que tener en cuenta que la variación de los eigenvalores empieza a partir del sexto dígito después del punto decimal. Es decir, los tres eigenvalores comienzan con 0.00104 y empiezan a variar después de esa cantidad, pero como la cantidad que varía cada uno es muy pequeña se puede ignorar y entonces se puede considerar que los tres eigenvalores están degenerados. Este caso de los eigenvalores degenerados aparece en las gráficas de las Figura 3.3b, 3.3c, 3.3d y 3.3e.

Como se puede observar en la Figura 3.3c, hay puntos muy cercanos a la línea vertical. Nuevamente, estos puntos no tocan la línea, pero la variación en los eigenvalores empieza a partir del quinto dígito después del punto decimal. Se puede considerar que los tres eigenvalores están degenerados.

Para el caso de la Figura 3.3d los puntos sí están alejados de la línea vertical, pero como la variación de los eigenvalores empieza a partir del cuarto dígito después del punto decimal, se puede considerar que los tres eigenvalores están degenerados.

En la Figura 3.3e se observa que sí hay puntos verdes y rojos cercanos a las líneas verticales, pero los puntos azules están alejados, además de que solo se ven tres líneas y no cuatro. Esto se debe a la amplificación de la gráfica, pero en realidad sí hay cuatro líneas presentes, solo que dos de ellas están muy cercanas entre sí porque están ubicadas en $x = -8.4053 \times 10^{-5}$ y $x = -8.40542 \times 10^{-5}$. Nuevamente, todos los eigenvalores empiezan a diferir a partir del sexto dígito después del punto decimal, y por lo tanto se puede considerar que están degenerados.

Ahora que hemos visto que los eigenvalores de los estados atrapados son aproximadamente iguales, tenemos que visualizar los eigenvectores correspondientes. A continuación en la siguiente página se muestran las gráficas de los eigenvectores de los potenciales estados atrapados que se identificaron.

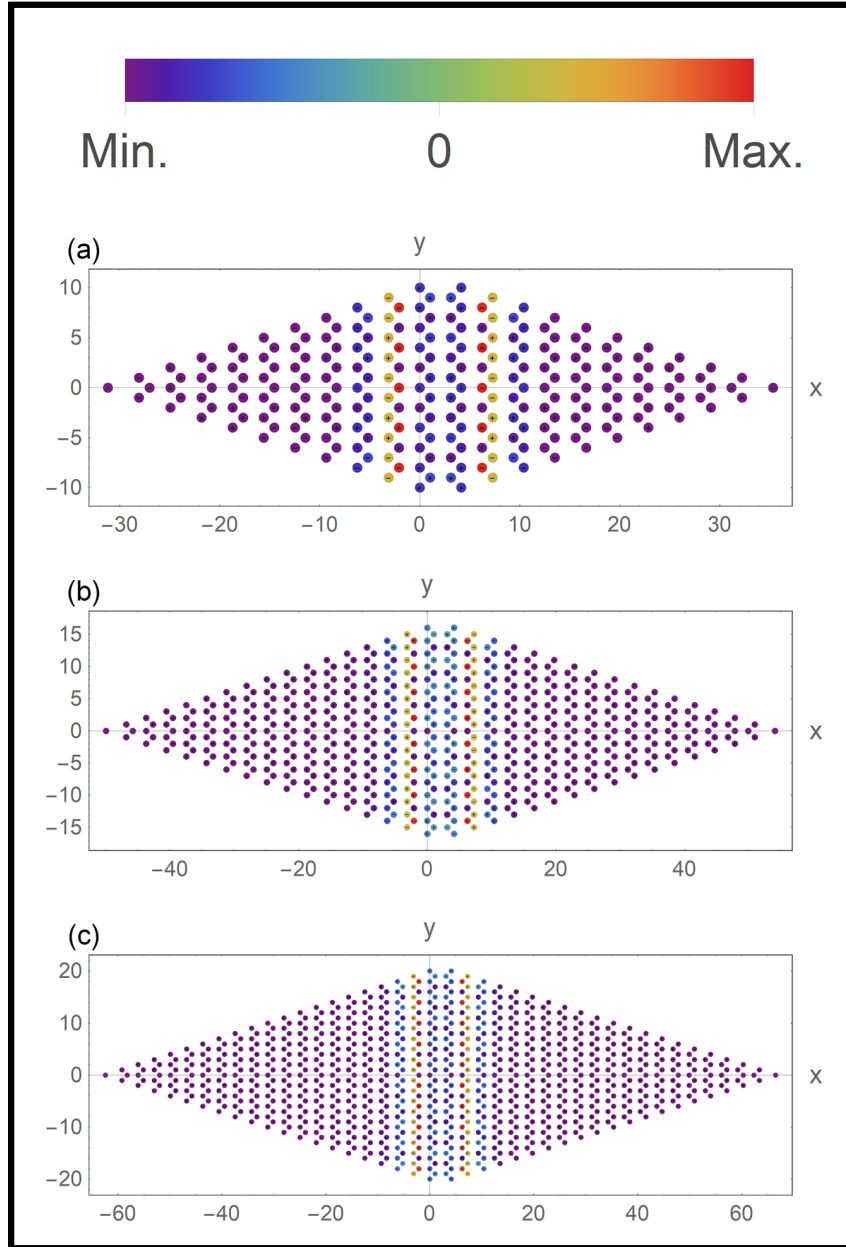


Figura 3.4: A estas tres gráficas de eigenvectores con interacción a cuartos vecinos para (a) eigenvalor 1.04875×10^{-3} y con 242 átomos, (b) eigenvalor 1.04552×10^{-3} y con 578 átomos, y (c) eigenvalor 1.04719×10^{-3} y con 882 átomos, le corresponden los siguientes parámetros en el código: $a = 1, r = 3l, \gamma = 5, A = 1, x_0 = 0, y_0 = 0, \delta x = 0.8$ y $\delta y = 0$. Tanto el eje horizontal como el vertical están en unidades arbitrarias.

Como se puede observar en las tres gráficas de arriba, hay estados atrapados a la largo de las dos líneas verticales que se ubican cercanas al centro de la red. Se sabe que estos son estados atrapados porque visualmente son de color rojo y alrededor de éstos puntos se encuentran puntos cuyo color pertenecen al otro extremo del espectro según la normalización que se hizo en el programa. Si alrededor de estos puntos rojos estuvieran puntos cuyos colores fueran un gradiente en vez de ser el mismo color, entonces no corresponderían a estados atrapados. Aquí se observa que los estados atrapados de la red de la Figura 3.4a con 242 átomos permanecen en las mismas posiciones cuando se agranda la red a 578 átomos y posteriormente a 882 átomos en las Figuras 3.4b y 3.4c, respectivamente.

En seguida se muestran más gráficas de los otros estados potencialmente atrapados que se lograron identificar.

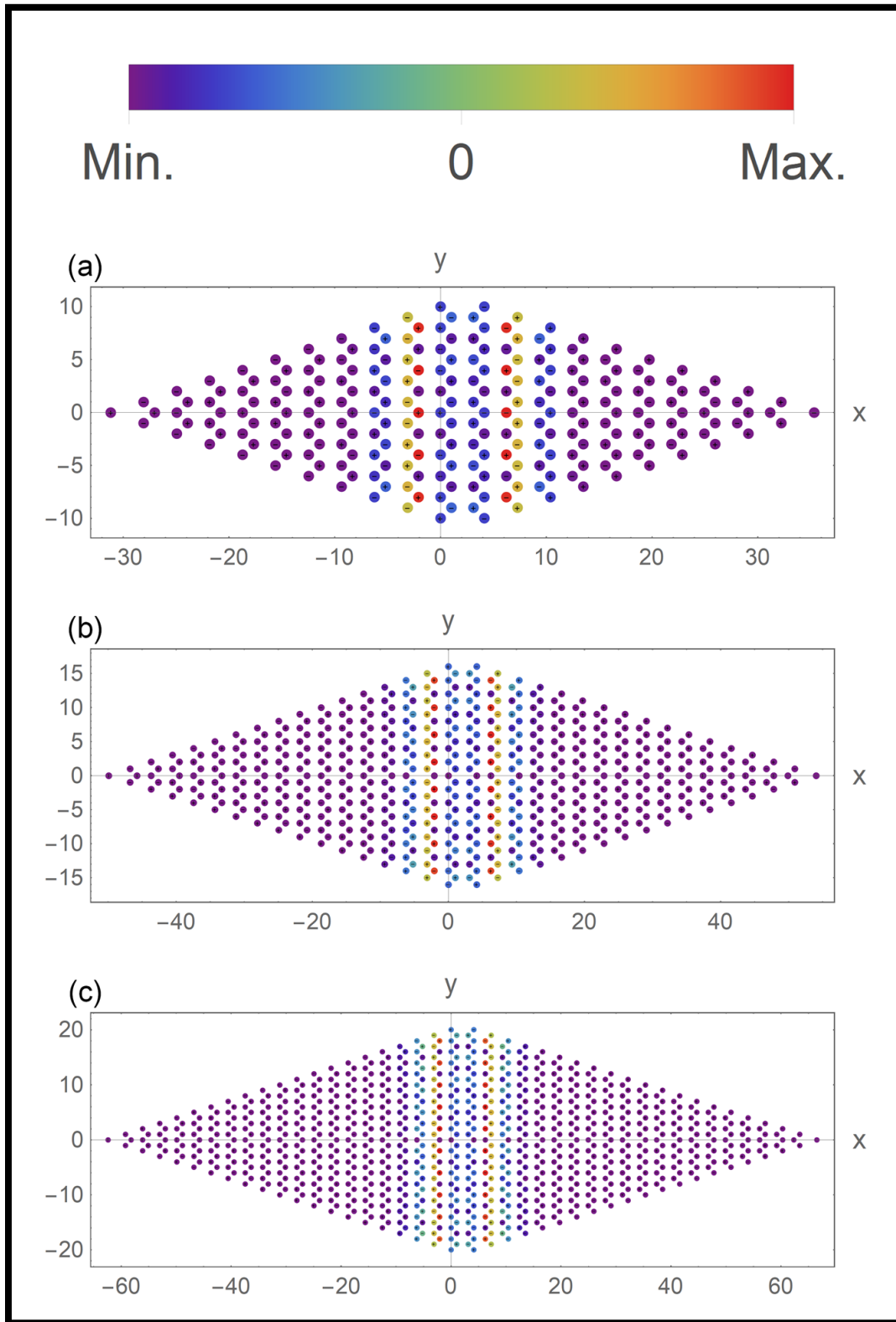


Figura 3.5: A estas tres gráficas de eigenvectores con interacción a cuartos vecinos para (a) eigenvalor -1.03972×10^{-3} y con 242 átomos, (b) eigenvalor -1.0421×10^{-3} y con 578 átomos, y (c) eigenvalor -1.04322×10^{-3} y con 882 átomos, le corresponden los siguientes parámetros en el código: $a = 1, r = 3l, \gamma = 5, A = 1, x_0 = 0, y_0 = 0, \delta x = 0.8$ y $\delta y = 0$. Tanto el eje horizontal como el vertical están en unidades arbitrarias.

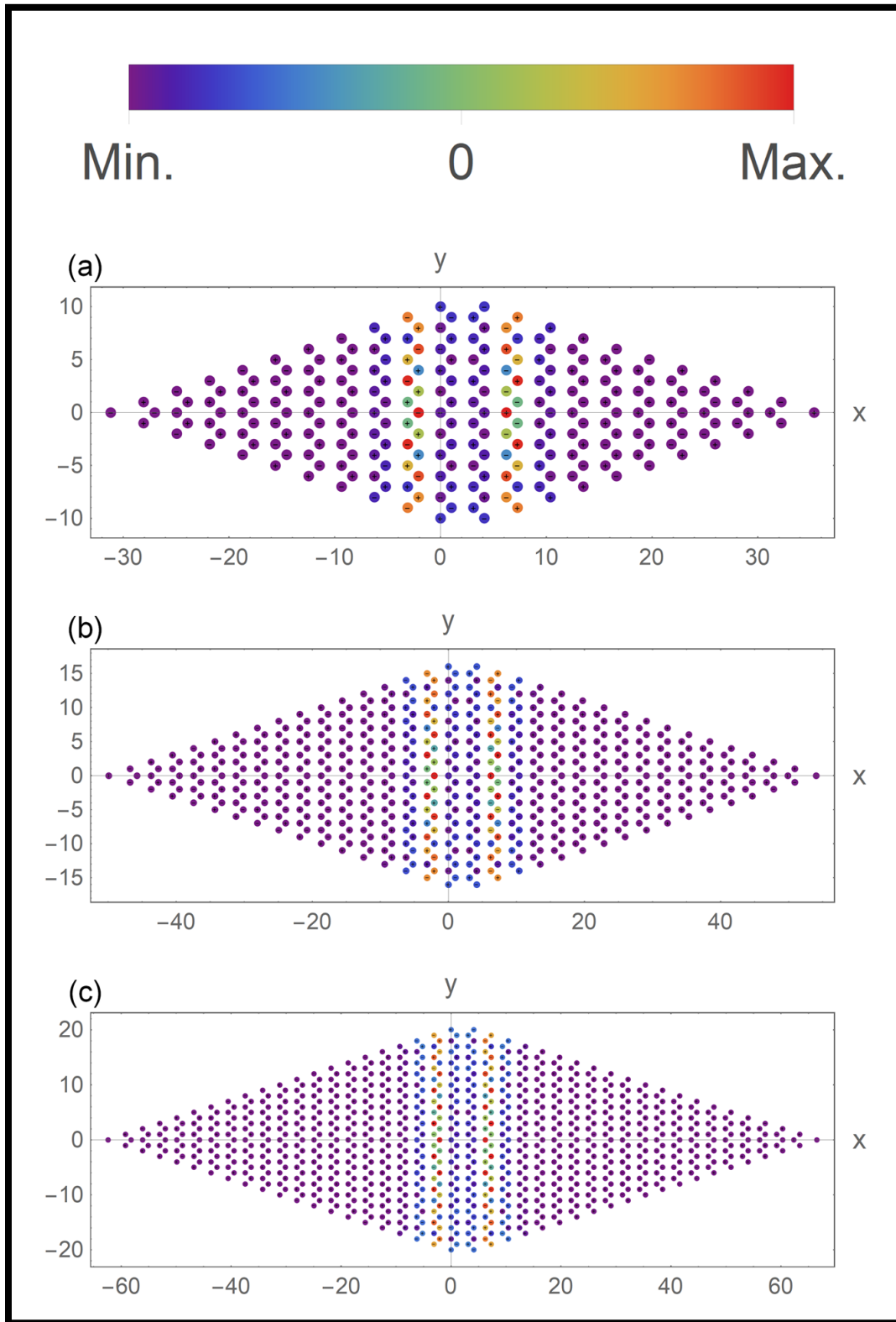


Figura 3.6: A estas tres gráficas de eigenvectores con interacción a cuartos vecinos para (a) eigenvalor -7.16684×10^{-4} y con 242 átomos, (b) eigenvalor -7.42392×10^{-4} y con 578 átomos, y (c) eigenvalor -8.09959×10^{-4} y con 882 átomos, le corresponden los siguientes parámetros en el código: $a = 1, r = 3l, \gamma = 5, A = 1, x_0 = 0, y_0 = 0, \delta x = 0.8$ y $\delta y = 0$. Tanto el eje horizontal como el vertical están en unidades arbitrarias.

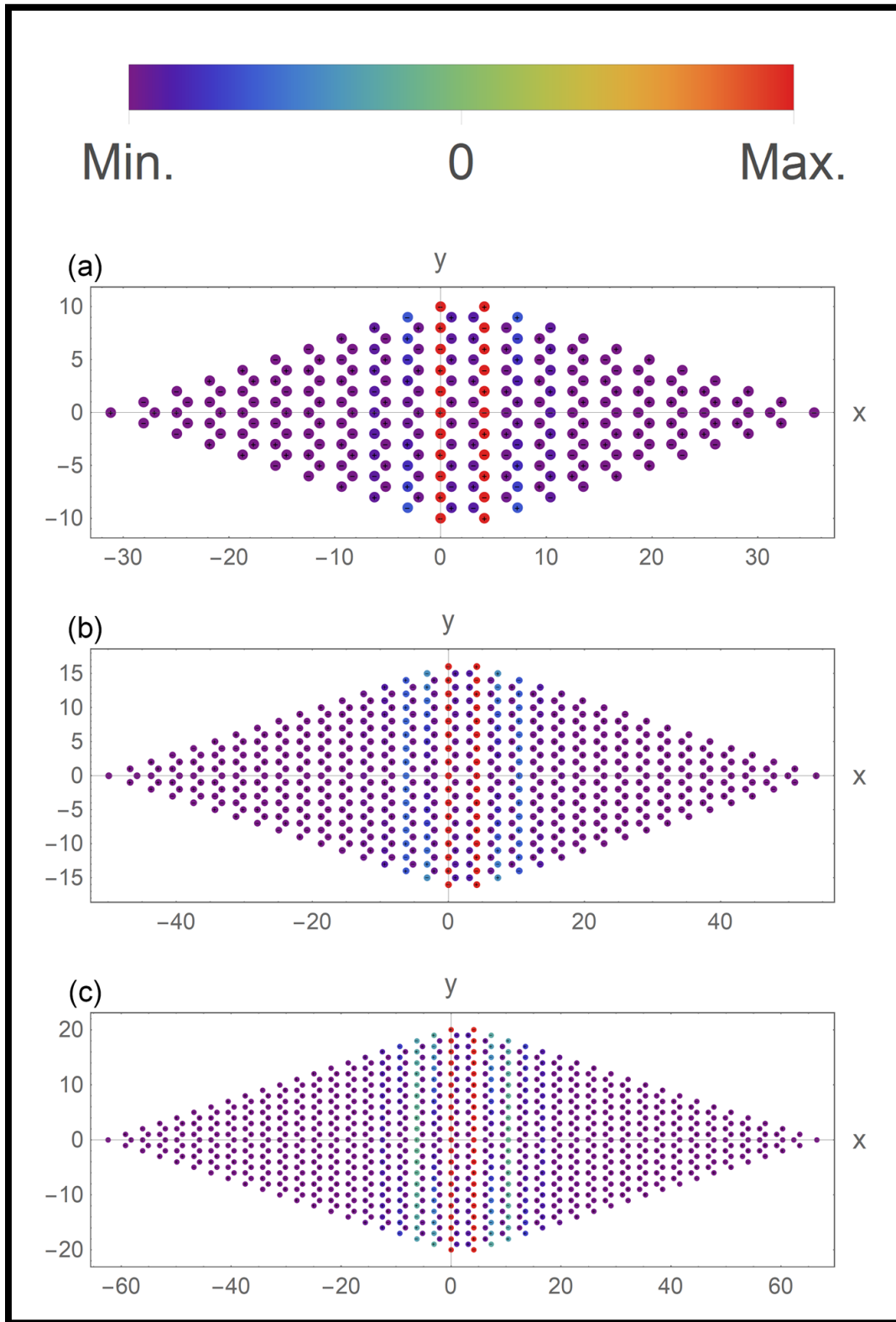


Figura 3.7: A estas tres gráficas de eigenvectores con interacción a cuartos vecinos para (a) eigenvalor -8.23334×10^{-5} y con 242 átomos, (b) eigenvalor -8.51371×10^{-5} y con 578 átomos, y (c) eigenvalor -8.61079×10^{-5} y con 882 átomos, le corresponden los siguientes parámetros en el código: $a = 1, r = 3l, \gamma = 5, A = 1, x_0 = 0, y_0 = 0, \delta x = 0.8$ y $\delta y = 0$. Tanto el eje horizontal como el vertical están en unidades arbitrarias.

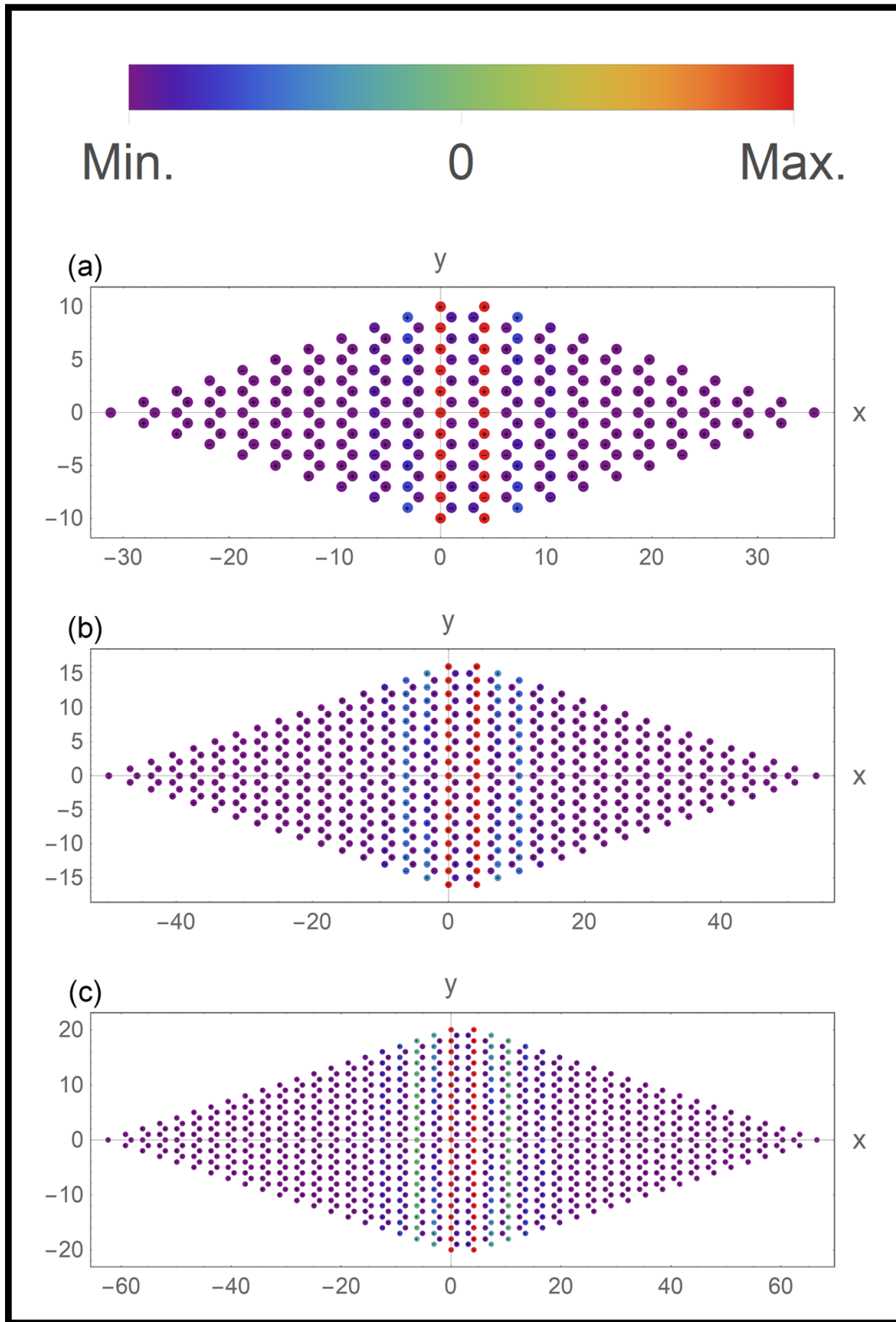


Figura 3.8: A estas tres gráficas de eigenvectores con interacción a cuartos vecinos para (a) eigenvalor -8.22783×10^{-5} y con 242 átomos, (b) eigenvalor -8.50789×10^{-5} y con 578 átomos, y (c) eigenvalor -8.60543×10^{-5} y con 882 átomos, le corresponden los siguientes parámetros en el código: $a = 1, r = 3l, \gamma = 5, A = 1, x_0 = 0, y_0 = 0, \delta x = 0.8$ y $\delta y = 0$. Tanto el eje horizontal como el vertical están en unidades arbitrarias.

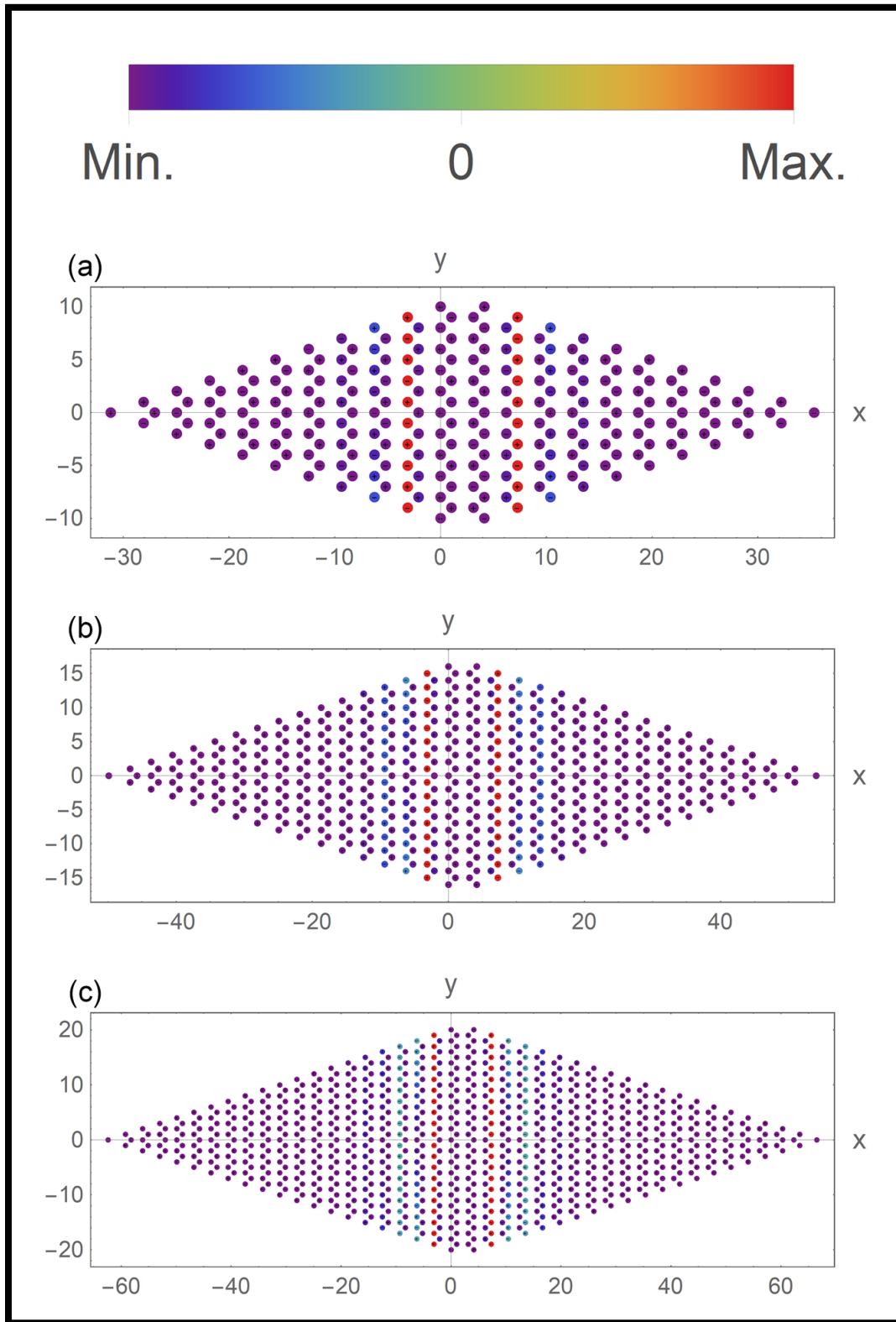


Figura 3.9: A estas tres gráficas de eigenvectores con interacción a cuartos vecinos para (a) eigenvalor -8.15018×10^{-5} y con 242 átomos, (b) eigenvalor -8.4791×10^{-5} y con 578 átomos, y (c) eigenvalor -8.58751×10^{-5} y con 882 átomos, le corresponden los siguientes parámetros en el código: $a = 1, r = 3l, \gamma = 5, A = 1, x_0 = 0, y_0 = 0, \delta x = 0.8$ y $\delta y = 0$. Tanto el eje horizontal como el vertical están en unidades arbitrarias.

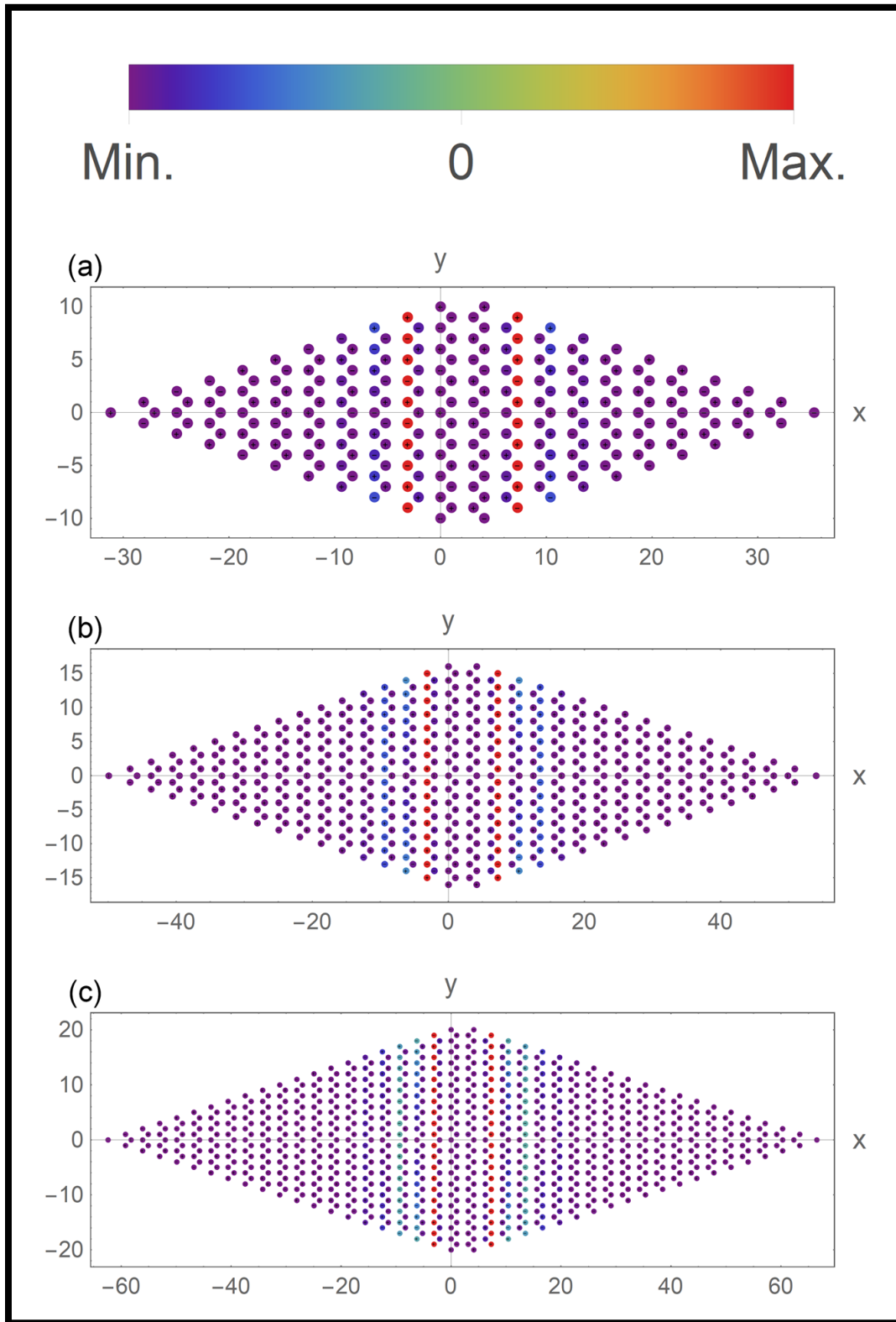


Figura 3.10: A estas tres gráficas de eigenvectores con interacción a cuartos vecinos para (a) eigenvalor -8.15018×10^{-5} y con 242 átomos, (b) eigenvalor -8.47888×10^{-5} y con 578 átomos, y (c) eigenvalor -8.58719×10^{-5} y con 882 átomos, le corresponden los siguientes parámetros en el código: $a = 1, r = 3l, \gamma = 5, A = 1, x_0 = 0, y_0 = 0, \delta x = 0.8$ y $\delta y = 0$. Tanto el eje horizontal como el vertical están en unidades arbitrarias.

Observando las gráficas de los eigenvectores de las Figuras 3.4 al 3.10, se nota que hay degeneración porque las gráficas son muy similares entre sí y tienen aproximadamente los mismos eigenvalores. Hay degeneración entre las gráficas de las Figuras 3.4 y 3.5, Figuras 3.7 y 3.8, y Figuras 3.9 y 3.10.

Como se ha explicado en este capítulo, se tiene que hacer una búsqueda extensa sobre todos los archivos generados por los programas para identificar posibles estados atrapados. Esto es un proceso que es tardado, y debido a esto se propusieron varios métodos para filtrar las imágenes de las gráficas de los eigenvectores para así tener menos archivos que analizar con la esperanza de acelerar el proceso de la búsqueda de los estados atrapados. Estas ideas se programaron, y aunque no se logró tener un filtrado completamente satisfactorio, en seguida se explica lo que hizo para el programa que obtuvo los mejores resultados en cuanto al filtrado de las imágenes generadas por los programas.

La idea del filtrado de las imágenes es generar gráficas que muestran el promedio de la suma de los valores absolutos al cuadrado de los componentes de los eigenvectores por columna, en base a las gráficas generados por los programas construidos, las cuales algunas de ellas se muestran en las Figuras del 3.4 al 3.10. En el eje x de estas nuevas gráficas se encuentran las posiciones de todas las columnas de los componentes de los eigenvectores. Cada columna comparte un x_i único. Sea z_i el valor del eigenvector para un punto dado (x_i, y_i) de las gráficas de los eigenvectores. En el eje y de estas nuevas gráficas se encuentran los siguientes valores:

$$P_i = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N |z_i|^2, \quad (3.3)$$

en donde N es el número de puntos que se encuentran en la columna cuya coordenada en x es x_i . Una vez calculados todos estos valores anteriores, se grafican los puntos y se unen por medio de líneas. Teniendo ahora todas las coordenadas (x_i, y_i) , con una función propia de Mathematica se procede a calcular la función interpolada que representa dichos parámetros. Esta función interpolada nos servirá para lo que se quiere hacer más adelante.

Recordando del filtrado de imágenes anteriormente mencionado, primero se quería generar las gráficas que representaran los promedios de los componentes de los eigenvectores por columna en las redes deformadas tipo grafeno. Ahora que ya se tienen todas esas gráficas, se hace el filtrado de todas esas imágenes de acuerdo a los siguientes dos criterios: que el área de la región limitada por las líneas punteadas verticales (límite izquierdo y derecho) y por debajo de la función interpolada sea mayor que cero, y que el máximo valor en el eje y sea mayor o igual que un límite superior. Con estos dos criterios se esperó filtrar las gráficas que podrían ser candidatos a estados atrapados. El primer criterio del área es debido a que se están buscando los estados atrapados dentro del bulto de la red deformada, cercana al centro. Entonces, para todos los tamaños de las redes (que son los mismos que en las Figuras del 3.4 al 3.10) se colocaron dos límites en el eje x , uno en $-10 + l$ y el otro en $10 + l$. Se toma la función interpolada mencionada en el párrafo anterior y se integra esa función entre los límites izquierdos y derechos. Esto nos va a dar el área para esa región. El segundo criterio es debido a que se piensa que los estados atrapados van a dar un valor máximo en el eje y dentro de la región de integración. Idealmente, se espera que los estados atrapados sean de la forma como se muestra en Figura 3.10, por ejemplo. El límite superior sirve para filtrar los posibles estados atrapados y se piensa que éstos dan el valor máximo en el eje y en las gráficas. Se observaron las gráficas de los promedios de los eigenvectores y se eligió el valor del límite superior, aunque éste estuvo cambiando de valor para ver si se filtrado mejoraba. Aplicando estos dos criterios en los programas, teniendo los mismos parámetros para las tres redes de tamaño diferente pero variando el valor del límite superior, efectivamente sí se filtraron las imágenes.

A continuación en la siguiente página se muestra una imagen generada con este programa para dar un ejemplo de las gráficas con las que se trabajó.

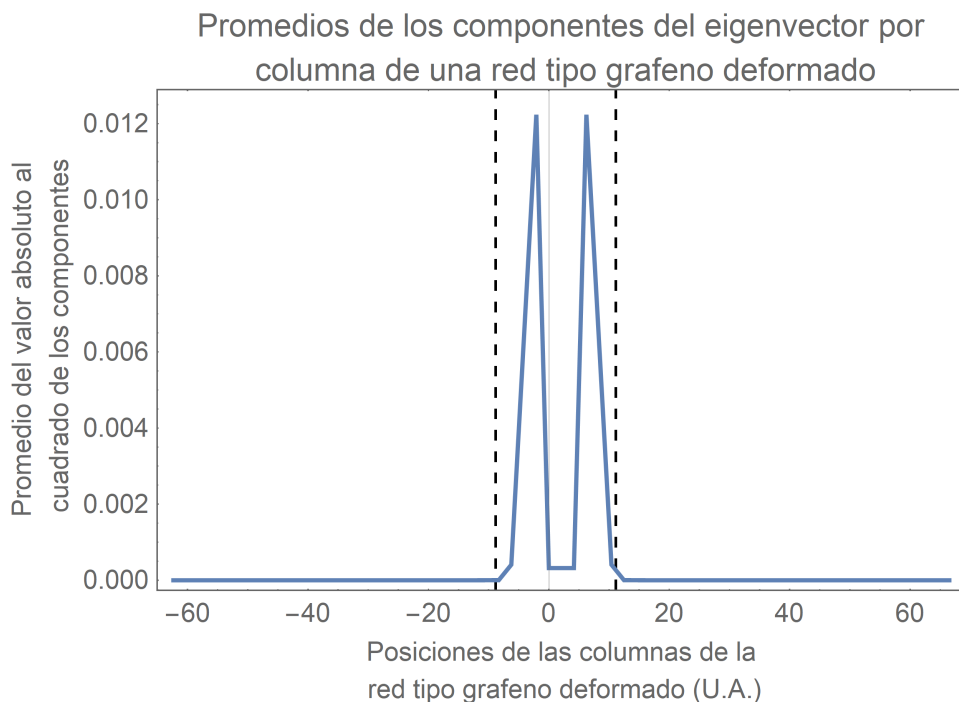


Figura 3.11: Gráfica del promedio de la suma de los valores absolutos al cuadrado de los componentes del eigenvector por columna, correspondiente al eigenvalor 8.12836×10^{-4} en unidades arbitrarias y a los siguientes parámetros en el código: $a = 1$, $n = 10$, $m = 10$, $k = 882$, $r = 3l$, $\gamma = 5$, $A = 1$, $x_0 = 0$, $y_0 = 0$, $\delta x = 0.8$ y $\delta y = 0$. Las líneas punteadas se encuentran en $x = -10 + l$, $x = 10 + l$ y $y = 0.012$. El área dentro de la región limitada por las líneas punteadas verticales y por debajo de la función interpolada es de 8.12836×10^{-2} en unidades arbitrarias.

Las imágenes filtrados son del tipo como se muestra en la Figura 3.11. El problema ahora con el filtrado aún queda una cantidad numerosa de imágenes por analizar, y esto llevara un tiempo para buscar los potenciales estados atrapados. Se decidió no seguir por este camino y en vez de eso se crearon redes tipo grafeno de diferente frontera para después aplicar una deformación y buscar nuevos estados atrapados.

Las nuevas redes tipo grafeno que se construyeron son de geometría rectangular, a diferencia de la forma de rombo que se ha visto hasta ahora. Se creó un nuevo programa, cuyo nombre es **Deformación de una red cuadrada de grafeno.nb**, en base al programa ya existente **Deformación de una red de grafeno en 2D.nb**. De hecho, ambos programas son casi idénticos con excepción en la parte en donde se crea la red rectangular de grafeno a partir de la red original.

A continuación se muestra como ejemplo una gráfica de una red rectangular antes y después de aplicar una deformación.

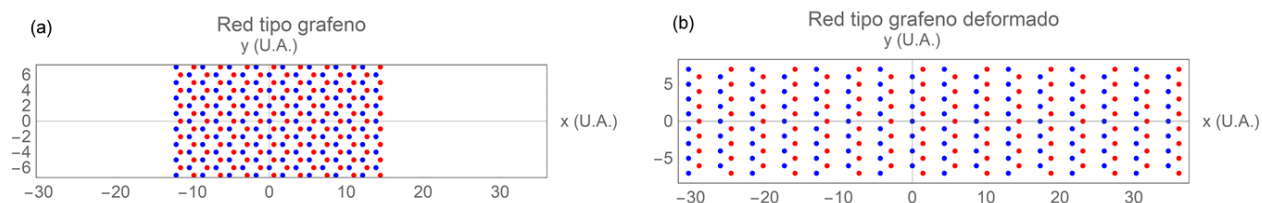


Figura 3.12: Red tipo grafeno con frontera rectangular con 240 átomos con su estructura (a) no deformada y (b) deformada. A esta red le corresponden los siguientes valores en el código: $a = 1$, $n = 8$, $m = 8$, $r = 0$, $\gamma = 5$, $A = 1$, $x_0 = 0$, $y_0 = 0$, $\delta x = 1.5$, $\delta y = 0$.

Ahora lo que se hizo fue crear tres redes rectangulares de diferente tamaño y también que fueran consistentes con los tamaños de las tres redes con frontera de forma de rombo. Se aplicaron las mismas deformaciones que en el caso de las redes anteriores, y para las tres redes se exportaron los datos para poder usarlos posteriormente. Con el programa que ya se ha descrito antes, **Eigensistema de una red deformada de grafeno en 2D.nb**, se importan los valores de los parámetros exportados y se determina el eigensistema correspondiente. El programa después crea y exporta k gráficas de los eigenvectores, siendo k el número de átomos en la red. Para las tres redes rectangulares de diferente tamaño se generaron sus respectivas gráficas de eigenvectores, y nuevamente, como se ha hecho antes, se hizo la búsqueda de los estados atrapados en todas las imágenes. Se debe recordar que para que los estados atrapados permanezcan en las tres redes de diferente tamaño la forma de las gráficas debe ser similar y los eigenvalores deben ser aproximadamente iguales. Después de una búsqueda extensa se logran identificar algunos estados atrapados, y en seguida se muestran los resultados obtenidos.

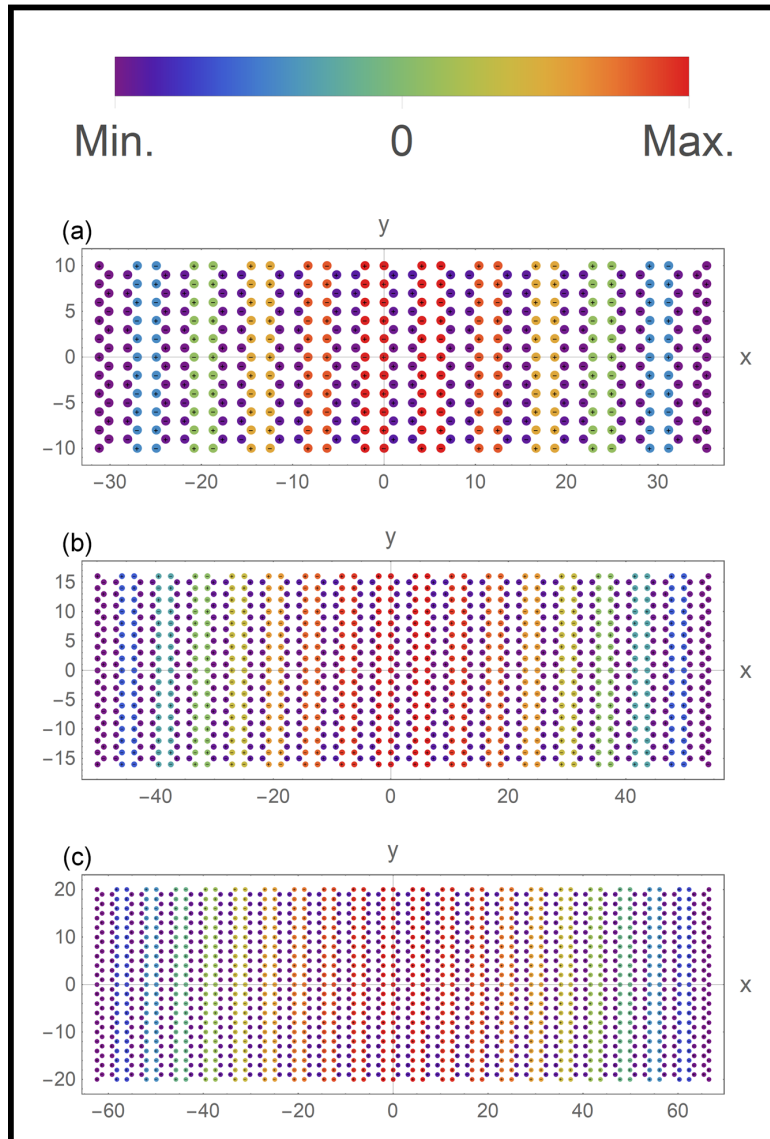


Figura 3.13: A estas tres gráficas de eigenvectores con interacción a cuartos vecinos para (a) eigenvalor -1.12206×10^{-4} y 462 átomos, (b) eigenvalor -1.15089×10^{-4} y con 1122 átomos, y (c) eigenvalor -1.16096×10^{-4} y con 1722 átomos, le corresponden los siguientes parámetros en el código: $a = 1, r = 3l, \gamma = 5, A = 1, x_0 = 0, y_0 = 0, \delta x = 0.8$ y $\delta y = 0$. Tanto el eje horizontal como el vertical están en unidades arbitrarias.

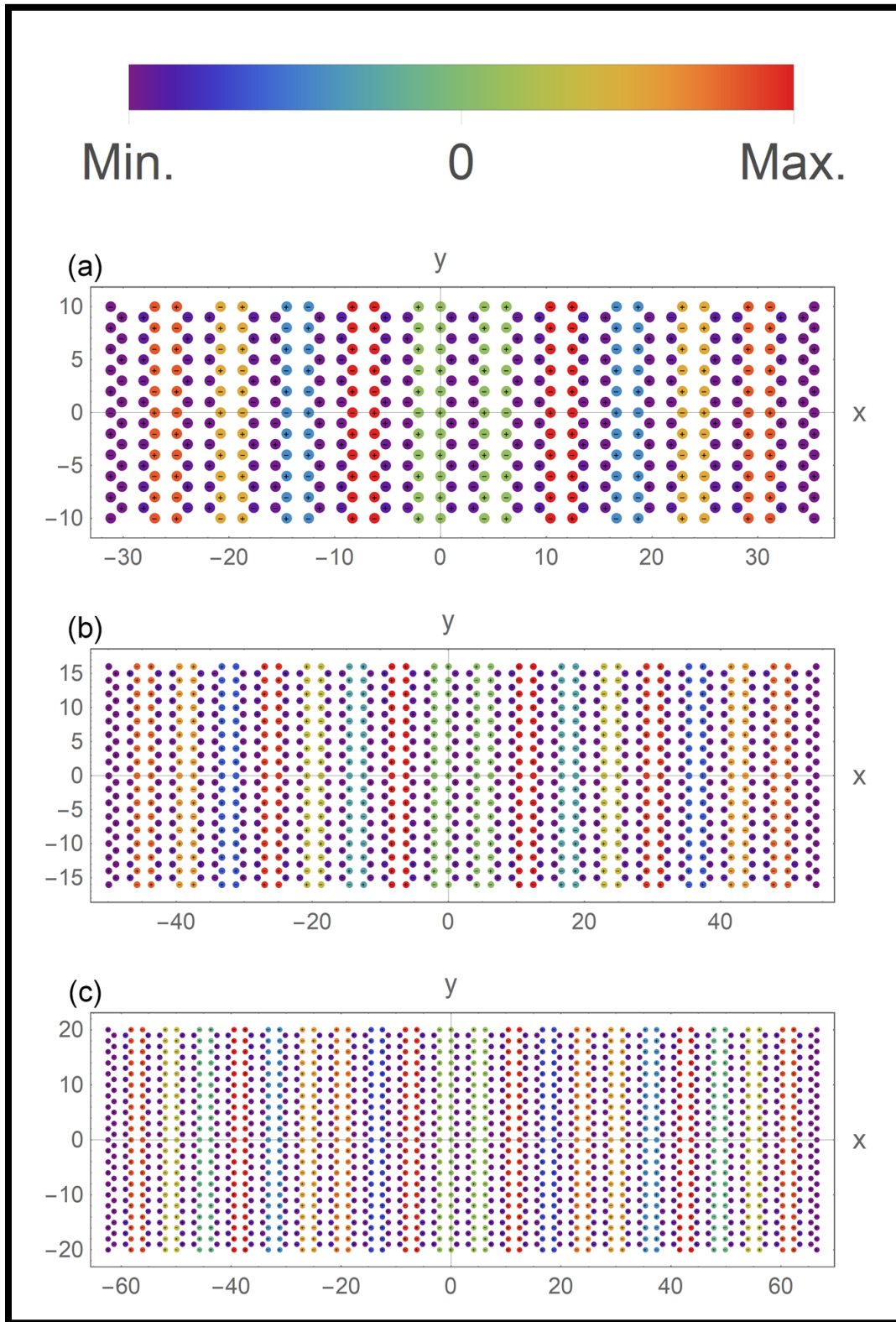


Figura 3.14: A estas tres gráficas de eigenvectores con interacción a cuartos vecinos para (a) eigenvalor -1.1219×10^{-4} y con 462 átomos, (b) eigenvalor -1.15072×10^{-4} y con 1122 átomos, y (c) eigenvalor -1.16076×10^{-4} y con 1722 átomos, le corresponden los siguientes parámetros en el código: $a = 1, r = 3l, \gamma = 5, A = 1, x_0 = 0, y_0 = 0, \delta x = 0.8$ y $\delta y = 0$. Tanto el eje horizontal como el vertical están en unidades arbitrarias.

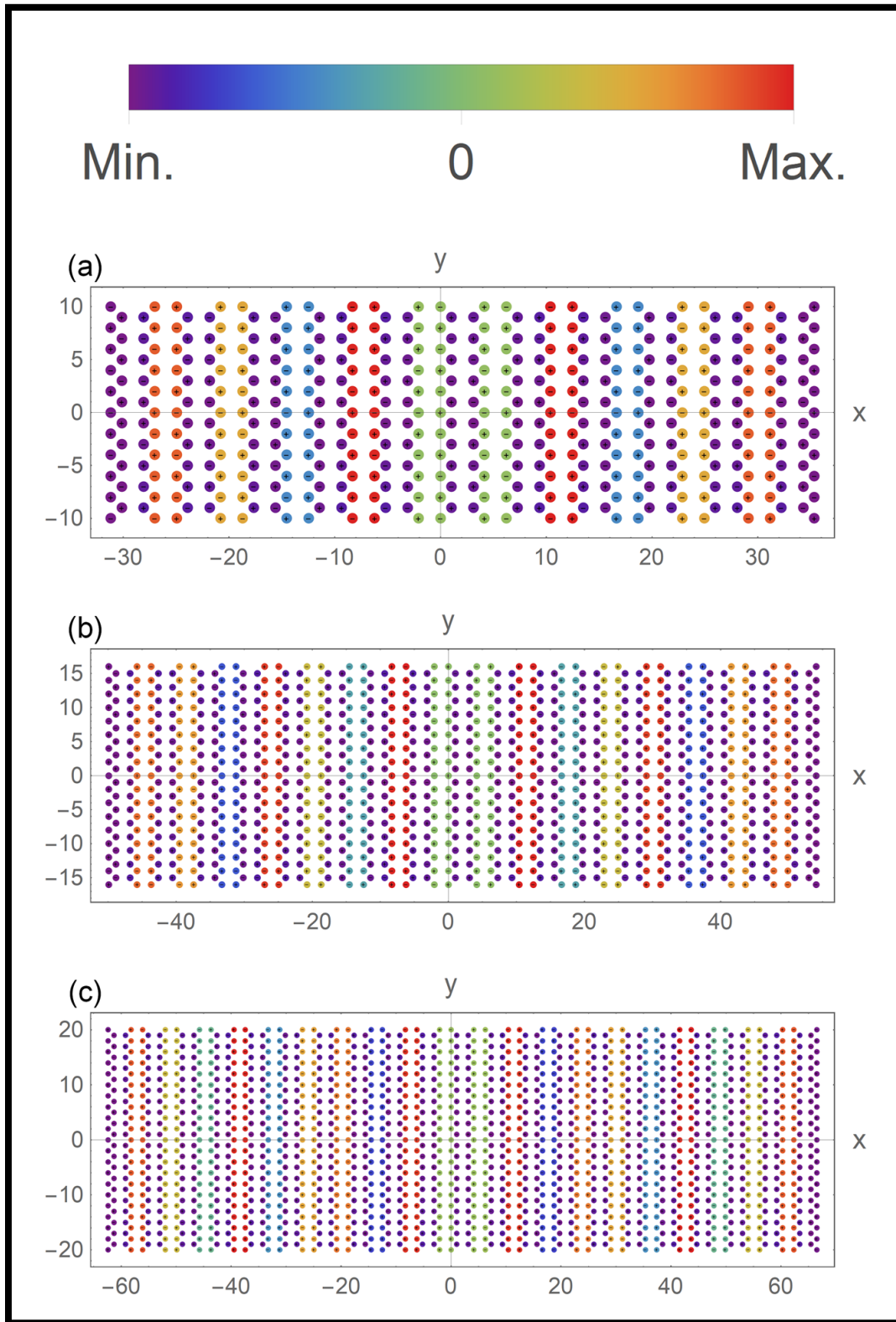


Figura 3.15: A estas tres gráficas de eigenvectores con interacción a cuartos vecinos para (a) eigenvalor -1.12167×10^{-4} y con 462 átomos, (b) eigenvalor -1.15045×10^{-4} y con 1122 átomos, y (c) eigenvalor -1.16052×10^{-4} y con 1722 átomos, le corresponden los siguientes parámetros en el código: $a = 1, r = 3l, \gamma = 5, A = 1, x_0 = 0, y_0 = 0, \delta x = 0.8$ y $\delta y = 0$. Tanto el eje horizontal como el vertical están en unidades arbitrarias.

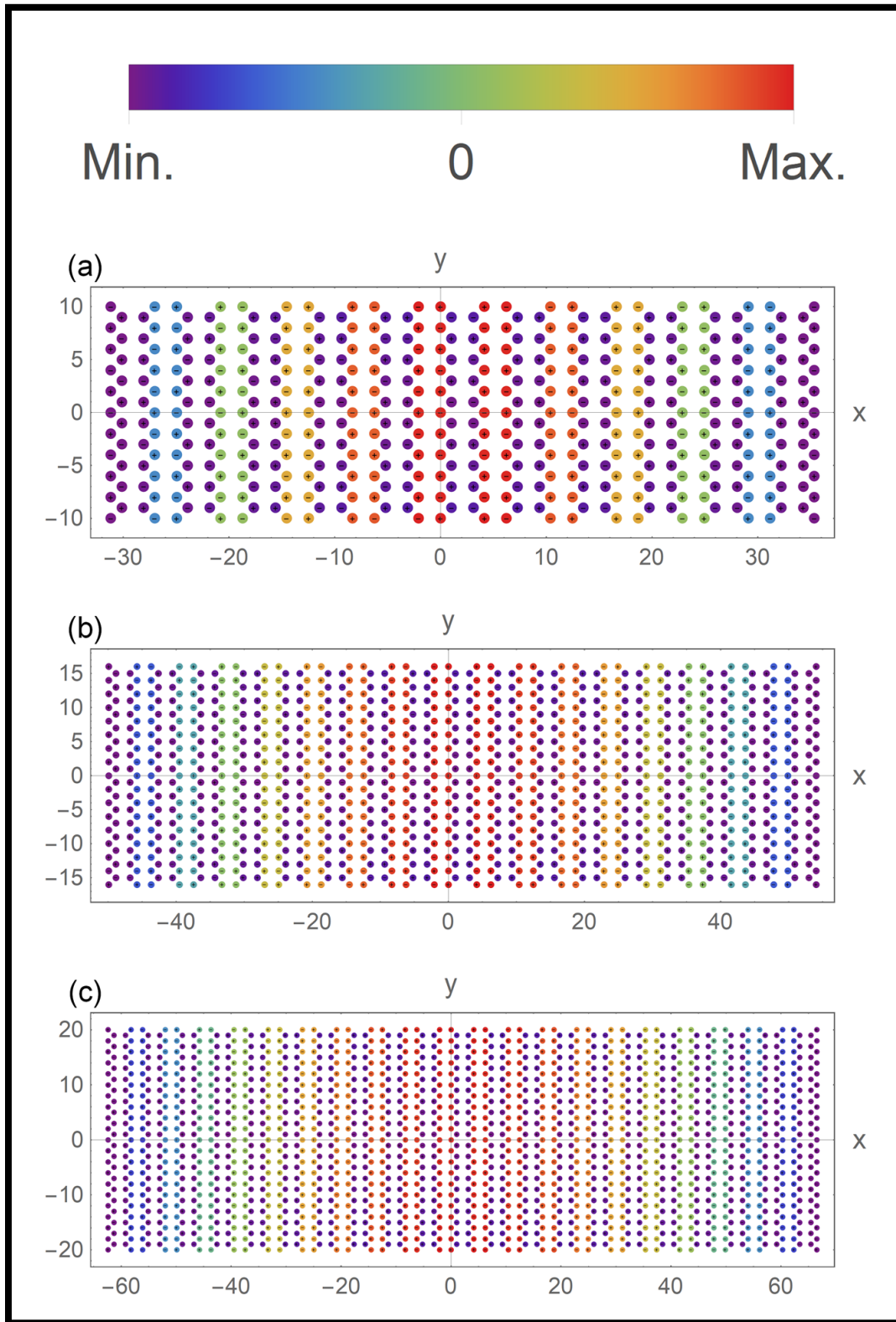


Figura 3.16: A estas tres gráficas de eigenvectores con interacción a cuartos vecinos para (a) eigenvalor -1.12152×10^{-4} y con 462 átomos, (b) eigenvalor -1.15028×10^{-4} y con 1122 átomos, y (c) eigenvalor -1.16033×10^{-4} y con 1722 átomos, le corresponden los siguientes parámetros en el código: $a = 1, r = 3l, \gamma = 5, A = 1, x_0 = 0, y_0 = 0, \delta x = 0.8$ y $\delta y = 0$. Tanto el eje horizontal como el vertical están en unidades arbitrarias.

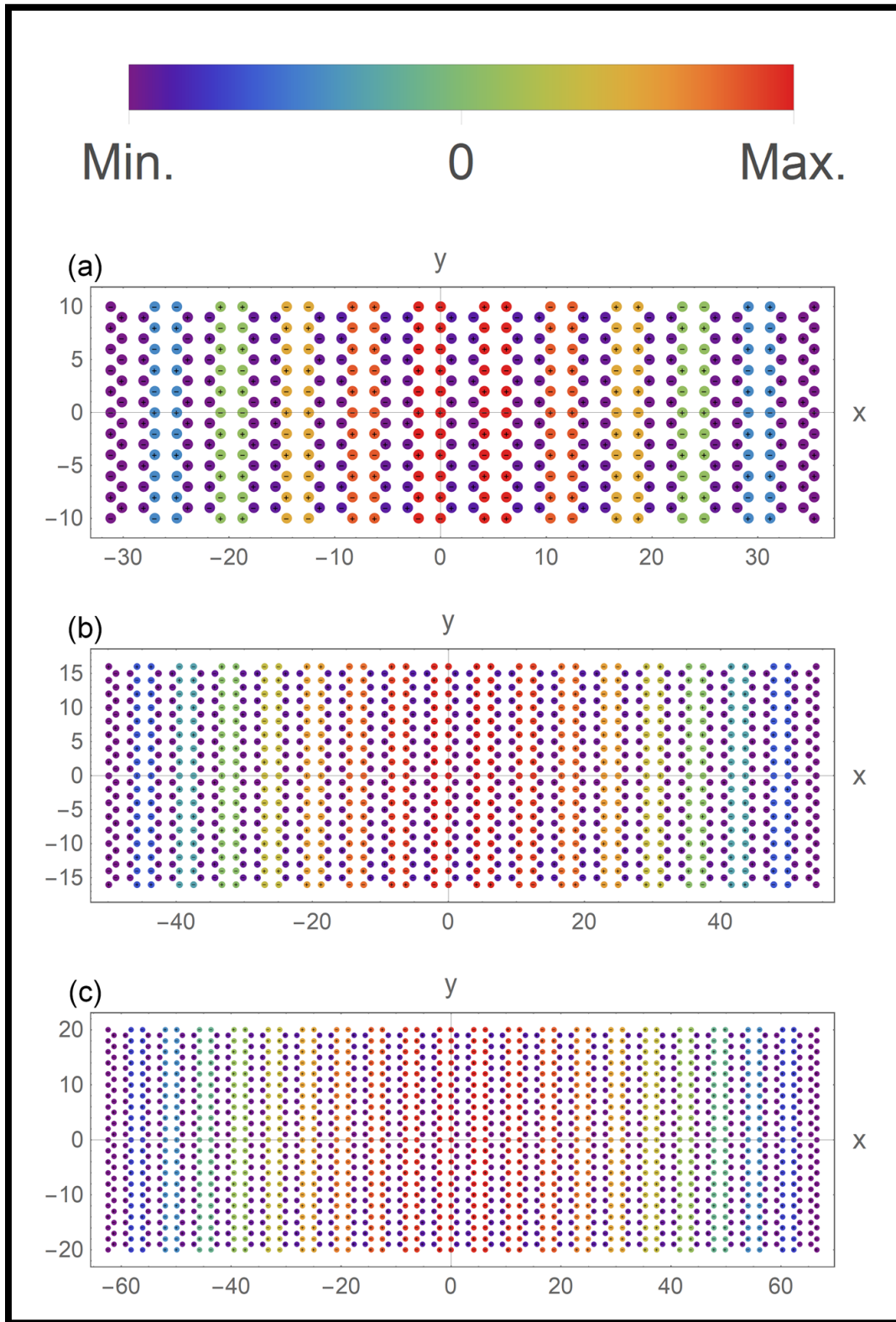


Figura 3.17: A estas tres gráficas de eigenvectores con interacción a cuartos vecinos para (a) eigenvalor -5.29088×10^{-5} y con 462 átomos, (b) eigenvalor -5.5859×10^{-5} y con 1122 átomos, y (c) eigenvalor -5.69028×10^{-5} y con 1722 átomos, le corresponden los siguientes parámetros en el código: $a = 1, r = 3l, \gamma = 5, A = 1, x_0 = 0, y_0 = 0, \delta x = 0.8$ y $\delta y = 0$. Tanto el eje horizontal como el vertical están en unidades arbitrarias.

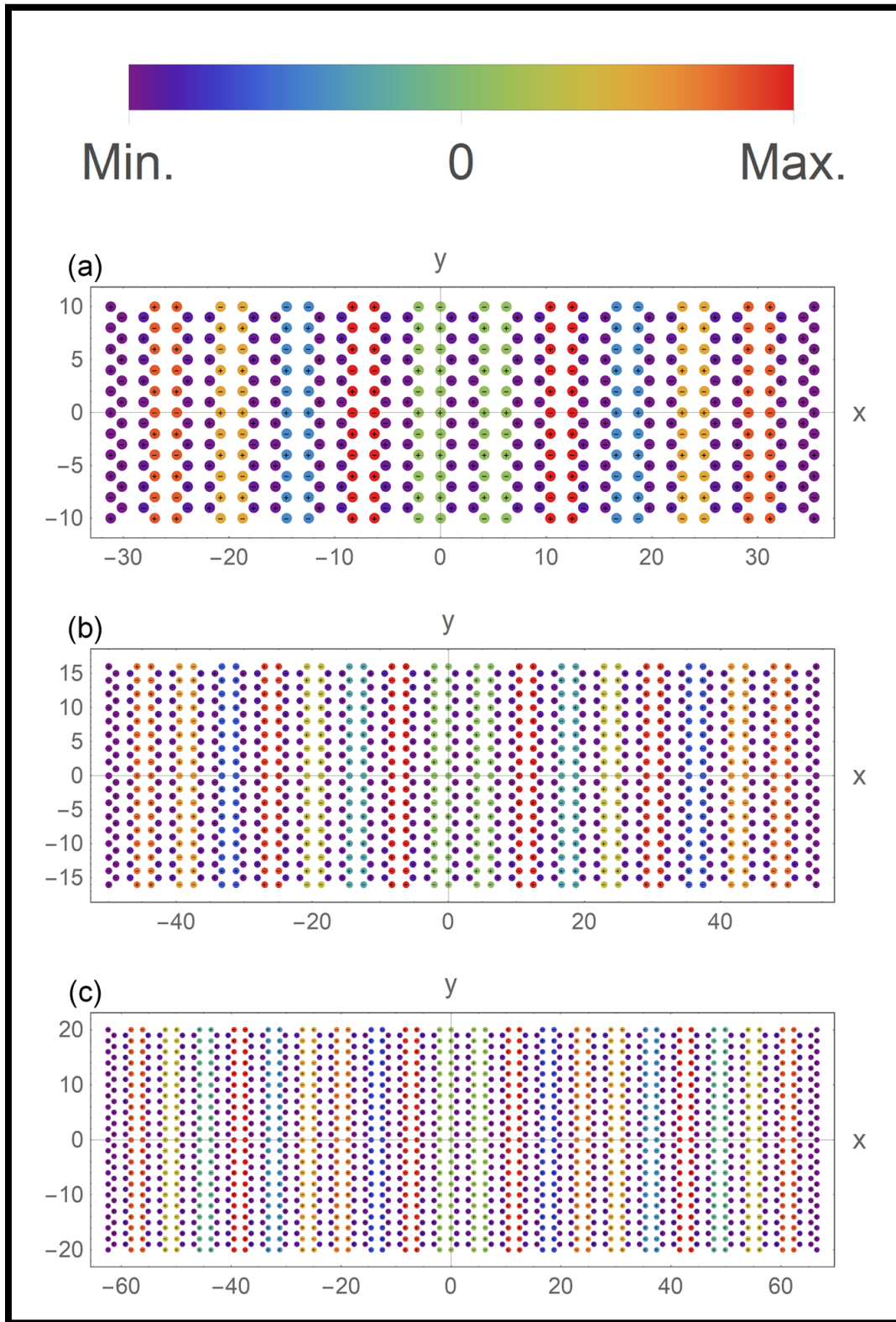


Figura 3.18: A estas tres gráficas de eigenvectores con interacción a cuartos vecinos para (a) eigenvalor -5.28934×10^{-5} y con 462 átomos, (b) eigenvalor -5.58524×10^{-5} y con 1122 átomos, y (c) eigenvalor -5.68831×10^{-5} y con 1722 átomos, le corresponden los siguientes parámetros en el código: $a = 1, r = 3l, \gamma = 5, A = 1, x_0 = 0, y_0 = 0, \delta x = 0.8$ y $\delta y = 0$. Tanto el eje horizontal como el vertical están en unidades arbitrarias.

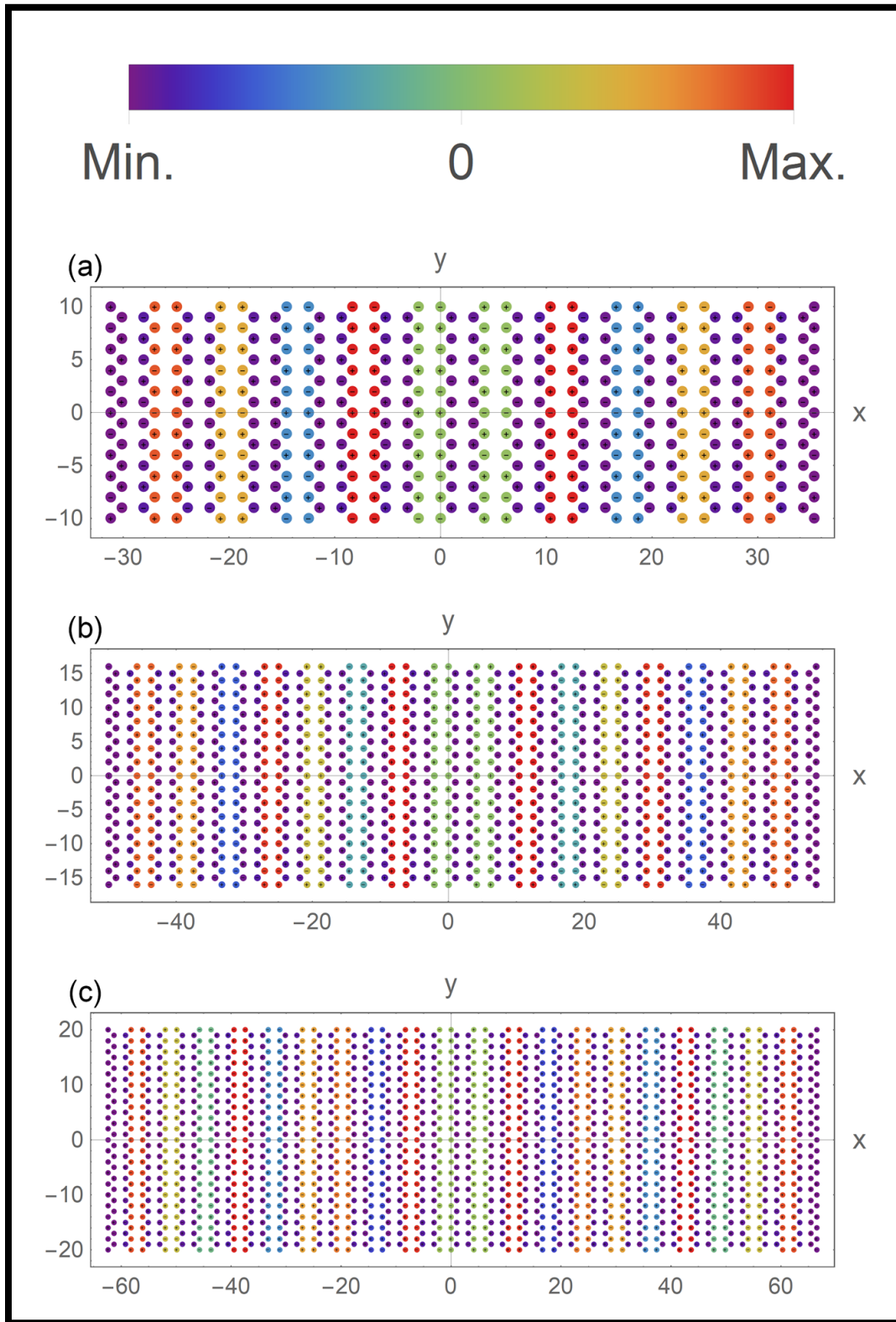


Figura 3.19: A estas tres gráficas de eigenvectores con interacción a cuartos vecinos para (a) eigenvalor -5.28697×10^{-5} y con 462 átomos, (b) eigenvalor -5.58242×10^{-5} y con 1122 átomos, y (c) eigenvalor -5.68592×10^{-5} y con 1722 átomos, le corresponden los siguientes parámetros en el código: $a = 1, r = 3l, \gamma = 5, A = 1, x_0 = 0, y_0 = 0, \delta x = 0.8$ y $\delta y = 0$. Tanto el eje horizontal como el vertical están en unidades arbitrarias.

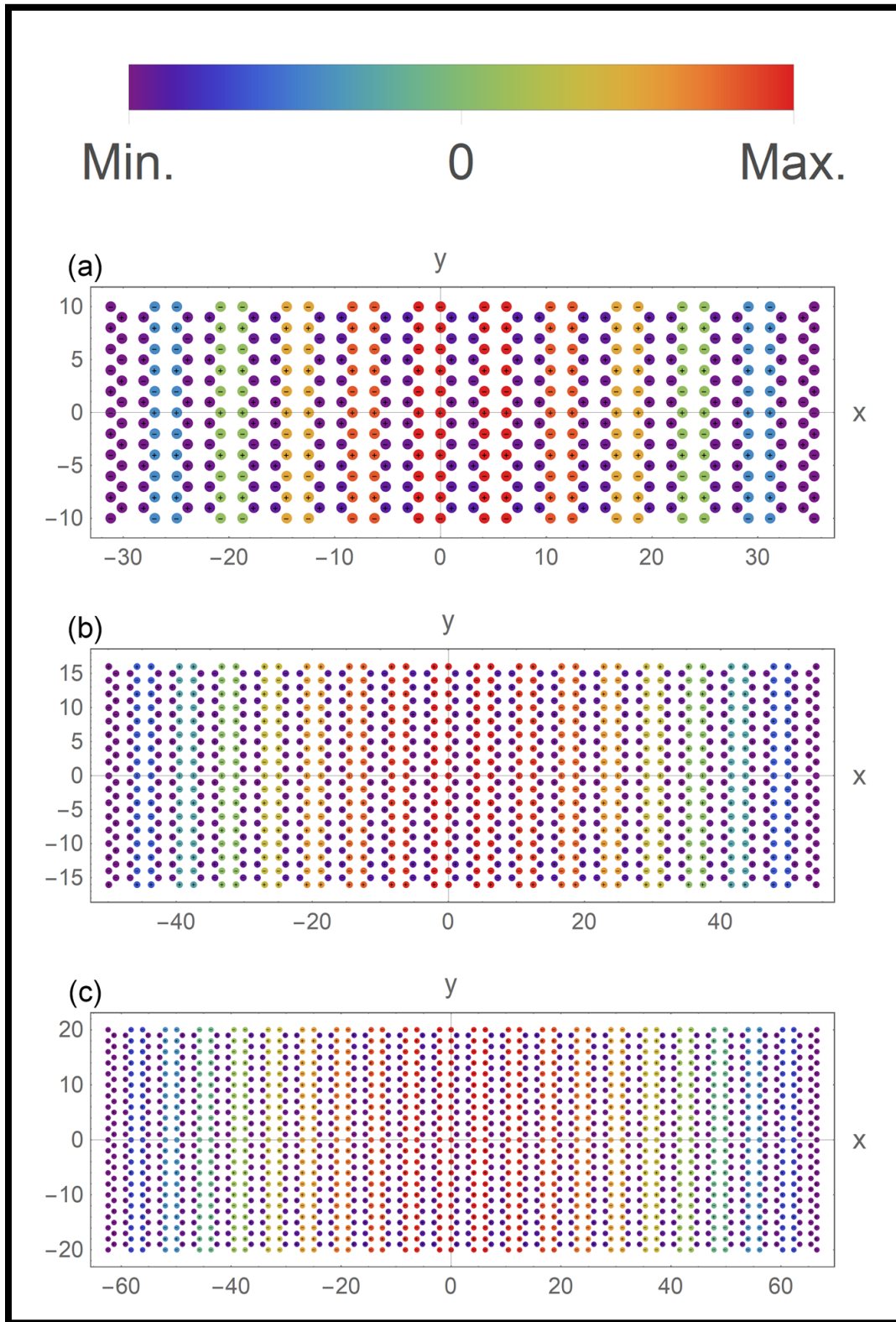


Figura 3.20: A estas tres gráficas de eigenvectores con interacción a cuartos vecinos para (a) eigenvalor -5.28539×10^{-5} y con 462 átomos, (b) eigenvalor -5.58068×10^{-5} y con 1122 átomos, y (c) eigenvalor -5.68381×10^{-5} y con 1722 átomos, le corresponden los siguientes parámetros en el código: $a = 1, r = 3l, \gamma = 5, A = 1, x_0 = 0, y_0 = 0, \delta x = 0.8$ y $\delta y = 0$. Tanto el eje horizontal como el vertical están en unidades arbitrarias.

Como se puede observar en las Figuras del 3.13 al 3.20, se nota que los estados atrapados que aparecen son periódicos a lo largo de la red rectangular. La periodicidad de estos estados atrapados es debido a que la frontera de la red es rectangular, a diferencia de las redes con frontera en forma de rombo que se presentaron anteriormente. Los estados atrapados que surgen en las redes con frontera de rombo no sobreviven en una red con frontera rectangular.

Aunque las fronteras para ambas redes tipo grafeno son diferentes, en los dos casos se encontraron estados atrapados al aplicar deformaciones sobre su estructura. En el caso de las redes deformadas en forma de rombo aparecieron estados atrapados cercanos al centro de la red, algo que no se veía para las redes sin deformación. Para las redes deformadas en forma de rectángulo aparecieron periódicamente estados atrapados a lo largo de la red, y esto se debe a la frontera rectangular que posee. Al aplicar una deformación en la dirección x se cumplió el objetivo de encontrar estados atrapados dentro del bulto de redes tipo grafeno con diferente frontera, y se observaron que dichos estados permanecen atrapados en los mismos sitios al crecer el tamaño de la red. Se espera obtener resultados similares cuando se trabaje con redes de grafeno, es decir, utilizando las dimensiones aceptadas del grafeno, en el Capítulo 5 de esta tesis.

Capítulo 4

El Modelo de los Estados Atrapados

En el capítulo anterior se vio que aparecían estados atrapados tanto en una red con frontera en forma de rombo como en una red con frontera rectangular (ambas con la geometría base del grafeno) cuando ambas redes se sometían a deformaciones en una dirección. Por lo tanto, hemos dado evidencia de que existen estados atrapados dentro del bulto debido a las deformaciones de una red con forma de grafeno. Ahora, en este capítulo, el objetivo es explicar con un modelo sencillo cómo es que aparecen dichos estados atrapados.

Para estudiar el modelo anteriormente mencionado, se crearon diferentes conjuntos de redes pero con la misma geometría que el capítulo anterior, y se determinó el eigensistema en cada caso. Esto implica usar los mismos valores de los parámetros que antes en el código. En un primer caso se estudiaron dos cadenas (en forma de zigzag) con geometría en base al grafeno. El segundo caso fueron un conjunto de cadenas para crear una red simétrica, y el último caso se creó una red asimétrica con las cadenas. Las redes simétricas y asimétricas en realidad son dos redes juntas actuando como una sola. En cada uno de estos casos mencionados, en donde se tienen dos cadenas o dos redes, se construyó un programa que alejaba una cadena o red (según sea el caso) de la otra en ciertos intervalos de una distancia específica. Cada incremento de distancia corresponde a una iteración, y como la configuración espacial de los átomos cambia se calculó el eigensistema correspondiente y se exportaron las gráficas de los eigenvalores y eigenvectores para cada iteración. Todo esto es con fin de estudiar en qué momento aparecen los estados atrapados.

Utilizando los mismos valores de los parámetros en capítulos anteriores, es decir, la apotema $a = 1$ y el lado de una hexágono de grafeno $l = 2a/\sqrt{3}$ (ambas distancias en unidades arbitrarias) se creó una sola cadena de grafeno en forma de zigzag. Podemos descomponer el patrón de zigzag en dos líneas paralelas de puntos, una de ellas más grandes que la otra, como se muestra en la Figura 4.1. La línea con más puntos la llamaremos sierra mayor, mientras la más pequeña sierra menor. En la figura, los átomos de la sierra mayor se representan por puntos azules mientras que los puntos rojos representan los átomos de la sierra menor. En el código que determina el eigensistema de una tira de grafeno¹, se introduce un parámetro n de tal modo que a la sierra mayor le corresponden n átomos mientras que a la sierra menor le corresponden $n - 1$ átomos. Entonces, una cadena de grafeno en forma de zigzag contiene $2n - 1$ átomos.

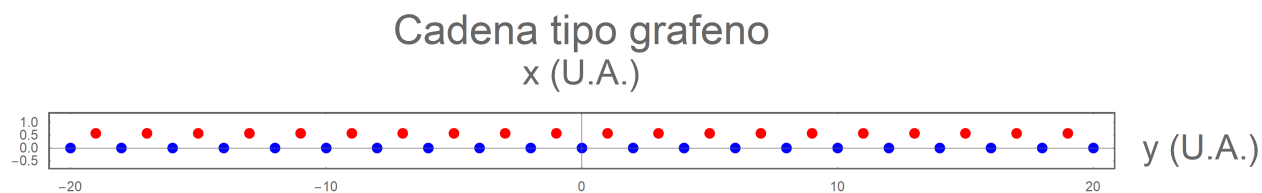


Figura 4.1: Una cadena tipo grafeno en forma zigzag. Los siguientes valores de los parámetros se utilizaron para la creación de esta cadena: $a = 1$ y $n = 21$. En azul los átomos que pertenecen a la sierra mayor y en rojo los átomos de la sierra menor.

¹No se incluye en el Apéndice A, pero sí se incluye el código de dos redes asimétricas de grafeno porque es una generalización de todos los casos que se van a presentar, además para no ser redundante en los códigos.

Ahora que se tiene construida una cadena tipo grafeno con los mismos parámetros que se tenían en los capítulos anteriores, lo que falta hacer es determinar el eigensistema de dicha configuración de átomos. Utilizando un programa similar a `Eigensistema de dos redes asimétricas de grafeno.nb`² se determinó el eigensistema de la cadena y se graficaron y exportaron las gráficas de los eigenvalores y eigenvectores.

Al determinar el eigensistema de la cadena tipo grafeno, se tomó la lista de eigenvalores, se ordenó de mayor a menor y se guardaron en una lista nueva para después asignar estos valores como las coordenadas en y de una lista de pares ordenados para después poderlos graficar. Recordar que, como en los capítulos pasados, los eigenvalores están en unidades arbitrarias. Para las coordenadas en x se utilizaron números enteros para etiquetar los valores. Estos números van de 1 hasta k , en donde k es el número de átomos en la cadena. Debido a que se ordenaron los eigenvalores de mayor a menor, al eigenvalor máximo le corresponde la etiqueta de 1 mientras que al eigenvalor mínimo le corresponde la etiqueta de k . Posteriormente, se juntaron estas dos listas para crear pares ordenados (x, y) que después se graficarán. Antes de mostrar la gráfica resultante, primero se va a mostrar la gráfica de la relación de dispersión para un cristal de una dimensión según la referencia [17].

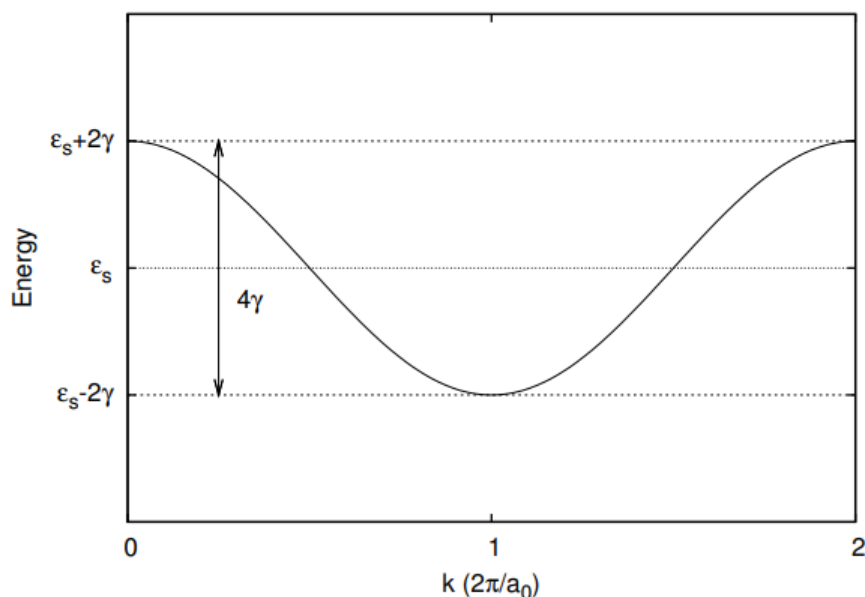


Figura 4.2: La relación de dispersión $E(k)$ para una única banda-s en un cristal unidimensional. k es el momento del cristal, a_0 es la separación atómica, ϵ_s es la energía de un s-orbital atómico en un átomo aislado, y γ es la energía de interacción. Figura adaptada de la referencia [17].

Se quiere comparar la gráfica de la Figura 4.2 con la gráfica de los eigenvalores que se obtuvo. La ecuación que describe la curva de la Figura 4.2, que proviene de la misma referencia [17], es la siguiente

$$E(k) = \epsilon_s + 2\gamma(a_0) \cos ka_0,$$

pero para evitar confusión con los parámetros del código, se cambia k por κ y γ por Δ en la ecuación anterior, y entonces se obtiene

$$E(\kappa) = \epsilon_s + 2\Delta(a_0) \cos \kappa a_0. \quad (4.1)$$

Para poder comparar la curva de la Figura 4.2 con los eigenvalores resultantes del programa, se debe cambiar la ecuación (4.1) para que esté en términos de x , en donde x son números enteros que etiquetan a los

²El código de este programa se encuentra en el Apéndice A, el cual está basado en el programa `Eigensistema de una red deformada de grafeno en 2D.nb`.

eigenvalores. Primero, se hace $\epsilon_s = 0$ porque esta es la referencia de energía en nuestro caso. a_0 es la separación atómica, y en nuestro caso $a_0 = l$ porque esta es la distancia a primeros vecinos para una cadena tipo grafeno. $\Delta(l)$ es entonces la energía de interacción a primeros vecinos, y después se determinará su valor numérico. El argumento del coseno se propone como $\alpha(x - 1)$, en donde α es un parámetro por determinar, de tal manera que la ecuación para los eigenvalores es

$$E(x) = 2\Delta(l) \cos(\alpha(x - 1)). \quad (4.2)$$

Para determinar α , se deben considerar dos casos límites:

- (I) $E(1) = 2\Delta(l)$. La energía evaluada en el eigenvalor máximo debe ser $2\Delta(l)$.
- (II) $E(k) = -2\Delta(l)$. La energía evaluada en el eigenvalor mínimo debe ser $-2\Delta(l)$.

Es fácil ver que la ecuación (4.2) sí cumple el primer criterio. Aplicando el segundo criterio, se tiene que

$$\cos(\alpha(k - 1)) = -1.$$

Para que esto se cumpla, la solución más simple es que el argumento sea igual a π

$$\alpha(k - 1) = \pi,$$

Despejando α

$$\alpha = \frac{\pi}{k - 1},$$

y sustituyendo en la ecuación (4.2) se tiene que

$$E(x) = 2\Delta(l) \cos\left(\frac{\pi}{k - 1}(x - 1)\right). \quad (4.3)$$

La energía de interacción, que se definió en la página 7, es

$$H_{ij} = A e^{-\gamma d_{ij}}.$$

Para encontrar $\Delta(l)$, se utiliza la ecuación anterior y se evalúa en $d_{ij} = l$ porque se están considerando interacciones a primeros vecinos en la cadena tipo grafeno. La ecuación (4.3) se convierte ahora en

$$E(x) = 2Ae^{-\gamma l} \cos\left(\frac{\pi}{k - 1}(x - 1)\right). \quad (4.4)$$

La ecuación (4.4) es la regla de eigenvalores con respecto a k para una cadena finita tipo grafeno con interacción a primeros vecinos asumiendo el modelo de amarre fuerte. Esta ecuación es un caso general. En nuestro caso lo que ahora falta es sustituir los valores de los parámetros A , γ , l y k para poder graficar la ecuación (4.4) y compararla con la gráfica de los eigenvalores que se obtuvo del programa. Recordando que el parámetro n en el código es el número de átomos en la sierra mayor de la cadena, y que $k = 2n - 1$ es el número total de átomos en la cadena, en el código se tomó $n = 21$ átomos, así que para este caso se tiene $k = 41$ átomos. Los demás parámetros van a ser los mismos que se utilizaron en el capítulo pasado, y estos son $A = 1$, $\gamma = 5$, y $l = 2a/\sqrt{3}$, en donde $a = 1$. Sustituyendo estos valores en la ecuación (4.4) se tiene que

$$E(x) = 6.2177 \times 10^{-3} \cos\left(\frac{\pi}{40}(x - 1)\right). \quad (4.5)$$

A continuación se muestra una gráfica que compara la curva de la ecuación (4.5) con los eigenvalores numéricos obtenidos del programa utilizando interacciones a cuartos vecinos con el modelo de amarre fuerte.

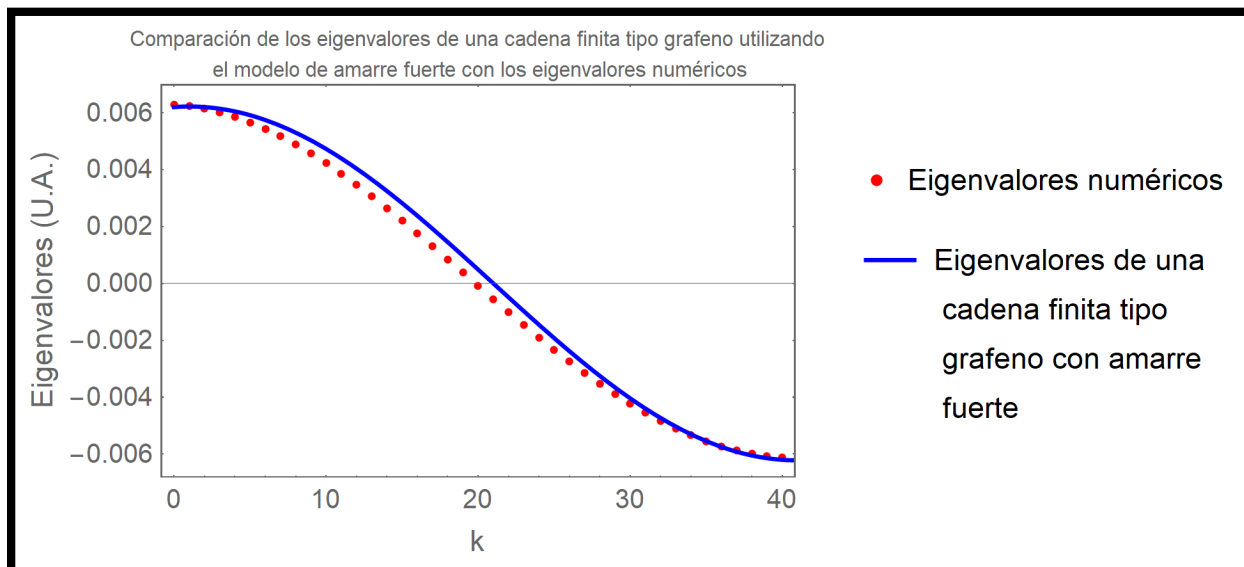


Figura 4.3: La curva azul representa los eigenvalores de una cadena finita tipo grafeno utilizando el modelo de amarre fuerte a primeros vecinos, mientras que los puntos rojos representan los eigenvalores numéricos obtenidos del programa para una cadena tipo grafeno con interacción a cuartos vecinos, y le corresponden los siguientes valores en el código: $a = 1$, $n = 21$, $r = 3l$, $\gamma = 5$ y $A = 1$.

De la Figura 4.3 se observa que los puntos rojos se acercan bastante a la curva azul, es decir, los eigenvalores numéricos obtenidos del programa son aproximadamente iguales a los eigenvalores de una cadena finita tipo grafeno con interacciones a primeros vecinos utilizando el modelo del amarre fuerte. Esto significa que la aproximación de amarre fuerte que se ha utilizado en este trabajo es una buena aproximación a lo que reporta la teoría.

En cuanto a los eigenvectores de una cadena tipo grafeno, se encontró un estado el cual corresponde al estado con la energía más baja.

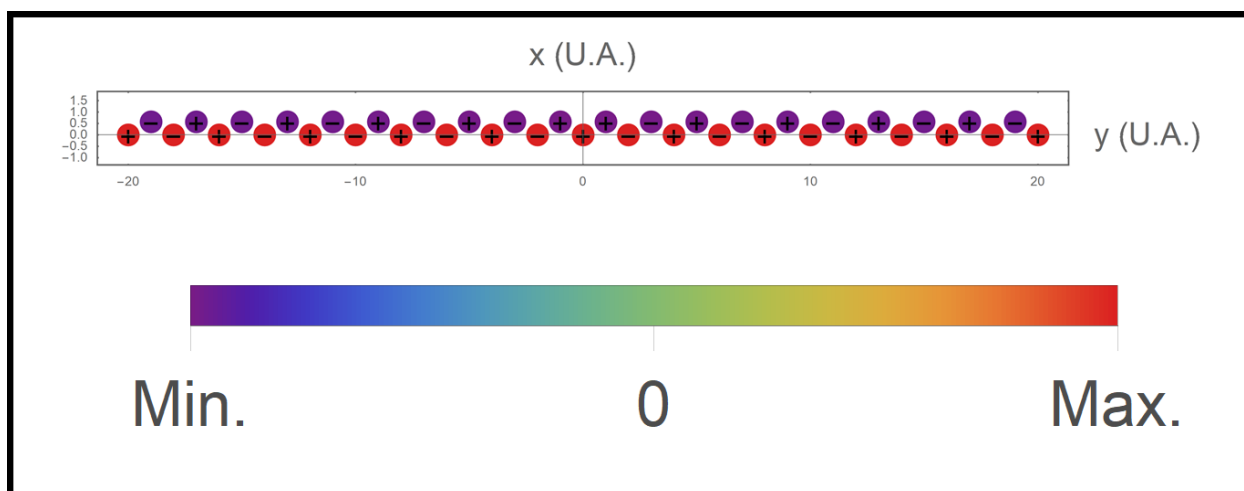


Figura 4.4: Gráfica de los eigenvectores de una cadena tipo grafeno con interacción a cuartos vecinos y eigenvalor igual a -8.64761×10^{-5} . A esta gráfica le corresponden los siguiente valores en el código: $a = 1$, $n = 21$, $r = 3l$, $\gamma = 5$ y $A = 1$.

En la Figura 4.4 se puede observar que el estado de mínima energía tiene mayor intensidad en la sierra mayor. Para los casos de las dos cadenas y dos redes tipo grafeno, se van a buscar estos mismos estados atrapados, uno en cada cadena o red.

Ahora que se han mostrado los resultados obtenidos de los programas para una cadena, falta estudiar la contraparte teórica. A continuación se muestra el modelo de amarre fuerte para una cadena lineal infinita.

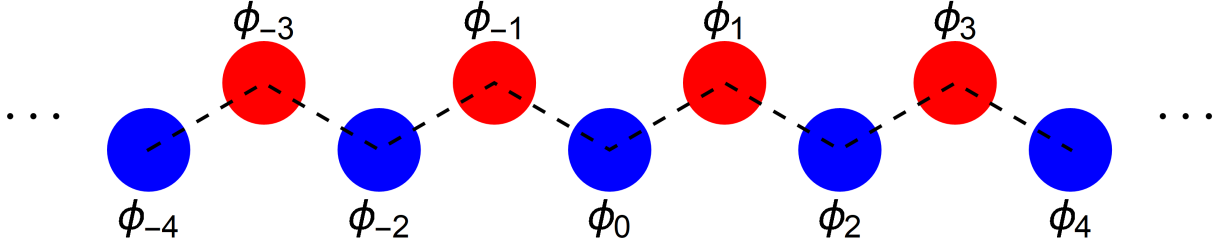


Figura 4.5: Representación visual de un segmento de una cadena infinita con geometría en base al grafeno. Los puntos rojos y azules son los átomos y encima o debajo de estos puntos se encuentra la etiqueta del estado localizado correspondiente a dicho átomo.

Sea ϕ_n los estados localizados de los átomos en cada sitio de la red. Estos estados cumplen con la relación de ortonormalización

$$\langle \phi_n | \phi_m \rangle = \delta_{nm}. \quad (4.6)$$

El Hamiltoniano de interacción en esta base se puede expresar como

$$\hat{H}_{1C} = E_0 \sum_{n=-\infty}^{\infty} |\phi_n\rangle\langle\phi_n| + \Delta \sum_{n=-\infty}^{\infty} |\phi_n\rangle\langle\phi_{n+1}| + \Delta \sum_{n=-\infty}^{\infty} |\phi_n\rangle\langle\phi_{n-1}|, \quad (4.7)$$

en donde Δ es la interacción a primeros vecinos. Dado un estado localizado ϕ_n , los primeros vecinos son los estados adyacentes ϕ_{n+1} y ϕ_{n-1} . Consideremos un estado particular de \hat{H}_{1C} que escribimos como sigue

$$|\Psi_0\rangle = \sum_{m=-\infty}^{\infty} (-1)^m |\phi_{2m}\rangle = |\phi_0\rangle - |\phi_{\pm 2}\rangle + |\phi_{\pm 4}\rangle - |\phi_{\pm 6}\rangle + \dots \quad (4.8)$$

El estado particular que describe la ecuación (4.8) corresponde a los estados localizados de los átomos de la sierra mayor (visualmente los puntos rojos) de la Figuras 4.3 y 4.4. Son estos estados localizados los que son de interés para la formación de estados atrapados en este caso de una cadena y también para dos cadenas. Ahora, se opera el Hamiltoniano \hat{H}_{1C} sobre el estado $|\Psi_0\rangle$:

$$\begin{aligned} \hat{H}_{1C}|\Psi_0\rangle &= E_0 \sum_{n=-\infty}^{\infty} \sum_{m=-\infty}^{\infty} (-1)^m |\phi_n\rangle\langle\phi_n|\phi_{2m}\rangle + \Delta \sum_{n=-\infty}^{\infty} \sum_{m=-\infty}^{\infty} (-1)^m |\phi_n\rangle\langle\phi_{n+1}|\phi_{2m}\rangle \\ &+ \Delta \sum_{n=-\infty}^{\infty} \sum_{m=-\infty}^{\infty} (-1)^m |\phi_n\rangle\langle\phi_{n-1}|\phi_{2m}\rangle. \end{aligned} \quad (4.9)$$

Aplicando la ortonormalización (4.6)

$$\hat{H}_{1C}|\Psi_0\rangle = E_0 \sum_{n=-\infty}^{\infty} \sum_{m=-\infty}^{\infty} (-1)^m \delta_{n,2m} |\phi_n\rangle + \Delta \sum_{n=-\infty}^{\infty} \sum_{m=-\infty}^{\infty} (-1)^m (\delta_{n+1,2m} + \delta_{n-1,2m}) |\phi_n\rangle.$$

Se corren las sumatorias sobre el índice m , y para que $\delta_{n,2m} = 1$, $\delta_{n+1,2m} = 1$ y $\delta_{n-1,2m}$, entonces $m = n/2$, $m = (n+1)/2$ y $m = (n-1)/2$, respectivamente. Entonces, se tiene que

$$\hat{H}_{1C}|\Psi_0\rangle = E_0 \sum_{n=-\infty}^{\infty} (-1)^{n/2} |\phi_n\rangle + \Delta \sum_{n=-\infty}^{\infty} \left((-1)^{(n+1)/2} + (-1)^{(n-1)/2} \right) |\phi_n\rangle.$$

Desarrollando el término entre paréntesis de la segunda sumatoria

$$\begin{aligned} \hat{H}_{1C}|\Psi_0\rangle &= E_0 \sum_{n=-\infty}^{\infty} (-1)^{n/2} |\phi_n\rangle + \Delta \sum_{n=-\infty}^{\infty} \left((-1)^{n/2} (-1)^{1/2} + (-1)^{n/2} (-1)^{-1/2} \right) |\phi_n\rangle \\ &= E_0 \sum_{n=-\infty}^{\infty} (-1)^{n/2} |\phi_n\rangle + \Delta \sum_{n=-\infty}^{\infty} (-1)^{n/2} (i - i) |\phi_n\rangle. \end{aligned}$$

El segundo término se hace cero, así que se tiene que

$$\hat{H}_{1C}|\Psi_0\rangle = E_0 \sum_{n=-\infty}^{\infty} (-1)^{n/2} |\phi_n\rangle.$$

En la ecuación anterior el índice n es un índice mudo, por lo que se puede hacer el cambio $n \rightarrow 2m$ para obtener

$$\hat{H}_{1C}|\Psi_0\rangle = E_0 \sum_{m=-\infty}^{\infty} (-1)^m |\phi_{2m}\rangle.$$

Omitiendo la energía E_0 , el término de la derecha de la ecuación anterior es igual a la ecuación (4.8), y finalmente se llega a una ecuación de eigenvalores

$$\hat{H}_{1C}|\Psi_0\rangle = E_0|\Psi_0\rangle. \quad (4.10)$$

Esto significa que el estado $|\Psi_0\rangle$ es un eigenestado de la cadena con el mismo eigenvalor E_0 que cada átomo individual.

Ahora analicemos el caso cuando dos cadenas de grafeno se separan entre sí. Utilizando el mismo valor de los parámetros para una cadena de grafeno, se construyó una cadena adicional reflejada y se colocó a una distancia l original, como se muestra en la Figura 4.6a en la página 43. Específicamente, la sierra mayor de la segunda cadena se colocó a una distancia l de la sierra mayor de la primer cadena, es decir, los átomos de la sierra mayor se encuentran en $x = -l$. Por la manera de cómo se construyeron ambas cadenas, se sabe que la distancia entre las sierras mayores y menores de cualquier cadena es siempre $l/2$. Este dato es importante de recordar para cuando se construya dos redes tipo grafeno, las cuales se constituyen de varias cadenas individuales.

Después de construir las dos cadenas tipo grafeno, el siguiente paso fue alejar la segunda cadena de la primera en incrementos controlados, y en cada iteración se calculó el eigensistema de la configuración de átomos, y se graficaron y exportaron las gráficas de los eigenvalores y eigenvectores.

Para alejar la segunda cadena tipo grafeno de la original, primero se creó una tabla de las posiciones en x de ambas filas de átomos de la cadena. Las posiciones de ambas filas se generan de la siguiente manera.

$$x_{L1} = -l - j, \quad (4.11)$$

$$x_{L2} = -\frac{3l}{2} - j, \quad (4.12)$$

en donde x_{L1} y x_{L2} son las coordenadas en x de la sierra mayor y menor, respectivamente, y el término j varía de 0 a $3d/2$ en pasos de $d/8$. Aquí se introduce un nuevo parámetro, d , el cual se define como $d = \delta xl$,

donde $\delta x = 0.8$ es un parámetro que se utilizó en el capítulo pasado para establecer qué tanto se deformaba la red tipo grafeno en la dirección horizontal. Sabiendo que $l = 2a/\sqrt{3}$, en donde a es el apotema de un hexágono con la geometría basada en el grafeno y a su vez se le asignó el valor de 1 (en unidades arbitrarias) dentro del código, resulta en $d = 0.92376$. En total se realizaron 13 iteraciones. En la primera iteración no se cambia las coordenadas en x de la segunda cadena tipo grafeno, así que es aquí cuando está más cercana a la primera cadena. En la última iteración es cuando la segunda cadena está más alejada a la primera. Todo este procedimiento de alejar la segunda cadena se encuentra el código del programa cuyo título es **Eigensistema de dos redes asimétricas de grafeno.nb**, el cual se encuentra en la página 101 en el Apéndice A.

El programa termina de ejecutarse después de la última iteración, y al final se tiene una cantidad numerosa de gráficas que ha exportado el programa. Se había mencionado antes que una cadena de grafeno contenía $2n - 1$ átomos, y en este caso tenemos dos cadenas de átomos, así que en total son $2(2n - 1)$ átomos. Como $n = 21$, entonces se tienen 82 átomos en total, y por lo tanto se tienen 82 gráficas de eigenvectores. Sumando dos gráficas adicionales de eigenvalores y de las cadenas tipo grafeno, en total se exportan 84 gráficas por iteración. Dado que son 13 iteraciones que éste programa corre, en total 1092 gráficas son exportadas. Se organizan todas estas imágenes en carpetas por tipo y por iteración para facilitar el manejo de archivos. Para evitar ser redundantes en los resultados obtenidos, solo se mostraran las gráficas correspondientes a las iteraciones 1, 7 y 13, las cuales corresponden a las dos cadenas tipo grafeno lo más cercano, a mitad de su máxima separación y a su máxima separación, respectivamente. A continuación en la Figura 4.6 se muestran las dos cadenas tipo grafeno y cómo se visualizan las iteraciones 1, 7 y 13.

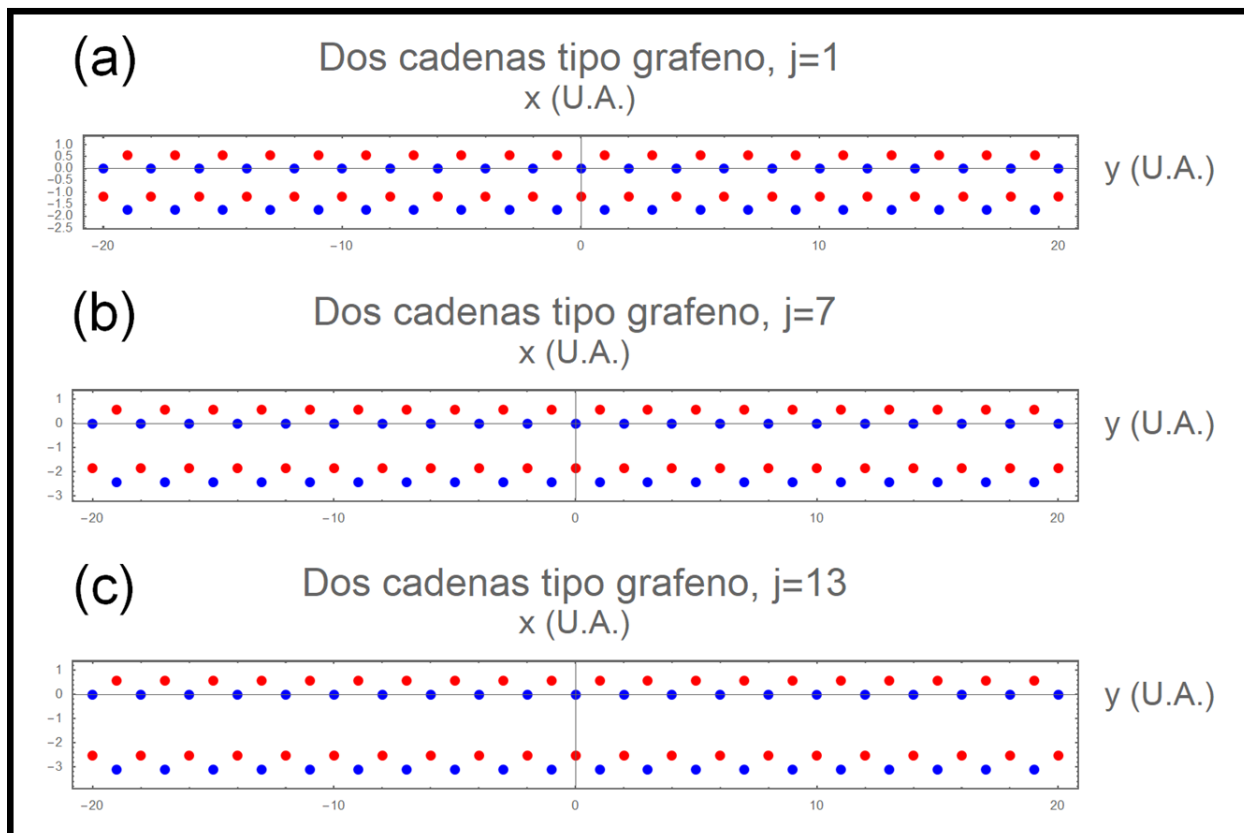


Figura 4.6: Gráficas de dos cadenas tipo grafeno separándose entre sí, en las iteraciones (a) $j = 1$, cuando las dos cadenas aún no se separan, (b) $j = 7$, el punto medio de la separación de acuerdo a los parámetros especificados, y (c) $j = 13$, el final de la separación. A estas tres gráficas le corresponden los siguientes parámetros en el código: $a = 1$, $n = 21$, $\gamma = 5$, $A = 1$, $\delta x = 0.8$ y $d = 0.92376$.

En la Figura 4.6 se puede observar cómo es que se aleja la segunda cadena tipo grafeno de la primera. En seguida se muestran las gráficas de los eigenvalores de las mismas iteraciones anteriores.

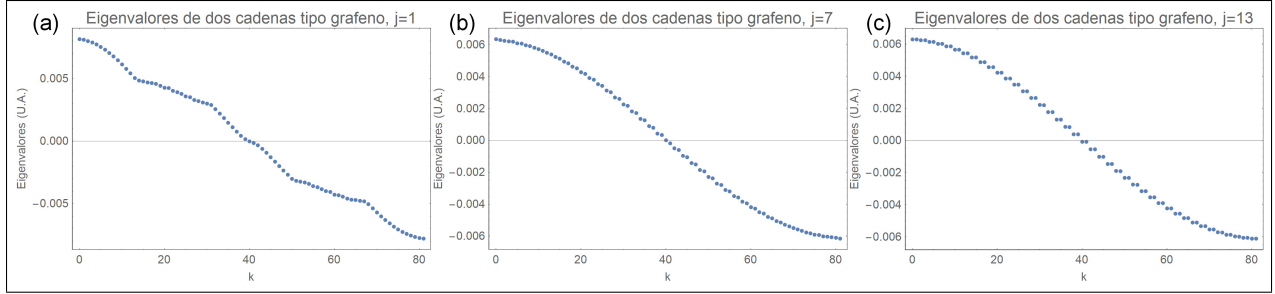


Figura 4.7: Gráficas de los eigenvalores de las dos cadenas tipo grafeno correspondientes al sistema de las dos cadenas separándose entre sí de las Figuras (a) 4.6a, (b) 4.6b, y (c) 4.6c. El sistema de la Figura 4.6c corresponde a las dos cadenas desacopladas, y por lo tanto en esta gráfica los eigenvalores están degenerados.

Al observar las gráficas de los eigenvalores de la Figura 4.7 se puede notar que la forma de la curva tiende a ser de la misma forma que la curva de los eigenvalores para una sola cadena tipo grafeno en la Figura 4.3. También se observa los puntos se ordenan en parejas, de tal manera que la gráficas se puede describir como una curva suave de escalones. A continuación, después de mostrar una leyenda general para las gráficas de los eigenvectores restantes en este capítulo, se muestran las figuras de los eigenvectores donde se pueden apreciar estados atrapados para las iteraciones anteriormente descritas.

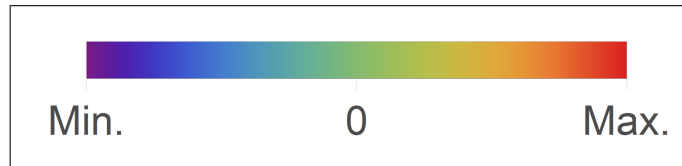


Figura 4.8: Leyenda general para las figuras restantes en este capítulo de los componentes de los eigenvectores. El color rojo significa un valor máximo del componente mientras que el color violeta significa un valor mínimo del componente.

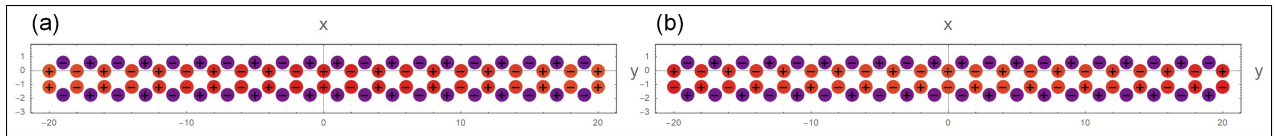


Figura 4.9: Gráficas de los eigenvectores y sus estados atrapados de dos cadenas tipo grafeno con interacción a cuartos vecinos en la iteración $j = 1$, con eigenvalores (a) 3.00371×10^{-3} y (b) -3.17679×10^{-3} . A estas gráficas le corresponden los siguientes parámetros dentro del código: $a = 1$, $n = 21$, $r = 3l$, $\gamma = 5$, $A = 1$, $\delta x = 0.8$ y $d = 0.92376$. Tanto el eje horizontal como el vertical están en unidades arbitrarias.

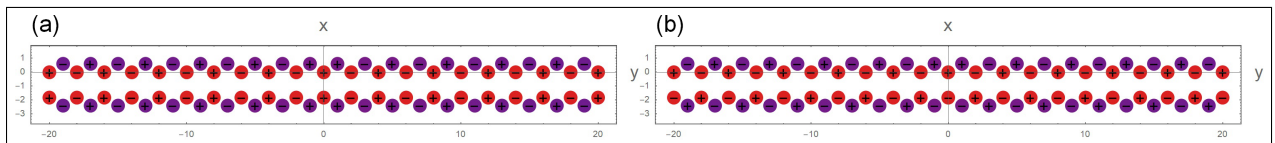


Figura 4.10: Gráficas de los eigenvectores y sus estados atrapados de dos cadenas de grafeno con interacción a cuartos vecinos en la iteración $j = 7$, con eigenvalores (a) 8.49762×10^{-6} y (b) -1.8145×10^{-4} . A estas gráficas le corresponden los siguientes parámetros dentro del código: $a = 1$, $n = 21$, $r = 3l$, $\gamma = 5$, $A = 1$, $\delta x = 0.8$ y $d = 0.92376$. Tanto el eje horizontal como el vertical están en unidades arbitrarias.

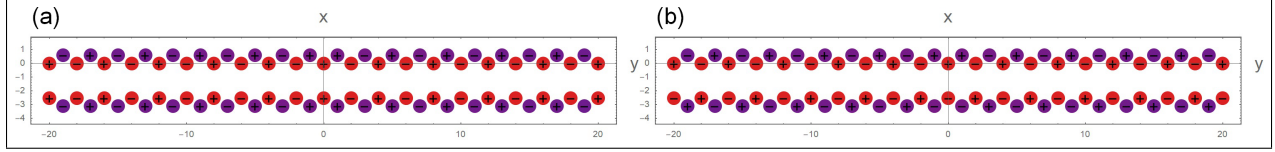


Figura 4.11: Gráficas de los eigenvectores y sus estados atrapados de dos cadenas tipo grafeno con interacción a cuartos vecinos en la iteración $j = 13$, con eigenvalores (a) -8.36119×10^{-5} y (b) -8.93402×10^{-5} . A estas gráficas le corresponden los siguientes parámetros dentro del código: $a = 1$, $n = 21$, $r = 3l$, $\gamma = 5$, $A = 1$, $\delta x = 0.8$ y $d = 0.92376$. Tanto el eje horizontal como el vertical están en unidades arbitrarias.

Al observar los estados atrapados de las Figuras 4.9, 4.10, y 4.11, se nota que son tal como el estado atrapado de una sola cadena tipo grafeno en la Figura 4.4. Hay un estado atrapado en cada cadena y esto era justo lo que se esperaba encontrar. Observando los estados atrapados de la Figuras 4.9a, 4.10a, y 4.11a se nota que cada par de eigenvectores en ambas cadenas un punto rojo en una cadena y el otro punto rojo arriba o debajo de él en la otra cadena tienen el mismo signo. Esto ocurre a lo largo de toda la fila de los estados atrapados. Lo mismo ocurre en las Figuras 4.9b, 4.10b, y 4.11b pero ahora los eigenvectores son de signo contrario. Ambos tipos de estados atrapados dan lugar a los estados simétricos (componentes del mismo signo de los eigenvectores) y antisimétricos (componentes del signo opuesto de los eigenvectores).

Para las iteraciones no mostradas en las Figuras 4.9, 4.8 y 4.9, también se presentan estados atrapados de la misma naturaleza que los mostrados en las figuras anteriormente mencionadas. También ocurre que los eigenvectores en ambas cadenas de los estados atrapados tengan signos iguales y opuestos como se explicó en el párrafo anterior. A continuación se muestran dos tablas en donde se coloca la información obtenida de los estados atrapados simétricos y antisimétricos que se lograron identificar en las dos cadenas tipo grafeno. Tal información incluye el número de la iteración, el número de la gráfica de eigenvectores (recordar que hay 82 gráficas por iteración), la distancia que se encuentra la segunda cadena de grafeno respecto a la primera (en unidades arbitrarias) y el eigenvalor (en unidades arbitrarias).

Iteración	Número de eigenvector	Distancia a la segunda cadena (U.A.)	Eigenvalor (U.A.)
1	63	-1.1547	3.00371×10^{-3}
2	72	-1.27017	1.645×10^{-3}
3	78	-1.38564	8.83294×10^{-4}
4	80	-1.50111	4.56432×10^{-4}
5	82	-1.61658	2.17315×10^{-4}
6	82	-1.73205	8.3428×10^{-5}
7	82	-1.84752	8.49762×10^{-6}
8	82	-1.96299	-3.3416×10^{-5}
9	82	-2.07846	-5.68487×10^{-5}
10	82	-2.19393	-6.99421×10^{-5}
11	82	-2.3094	-7.72542×10^{-5}
12	82	-2.42487	-8.13353×10^{-5}
13	82	-2.54034	-8.36119×10^{-5}

Tabla 4.1: Datos de los estados atrapados simétricos de dos cadenas tipo grafeno alejándose entre sí, con interacción a cuartos vecinos usando el modelo de amarre fuerte.

Iteración	Número de eigenvector	Distancia a la segunda cadena (U.A.)	Eigenvalor (U.A.)
1	60	-1.1547	-3.17679×10^{-3}
2	70	-1.27017	-1.81801×10^{-3}
3	76	-1.38564	-1.05627×10^{-3}
4	78	-1.50111	-6.29394×10^{-4}
5	80	-1.61658	-3.90271×10^{-4}
6	81	-1.73205	-2.56382×10^{-4}
7	82	-1.84752	-1.8145×10^{-4}
8	81	-1.96299	-1.39536×10^{-4}
9	81	-2.07846	-1.16103×10^{-4}
10	81	-2.19393	-1.0301×10^{-4}
11	81	-2.3094	-9.5698×10^{-5}
12	81	-2.42487	-9.16168×10^{-5}
13	81	-2.54034	-8.93402×10^{-5}

Tabla 4.2: Datos de los estados atrapados antisimétricos de dos cadenas tipo grafeno alejándose entre sí, con interacción a cuartos vecinos usando el modelo de amarre fuerte.

Tomando la información de las Tablas 4.1 y 4.2, se graficaron los eigenvalores de los estados atrapados de dos cadenas tipo grafeno en función de la distancia que se encuentra la segunda cadena respecto a la primera. En seguida se muestra dicha gráfica.

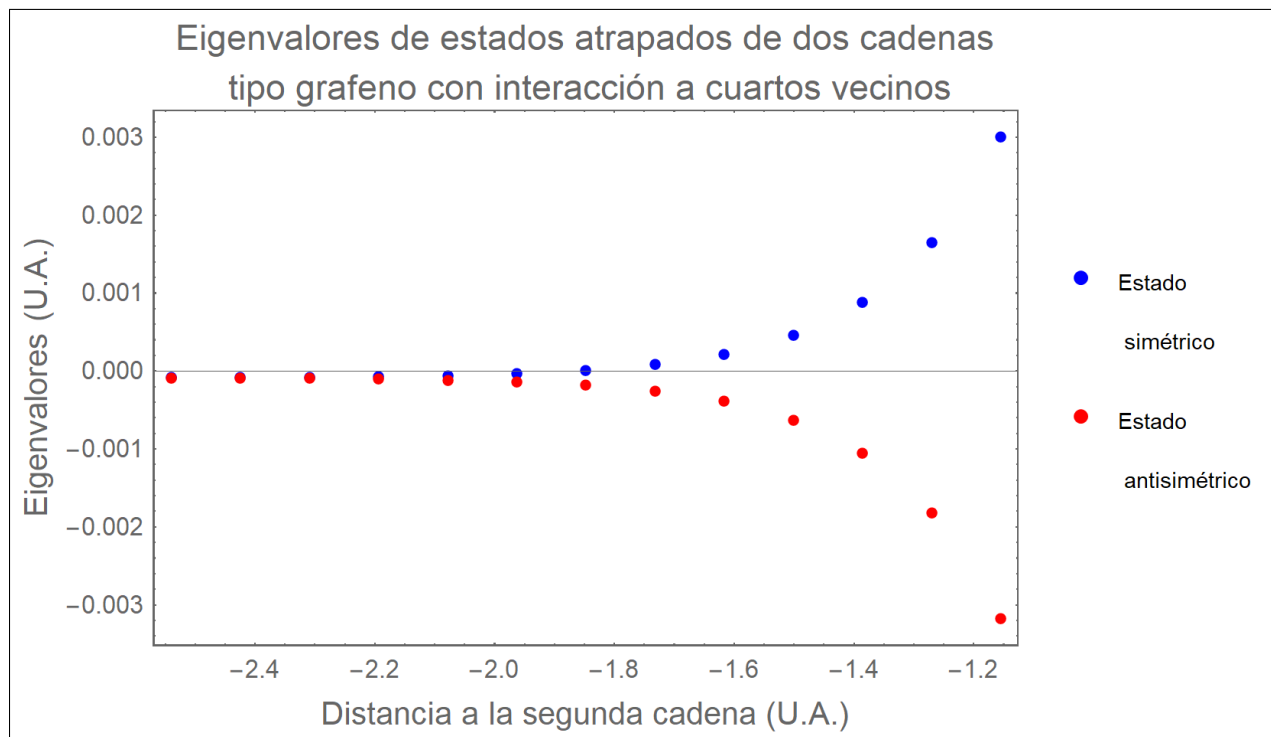


Figura 4.12: Eigenvalores de estados atrapados simétricos y antisimétricos en dos cadenas tipo grafeno cuando la segunda cadena se separa poco a poco de la primera. A estas gráficas le corresponden los siguientes parámetros dentro del código: $a = 1$, $n = 21$, $r = 3l$, $\gamma = 5$, $A = 1$, $\delta x = 0.8$ y $d = 0.92376$.

Se puede observar que al inicio de las iteraciones, cuando las dos cadenas tipo grafeno están lo más cercanas entre ellas, los eigenvalores de los estados simétricos y antisimétricos son muy diferentes. Al correr las iteraciones, es decir, al alejar la segunda cadena de la primera, los eigenvalores de los estados atrapados de ambos casos se van acercando lentamente. Este comportamiento de los eigenvalores se puede verificar en las Tablas 4.1 y 4.2.

Ahora que se han mostrado los resultados obtenidos de los programas para dos cadenas, falta ver la parte teórica. A continuación se muestra el modelo de amarre fuerte para dos cadenas acopladas.

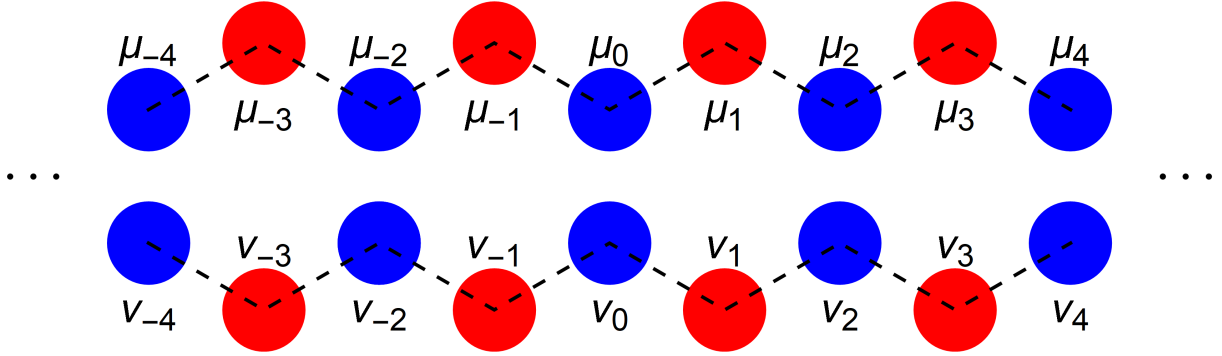


Figura 4.13: Representación visual de un segmento de dos cadenas infinitas con geometría en base al grafeno. Los puntos rojos y azules son los átomos y encima o debajo de estos puntos se encuentra la etiqueta del estado localizado correspondiente a dicho átomo.

Sea μ_n y ν_n los estados localizados de los átomos en cada sitio de la cadena superior e inferior, respectivamente. Estos estados cumplen con la relación de ortonormalización, es decir

$$\langle \mu_n | \mu_m \rangle = \langle \nu_n | \nu_m \rangle = \delta_{nm}. \quad (4.13)$$

También, estos estados son ortogonales entre sí

$$\langle \mu_n | \nu_m \rangle = 0. \quad (4.14)$$

El Hamiltoniano de estas dos cadenas infinitas interactuando se puede escribir como

$$\begin{aligned} \hat{H}_{2C} = & E_0 \sum_{n=-\infty}^{\infty} |\mu_n\rangle\langle\mu_n| + E_0 \sum_{n=-\infty}^{\infty} |\nu_n\rangle\langle\nu_n| + \Delta \sum_{n=-\infty}^{\infty} |\mu_n\rangle\langle\mu_{n+1}| + \Delta \sum_{n=-\infty}^{\infty} |\mu_n\rangle\langle\mu_{n-1}| \\ & + \Delta \sum_{n=-\infty}^{\infty} |\nu_n\rangle\langle\nu_{n+1}| + \Delta \sum_{n=-\infty}^{\infty} |\nu_n\rangle\langle\nu_{n-1}| + \delta \sum_{n=-\infty}^{\infty} |\mu_{2n}\rangle\langle\nu_{2n}| + \delta \sum_{n=-\infty}^{\infty} |\nu_{2n}\rangle\langle\mu_{2n}|, \end{aligned} \quad (4.15)$$

en donde δ es el término de interacción entre las cadenas que solo se da para esta configuración entre sitios pares y, nuevamente, Δ es la interacción a primeros vecinos. Dado un estado localizado μ_n (ν_n), los primeros vecinos correspondientes son los estados adyacentes μ_{n+1} y μ_{n-1} (ν_{n+1} y ν_{n-1}). Los últimos dos términos de la ecuación (4.15) son las interacciones entre las cadenas a primeros vecinos. Si se observa la Figura 4.13, estas interacciones solo se dan entre los estados μ_0 y ν_0 , $\mu_{\pm 2}$ y $\nu_{\pm 2}$, $\mu_{\pm 4}$ y $\nu_{\pm 4}$, y así sucesivamente. Consideremos un estado particular de este sistema, dado por

$$|\Psi_{\pm}\rangle = \sum_{m=-\infty}^{\infty} (-1)^m |\mu_{2m}\rangle \pm \sum_{m=-\infty}^{\infty} (-1)^m |\nu_{2m}\rangle. \quad (4.16)$$

El estado $|\Psi_{+}\rangle$ corresponde al estado simétrico, el cual aparece en las Figuras 4.9a, 4.10a, y 4.11a; el estado $|\Psi_{-}\rangle$ corresponde al estado antisimétrico, el cual aparece en las Figuras 4.9b, 4.10b, y 4.11b. Ahora, se opera el Hamiltoniano \hat{H}_{2C} sobre el estado $|\Psi_{\pm}\rangle$:

$$\begin{aligned}
\hat{H}_{2C}|\Psi_{\pm}\rangle &= E_0 \sum_{n=-\infty}^{\infty} \sum_{m=-\infty}^{\infty} (-1)^m |\mu_n\rangle \langle \mu_n | \mu_{2m}\rangle \pm E_0 \sum_{n=-\infty}^{\infty} \sum_{m=-\infty}^{\infty} (-1)^m |\mu_n\rangle \langle \mu_n | \nu_{2m}\rangle \\
&+ E_0 \sum_{n=-\infty}^{\infty} \sum_{m=-\infty}^{\infty} (-1)^m |\nu_n\rangle \langle \nu_n | \mu_{2m}\rangle \pm E_0 \sum_{n=-\infty}^{\infty} \sum_{m=-\infty}^{\infty} (-1)^m |\nu_n\rangle \langle \nu_n | \nu_{2m}\rangle \\
&+ \Delta \sum_{n=-\infty}^{\infty} \sum_{m=-\infty}^{\infty} (-1)^m |\mu_n\rangle \langle \mu_{n+1} | \mu_{2m}\rangle \pm \Delta \sum_{n=-\infty}^{\infty} \sum_{m=-\infty}^{\infty} (-1)^m |\mu_n\rangle \langle \mu_{n+1} | \nu_{2m}\rangle \\
&+ \Delta \sum_{n=-\infty}^{\infty} \sum_{m=-\infty}^{\infty} (-1)^m |\mu_n\rangle \langle \mu_{n-1} | \mu_{2m}\rangle \pm \Delta \sum_{n=-\infty}^{\infty} \sum_{m=-\infty}^{\infty} (-1)^m |\mu_n\rangle \langle \mu_{n-1} | \nu_{2m}\rangle \\
&+ \Delta \sum_{n=-\infty}^{\infty} \sum_{m=-\infty}^{\infty} (-1)^m |\nu_n\rangle \langle \nu_{n+1} | \mu_{2m}\rangle \pm \Delta \sum_{n=-\infty}^{\infty} \sum_{m=-\infty}^{\infty} (-1)^m |\nu_n\rangle \langle \nu_{n+1} | \nu_{2m}\rangle \\
&+ \Delta \sum_{n=-\infty}^{\infty} \sum_{m=-\infty}^{\infty} (-1)^m |\nu_n\rangle \langle \nu_{n-1} | \mu_{2m}\rangle \pm \Delta \sum_{n=-\infty}^{\infty} \sum_{m=-\infty}^{\infty} (-1)^m |\nu_n\rangle \langle \nu_{n-1} | \nu_{2m}\rangle \\
&+ \delta \sum_{n=-\infty}^{\infty} \sum_{m=-\infty}^{\infty} (-1)^m |\mu_{2n}\rangle \langle \nu_{2n} | \mu_{2m}\rangle \pm \delta \sum_{n=-\infty}^{\infty} \sum_{m=-\infty}^{\infty} (-1)^m |\mu_{2n}\rangle \langle \nu_{2n} | \nu_{2m}\rangle \\
&+ \delta \sum_{n=-\infty}^{\infty} \sum_{m=-\infty}^{\infty} (-1)^m |\nu_{2n}\rangle \langle \mu_{2n} | \mu_{2m}\rangle \pm \delta \sum_{n=-\infty}^{\infty} \sum_{m=-\infty}^{\infty} (-1)^m |\nu_{2n}\rangle \langle \mu_{2n} | \nu_{2m}\rangle.
\end{aligned} \tag{4.17}$$

Similarmente al desarrollo que se hizo para el modelo de una cadena, se aplicó las relaciones de ortonormalización (4.13) y de ortogonalidad (4.14), se corrieron las sumatorias sobre el índice m , se cancelaron algunos términos resultantes y se hizo un cambio sobre el índice mudo para dar como resultado la siguiente ecuación de eigenvalores

$$\hat{H}_{2C}|\Psi_{\pm}\rangle = (E_0 \pm \delta)|\Psi_{\pm}\rangle. \tag{4.18}$$

De la ecuación anterior se deduce que al estado simétrico $|\Psi_+\rangle$ le corresponde el eigenvalor $E_+ = E_0 + \delta$ mientras que al estado antisimétrico $|\Psi_-\rangle$ le corresponde el eigenvalor $E_- = E_0 - \delta$.

Ahora que se ha visto cómo se forman los estados atrapados en dos cadenas tipo grafeno alejándose entre sí con el modelo de amarre fuerte, se espera ver resultados similares en cuanto a los estados atrapados en las gráficas de los eigenvectores y las gráficas de los eigenvalores de dichos estados para dos redes simétricas y asimétricas tipo grafeno alejándose entre sí y manteniendo los mismos parámetros que antes.

Lo que ahora sigue es analizar el eigensistema en el caso cuando dos redes tipo grafeno simétricas y asimétricas se separan entre sí. Se asumieron interacciones a primeros vecinos y a cuartos vecinos utilizando el modelo de amarre fuerte. El código del programa que construye las dos redes, las separa poco a poco y determina el eigensistema y exporta las gráficas de los eigenvalores y eigenvectores en cada iteración se ubica en Eigensistema de dos redes asimétricas de grafeno.nb en la página 101 en el Apéndice A.

Para construir dos redes tipo grafeno, se graficaron dos bultos de varias cadenas adyacentes unas a otras. En base a los valores que se han propuesto de la apotema y del lado de un hexágono basado en la geometría del grafeno, se calcularon a mano todas las posiciones en x de las filas de todas las cadenas en ambas redes. Aquí hay dos redes, las cuales son la derecha y la izquierda. En el caso de las dos redes simétricas, ambas redes contienen el mismo número de átomos. Para construir las dos redes asimétricas se partió de las dos redes simétricas y se removió una cadena de la red de la izquierda y se agregó una cadena a la red de la derecha. Ambos tipos de redes están constituidas por el mismo número de cadenas, las cuales son 20, y como se ha explicado antes que cada cadena tiene $2n - 1$ átomos, entonces en total hay $k = 20(2n - 1)$ átomos. Dado que se tienen los mismos parámetros que en los casos pasados, entonces $n = 21$ y por lo tanto hay 820 átomos en total.

Para poder alejar la segunda red tipo grafeno (que siempre es la izquierda, pero se podría alejar la red

derecha y los resultados serían los mismos) de la primera, se tuvo que hacer una tabla de posiciones en x para ambas filas de átomos en todas las cadenas. Las posiciones de las primeras dos filas se generaron con las ecuaciones (4.11) y (4.12). Las posiciones de las filas restantes se generaron con ecuaciones similares a (4.11) y (4.12), pero el primer término es diferente para cada fila porque están ubicadas en diferentes lugares. Se calcularon a mano estas posiciones en x de las filas restantes y se programaron en el código. La red de la izquierda se mueve de la misma manera que la cadena de la izquierda en el caso anterior, es decir, los intervalos de distancia en los que se mueve la red son iguales y hay el mismo número de iteraciones.

Para no ser redundante, no se incluyen las gráficas de los eigenvalores en función del número de átomos debido a que son similares a las gráficas de la Figura 4.7, pero obviamente con muchos más puntos. En las gráficas de los eigenvectores se buscaron estados atrapados similares a los que aparecen en las Figuras 4.9, 4.10, y 4.11.

Primeramente, se hizo el análisis para dos redes asimétricas con interacción a primeros vecinos ($r = l$) y los mismos parámetros anteriormente establecidos. En la iteración $j = 2$ la distancia de separación entre las dos redes es mayor que l y por lo tanto ya no hay interacción entre ellas. Una consecuencia de esto es que ya no se presentaron estados atrapados para esta configuración en particular y, por ende, no hay resultados significativos para reportar. Regresando al caso en cuestión, se espera ver resultados similares a las dos cadenas (y posteriormente a dos redes con interacción a cuartos vecinos) cuando se utiliza un radio de interacción a casi segundos vecinos para así incluir a los primeros vecinos ausentes en esta configuración cuando se separan las dos redes.

Lo primero que se hizo fue calcular el valor de la distancia a segundos vecinos entre los átomos en base a la apotema de un hexágono regular que representa un anillo de grafeno. En nuestro caso, en unidades arbitrarias el valor de la apotema es $a = 1$, y por el teorema de Pitágoras el valor de un lado del hexágono regular es $l = 2a/\sqrt{3}$. A continuación se muestra una imagen de un hexágono con geometría en base al grafeno para ayudar a visualizar cómo es que se calculó la distancia a segundos vecinos.

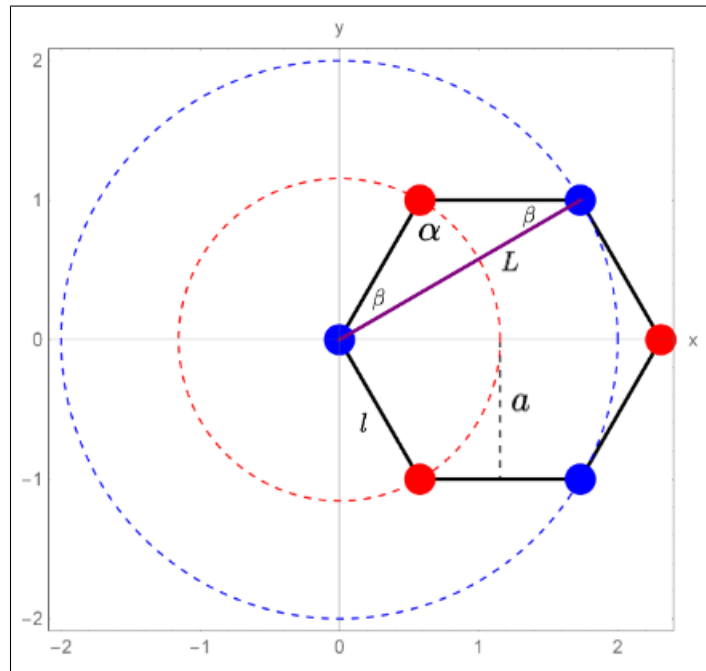


Figura 4.14: Un hexágono regular cuyo apotema es $a = 1$ con lado $l = 2a/\sqrt{3} = 1.1547$ en unidades arbitrarias, el cual representa cómo se acomodan los átomos en una red basada en la geometría del grafeno. Los puntos rojos y azules son los átomos de carbono de las dos subredes, la línea morada L es la distancia a segundos vecinos y los círculos punteados de color azul y rojo son los radios de interacción a primer y segundos vecinos, respectivamente. El triángulo que se encuentra en la región superior delimitado por las rectas L y los dos lados del hexágono l contiene los ángulos α y β .

Mediante la ley de los senos, la cual relaciona los ángulos con los lados opuestos de un triángulo, se tiene que

$$\frac{\sin \alpha}{L} = \frac{\sin \beta}{l}, \quad (4.19)$$

y despejando para la distancia a segundos vecinos L , se llega a

$$L = \frac{\sin \alpha}{\sin \beta} l. \quad (4.20)$$

Se sabe que en una red de grafeno los átomos se acomodan en hexágonos regulares. Por geometría, los ángulos internos de un hexágono regular miden 120° . Por lo tanto, en la Figura 4.14 se tiene que $\alpha = 120^\circ$. Los ángulos de un triángulo siempre suman 180° , y de la Figura 4.14 se llega a

$$\alpha + 2\beta = 180^\circ. \quad (4.21)$$

Despejando β de la ecuación (4.21), se tiene que $\beta = 30^\circ$. Sustituyendo $l = 1.1547$, $\alpha = 120^\circ$ y $\beta = 30^\circ$ en la ecuación (4.20), se obtiene como resultado que la distancia a segundos vecinos para los parámetros actuales es $L = 2$ en unidades arbitrarias. El radio de interacción máximo para no incluir segundos vecinos y solo tener interacción a primeros vecinos puede tomarse como $r = 1.99$ dentro del código del programa Eigensistema de dos redes asimétricas de grafeno.nb.

Ahora que ya se tiene establecido el radio de interacción máximo para solo tener primeros vecinos, se procede a mostrar los resultados obtenidos y discutir sobre ellos. En este caso con radio de interacción $r = 1.99$, solo se hicieron 9 iteraciones debido a que en la última iteración la segunda red está a una distancia de 2.07846 (unidades arbitrarias) de la primer red, y por lo tanto las dos redes ya no alcanzan a interactuar entre sí porque el radio de interacción es menor que la distancia que las separa. A continuación se muestran cómo se ven las dos redes asimétricas en las iteraciones $j = 1$, $j = 4$, y $j = 9$. Dichas iteraciones corresponden al inicio, algún punto intermedio y final de la separación de las redes.

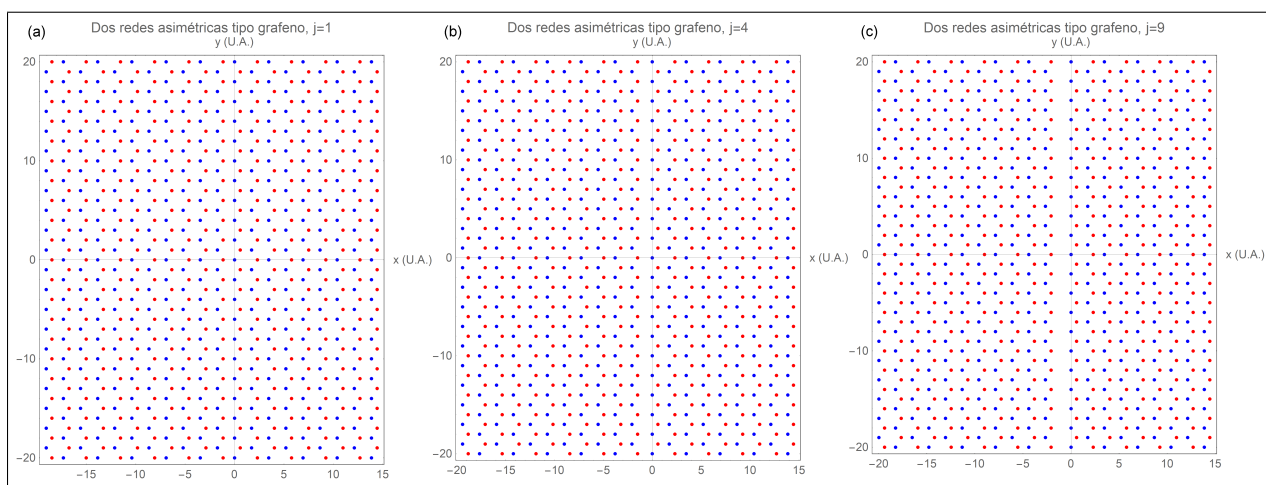


Figura 4.15: Gráficas de dos redes asimétricas tipo grafeno separándose entre sí, en las iteraciones (a) $j = 1$, (b) $j = 4$, y (c) $j = 9$. A estas tres gráficas le corresponden los siguientes parámetros en el código: $a = 1$, $n = 21$, $\gamma = 5$, $A = 1$, $\delta x = 0.8$ y $d = 0.92376$.

Similarmente como se hizo para el caso de las dos cadenas, a continuación se incluyen unas tablas que muestran las iteraciones, número de eigenvector, distancia a la segunda red y el eigenvalor de los estados atrapados simétricos y antisimétricos que se lograron identificar.

Iteración	Número de eigenvector	Distancia a la segunda red (U.A.)	Eigenvalor (U.A.)
1	614	-1.1547	3.10885×10^{-3}
2	757	-1.27017	1.74526×10^{-3}
3	788	-1.38564	9.7976×10^{-4}
4	792	-1.50111	5.50021×10^{-4}
5	796	-1.61658	3.08773×10^{-4}
6	800	-1.73205	1.7334×10^{-4}
7	801	-1.84752	9.73104×10^{-5}
8	801	-1.96299	5.46285×10^{-5}
9	N/A	-2.07846	N/A

Tabla 4.3: Datos de los estados atrapados simétricos de dos redes asimétricas tipo grafeno alejándose entre sí, con interacción a primeros vecinos usando el modelo de amarre fuerte.

Iteración	Número de eigenvector	Distancia a la segunda red (U.A.)	Eigenvalor (U.A.)
1	616	-1.1547	-3.10885×10^{-3}
2	758	-1.27017	-1.74526×10^{-3}
3	787	-1.38564	-9.7976×10^{-4}
4	791	-1.50111	-5.50021×10^{-4}
5	795	-1.61658	-3.08773×10^{-4}
6	799	-1.73205	-1.7334×10^{-4}
7	802	-1.84752	-9.73104×10^{-5}
8	802	-1.96299	-5.46285×10^{-5}
9	N/A	-2.07846	N/A

Tabla 4.4: Datos de los estados atrapados antisimétricos de dos redes asimétricas tipo grafeno alejándose entre sí, con interacción a primeros vecinos usando el modelo de amarre fuerte.

En la iteración 9 para las Tablas 4.3 y 4.4, no se logró identificar un estado atrapado. Como ya se había discutido antes, en esta iteración la distancia entre las dos redes es mayor que el radio de interacción y por lo tanto las redes ya no interaccionan entre sí. Por este motivo no aparecen estados atrapados para la última iteración de esta configuración.

A continuación se muestran las gráficas de los eigenvectores en donde aparecen estados atrapados simétricos y antisimétricos para las dos redes asimétricas tipo grafeno con interacción a casi segundos vecinos. Solo se van a incluir los resultados de las iteraciones $j = 1$, $j = 4$, y $j = 8$ porque estos son los más significativos y más adelante se explicará porqué cuando se muestren los histogramas correspondientes. Las Tablas 4.3 y 4.4 sirven de referencia para las gráficas de los eigenvectores e histogramas por si se quiere saber el número de eigenvector, distancia a la segunda red o los eigenvalores de los estados atrapados que se lograron identificar.

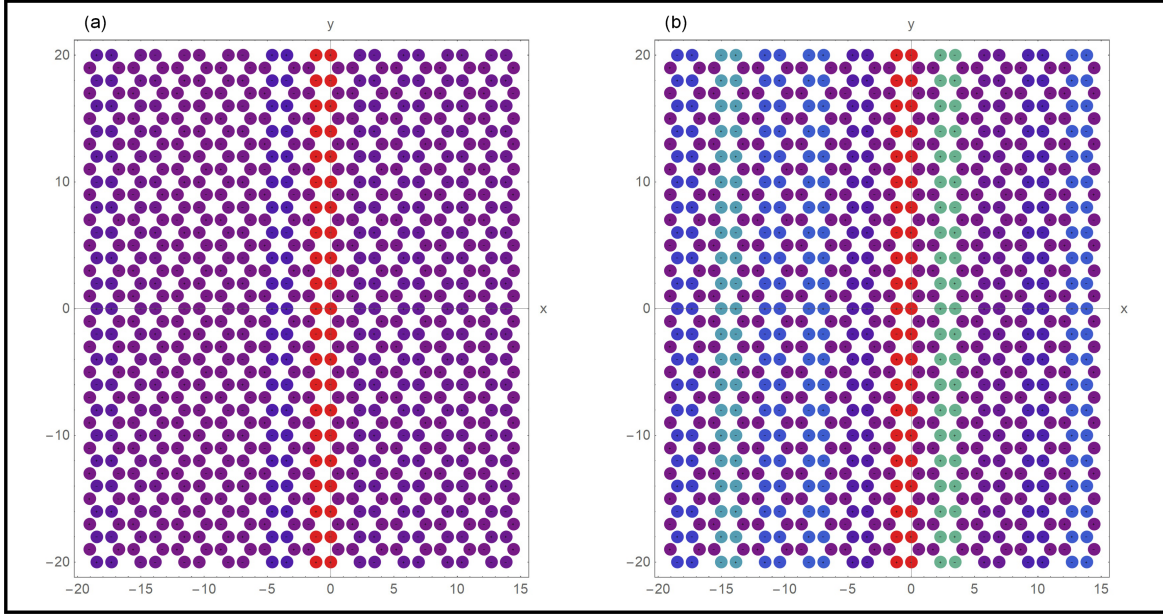


Figura 4.16: Estados atrapados de dos redes asimétricas tipo grafeno, con (a) estados simétricos y eigenvalor 3.10885×10^{-3} , y (b) estados antisimétricos y eigenvalor -3.10885×10^{-3} , ambas con $k = 820$ y en la iteración $j = 1$. A estas dos gráficas le corresponden los siguientes parámetros en el código: $a = 1$, $n = 21$, $r = 1.99$, $\gamma = 5$, $A = 1$, $\delta x = 0.8$ y $d = 0.92376$. Tanto el eje horizontal como el vertical están en unidades arbitrarias.

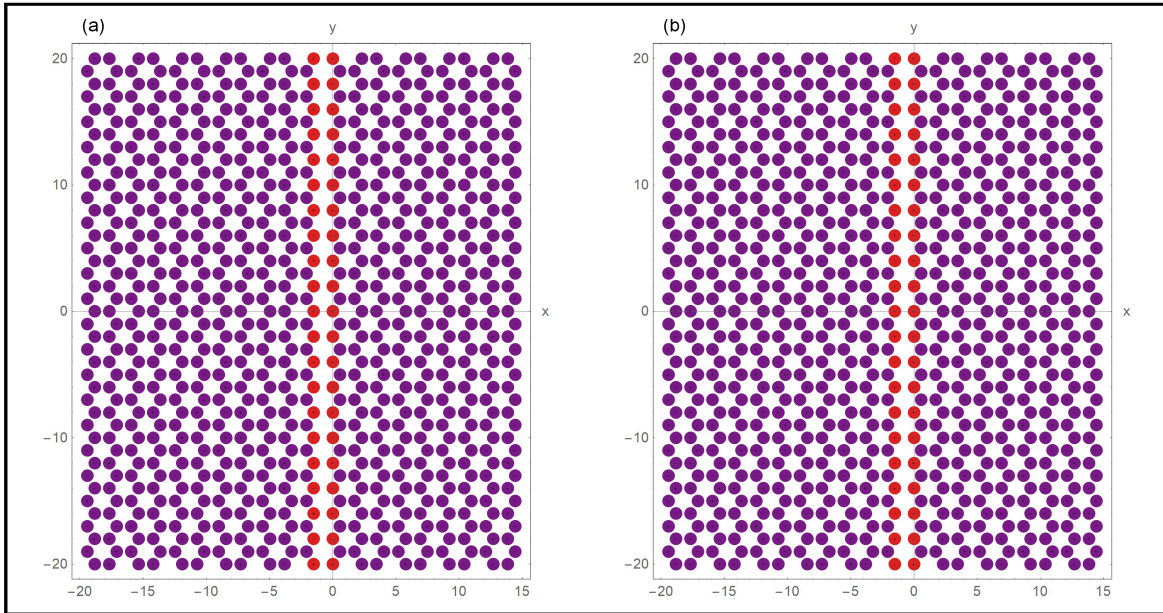


Figura 4.17: Estados atrapados de dos redes asimétricas tipo grafeno, con (a) estados simétricos y eigenvalor 5.50021×10^{-4} , y (b) estados antisimétricos y eigenvalor -5.50021×10^{-4} , ambas con $k = 820$ y en la iteración $j = 4$. A estas dos gráficas le corresponden los siguientes parámetros en el código: $a = 1$, $n = 21$, $r = 1.99$, $\gamma = 5$, $A = 1$, $\delta x = 0.8$ y $d = 0.92376$. Tanto el eje horizontal como el vertical están en unidades arbitrarias.

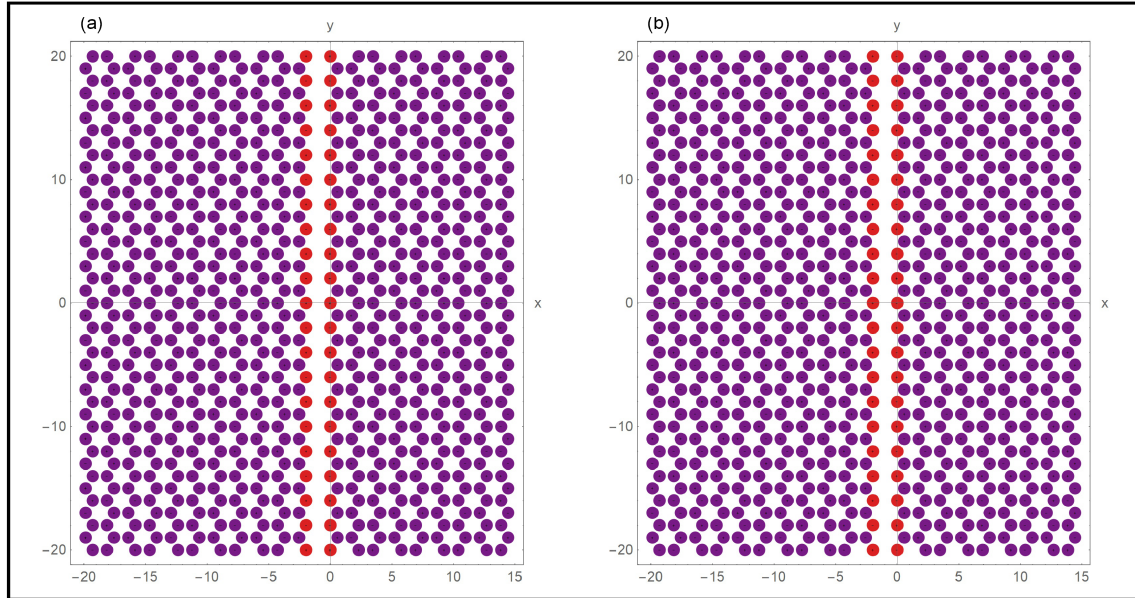


Figura 4.18: Estados atrapados de dos redes asimétricas tipo grafeno, con (a) estados simétricos y eigenvalor 5.46285×10^{-5} , y (b) estados antisimétricos y eigenvalor -5.46285×10^{-5} , ambas con $k = 820$ y en la iteración $j = 8$. A estas dos gráficas le corresponden los siguientes parámetros en el código: $a = 1$, $n = 21$, $r = 1.99$, $\gamma = 5$, $A = 1$, $\delta x = 0.8$ y $d = 0.92376$. Tanto el eje horizontal como el vertical están en unidades arbitrarias.

Con otros programas sencillos se exportaron los eigenvalores de las dos redes tipo grafeno utilizando los mismos parámetros que antes, y se importaron como listas a otro programa para después graficar los histogramas correspondientes a dichos eigenvalores en cada iteración. Encima de los histogramas se graficaron como líneas punteadas verticales los eigenvalores correspondientes a los estados atrapados simétricos y antisimétricos. Esto se hizo para ver en qué iteración los estados atrapados se introducen (o se alejan) dentro de los bultos de las dos redes. En seguida se muestran dichos histogramas correspondientes a las Figuras 4.16, 4.17, y 4.18.

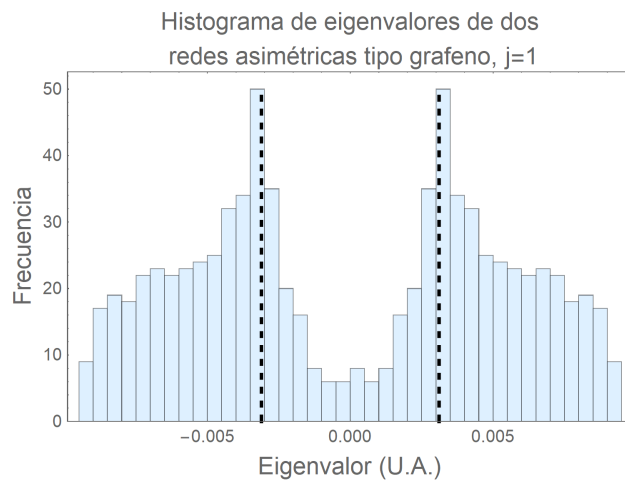


Figura 4.19: Histogramas de dos redes asimétricas con estados atrapados simétricos con eigenvalor 3.10885×10^{-3} y antisimétricos con eigenvalor -3.10885×10^{-3} , ambos en la iteración $j = 1$ y con interacción a primeros vecinos. A esta gráfica le corresponden los siguientes parámetros en el código: $a = 1$, $n = 21$, $r = 1.99$, $\gamma = 5$, $A = 1$, $\delta x = 0.8$ y $d = 0.92376$.

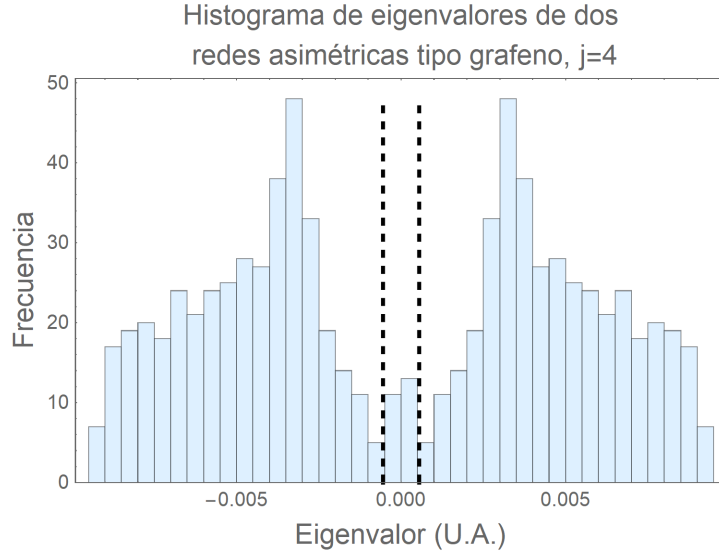


Figura 4.20: Histogramas de dos redes asimétricas con estados atrapados simétricos con eigenvalor 5.50021×10^{-4} y antisimétricos con eigenvalor -5.50021×10^{-4} , ambos en la iteración $j = 4$ y con interacción a primeros vecinos. A esta gráfica le corresponden los siguientes parámetros en el código: $a = 1$, $n = 21$, $r = 1.99$, $\gamma = 5$, $A = 1$, $\delta x = 0.8$ y $d = 0.92376$.

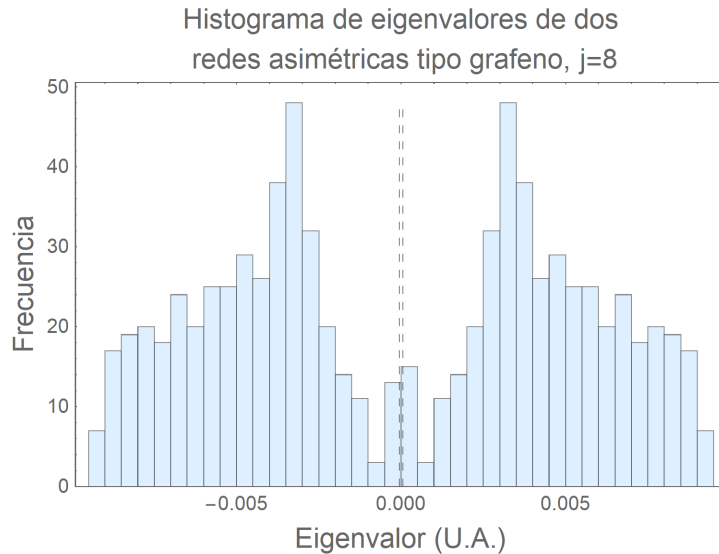


Figura 4.21: Histogramas de dos redes asimétricas con estados atrapados simétricos con eigenvalor 5.46285×10^{-5} y antisimétricos con eigenvalor -5.46285×10^{-5} , ambos en la iteración $j = 8$ y con interacción a primeros vecinos. A esta gráfica le corresponden los siguientes parámetros en el código: $a = 1$, $n = 21$, $r = 1.99$, $\gamma = 5$, $A = 1$, $\delta x = 0.8$ y $d = 0.92376$.

En los histogramas de las Figuras 4.19, 4.20, y 4.21, se notan dos montañas al lado del origen en la distribución de los eigenvalores. Cuando las dos redes están juntas en la iteración $j = 1$ en la Figura 4.19, los eigenvalores de los estados atrapados de ambas redes se localizan muy cerca de las cumbres de las montañas. En la iteración $j = 4$ en la Figura 4.20, los eigenvalores de los estados atrapados de ambas redes ya no se localizan cerca de las cumbres, sino que se encuentran cercanos al centro de la distribución cuyo eigenvalor es cercano a cero. En la última iteración $j = 8$ en la Figura 4.21, los eigenvalores de los estados atrapados están prácticamente en el cero de la distribución. De todo esto se puede concluir que es en la iteración $j = 4$

cuando los eigenvalores de los estados atrapados se salen del bulto de su respectiva red.

Así como se hizo para el caso de dos cadenas tipo grafeno en la Figura 4.12, a continuación se muestra una gráfica de los eigenvalores de los estados atrapados en función de la distancia a la segunda red tipo grafeno desde la primera para el caso del radio de interacción a primeros vecinos. Para crear esta gráfica se utilizaron los datos de las columnas “Distancia a la segunda red (U.A.)” y “Eigenvalor (U.A.)” de las Tablas 4.3 y 4.4.

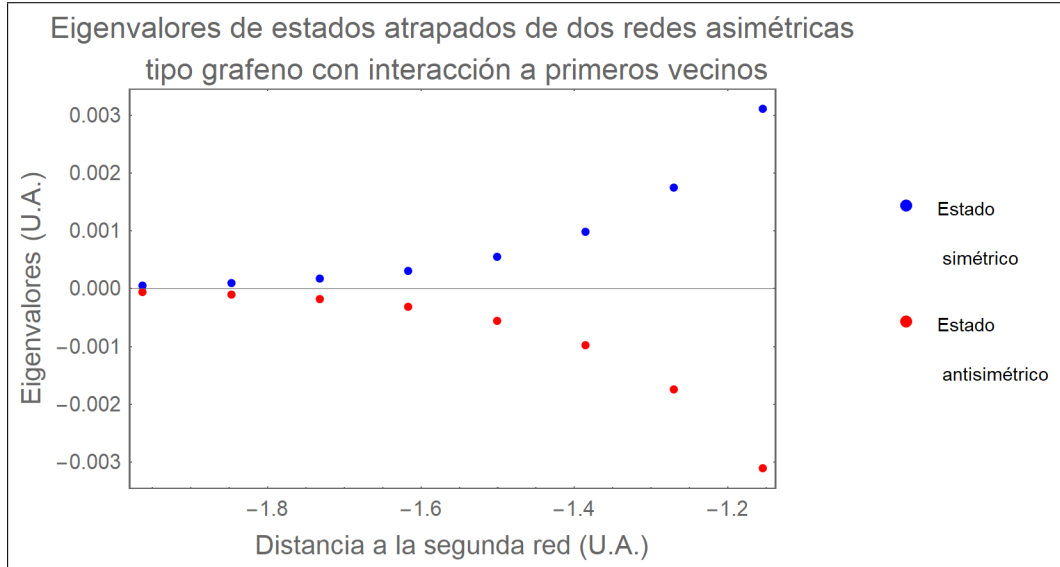


Figura 4.22: Eigenvalores de estados atrapados simétricos y antisimétricos en dos redes asimétricas tipo grafeno cuando la segunda red se separa poco a poco de la primera, asumiendo interacción a primeros vecinos. A esta gráfica le corresponden los siguientes parámetros dentro del código: $a = 1$, $n = 21$, $r = 1.99$, $\gamma = 5$, $A = 1$, $\delta x = 0.8$ y $d = 0.92376$.

El comportamiento de la gráfica de la Figura 4.22 es igual que el de la Figura 4.12, es decir, entre más se aleja la segunda red de la primera, los eigenvalores de los estados atrapados simétricos y antisimétricos se van acercando entre sí.

Para concluir este capítulo hace falta analizar el caso de dos redes tipo grafeno con fronteras simétricas y asimétricas con interacción a cuartos vecinos. Así como en el caso de las dos cadenas tipo grafeno, aquí se van a separar ambas redes en 13 iteraciones controladas. A continuación se muestran cómo se ven las dos redes en las iteraciones $j = 1$, $j = 3$, y $j = 13$. Dichas iteraciones corresponden al inicio, algún punto intermedio y final de la separación de las redes.

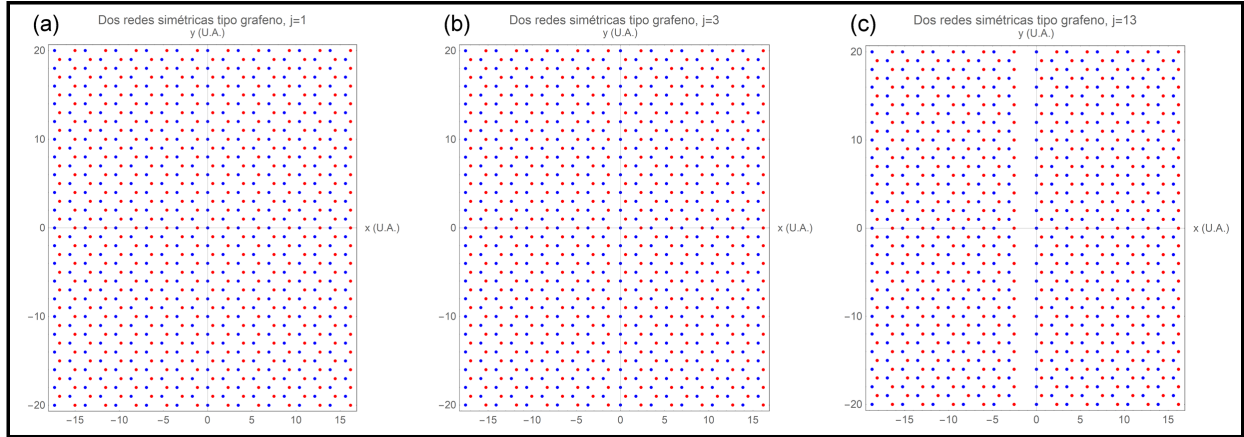


Figura 4.23: Gráficas de dos redes simétricas tipo grafeno separándose entre sí, en las iteraciones (a) $j = 1$, (b) $j = 3$, y (c) $j = 13$. A estas tres gráficas le corresponden los siguientes parámetros en el código: $a = 1$, $n = 21$, $\gamma = 5$, $A = 1$, $\delta x = 0.8$ y $d = 0.92376$.

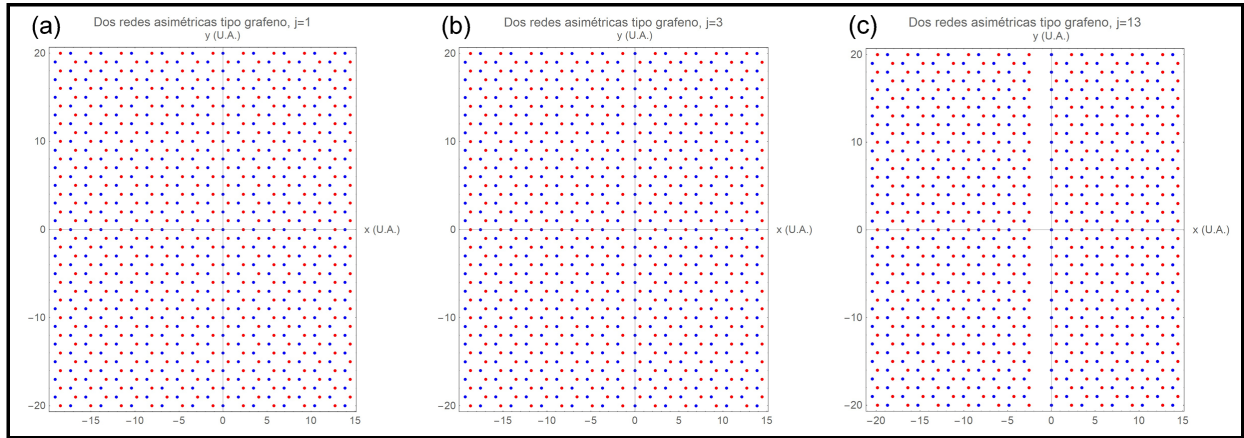


Figura 4.24: Gráficas de dos redes asimétricas tipo grafeno separándose entre sí, en las iteraciones (a) $j = 1$, (b) $j = 3$, y (c) $j = 13$. A estas tres gráficas le corresponden los siguientes parámetros en el código: $a = 1$, $n = 21$, $\gamma = 5$, $A = 1$, $\delta x = 0.8$ y $d = 0.92376$.

Para ambos tipos de redes basadas en el grafeno, en cada iteración se exportaron las gráficas de los eigenvectores y además se construyeron histogramas con otro programa para ver la distribución de los eigenvalores. Igual como se hizo para el caso anterior, se construyeron tablas en donde se colocaron la información de algunos parámetros correspondientes a los estados atrapados que se lograron identificar. A continuación se muestran dichas tablas.

Iteración	Número de eigenvector	Distancia a la segunda red (U.A.)	Eigenvalor (U.A.)
1	675	-1.1547	2.68818×10^{-3}
2	773	-1.27017	1.42558×10^{-3}
3	789	-1.38564	8.8383×10^{-4}
4	795	-1.50111	4.5739×10^{-4}
5	801	-1.61658	2.19074×10^{-4}
6	809	-1.73205	8.57498×10^{-5}
7	820	-1.84752	-3.0209×10^{-6}
8	817	-1.96299	-4.21393×10^{-5}
9	816	-2.07846	-6.42044×10^{-5}
10	816	-2.19393	-7.64848×10^{-5}
11	812	-2.3094	-8.35711×10^{-5}
12	810	-2.42487	-8.74269×10^{-5}
13	810	-2.54034	-8.9569×10^{-5}

Tabla 4.5: Datos de los estados atrapados simétricos de dos redes simétricas tipo grafeno alejándose entre sí, con interacción a cuartos vecinos usando el modelo de amarre fuerte.

Iteración	Número de eigenvector	Distancia a la segunda red (U.A.)	Eigenvalor (U.A.)
1	593	-1.1547	-3.17143×10^{-3}
2	763	-1.27017	-1.61355×10^{-3}
3	783	-1.38564	-1.05662×10^{-3}
4	789	-1.50111	-6.30072×10^{-4}
5	791	-1.61658	-3.91671×10^{-4}
6	795	-1.73205	-2.58398×10^{-4}
7	796	-1.84752	-1.84492×10^{-4}
8	797	-1.96299	-1.4356×10^{-4}
9	799	-2.07846	-1.20875×10^{-4}
10	800	-2.19393	-1.08304×10^{-4}
11	800	-2.3094	-1.01393×10^{-4}
12	800	-2.42487	-9.79747×10^{-5}
13	804	-2.54034	-9.48711×10^{-5}

Tabla 4.6: Datos de los estados atrapados antisimétricos de dos redes simétricas tipo grafeno alejándose entre sí, con interacción a cuartos vecinos usando el modelo de amarre fuerte.

Iteración	Número de eigenvector	Distancia a la segunda red (U.A.)	Eigenvalor (U.A.)
1	634	-1.1547	2.99453×10^{-3}
2	762	-1.27017	1.64517×10^{-3}
3	791	-1.38564	8.83828×10^{-4}
4	797	-1.50111	4.57391×10^{-4}
5	803	-1.61658	2.19105×10^{-4}
6	813	-1.73205	8.60169×10^{-5}
7	820	-1.84752	-3.01882×10^{-6}
8	817	-1.96299	-4.21281×10^{-5}
9	816	-2.07846	-6.41845×10^{-5}
10	815	-2.19393	-7.65449×10^{-5}
11	815	-2.3094	-8.3142×10^{-5}
12	809	-2.42487	-9.25842×10^{-5}
13	816	-2.54034	-7.75859×10^{-5}

Tabla 4.7: Datos de los estados atrapados simétricos de dos redes asimétricas tipo grafeno alejándose entre sí, con interacción a cuartos vecinos usando el modelo de amarre fuerte.

Iteración	Número de eigenvector	Distancia a la segunda red (U.A.)	Eigenvalor (U.A.)
1	665	-1.1547	-2.7884×10^{-3}
2	751	-1.27017	-1.81816×10^{-3}
3	784	-1.38564	-1.05662×10^{-3}
4	791	-1.50111	-6.30073×10^{-4}
5	795	-1.61658	-3.9121×10^{-4}
6	797	-1.73205	-2.58397×10^{-4}
7	798	-1.84752	-1.84496×10^{-4}
8	800	-1.96299	-1.43537×10^{-4}
9	802	-2.07846	-1.20888×10^{-4}
10	803	-2.19393	-1.08225×10^{-4}
11	803	-2.3094	-1.01472×10^{-4}
12	806	-2.42487	-9.72113×10^{-5}
13	807	-2.54034	9.44135×10^{-5}

Tabla 4.8: Datos de los estados atrapados antisimétricos de dos redes asimétricas tipo grafeno alejándose entre sí, con interacción a cuartos vecinos usando el modelo de amarre fuerte.

A continuación se muestran las gráficas de los eigenvectores en donde aparecen estados atrapados simétricos y antisimétricos para las dos redes simétricas y asimétricas tipo grafeno con interacción a cuartos vecinos. Nuevamente, solo se van a incluir los resultados de las iteraciones $j = 1$, $j = 3$, y $j = 13$ porque estos son los más significativos y más adelante se explicará porqué cuando se muestren los histogramas correspondientes. Las Tablas 4.5, 4.6, 4.7, y 4.8 sirven de referencia para las gráficas de los eigenvectores e histogramas por si se quiere saber el número de eigenvector, distancia a la segunda red o los eigenvalores de los estados atrapados que se lograron identificar.

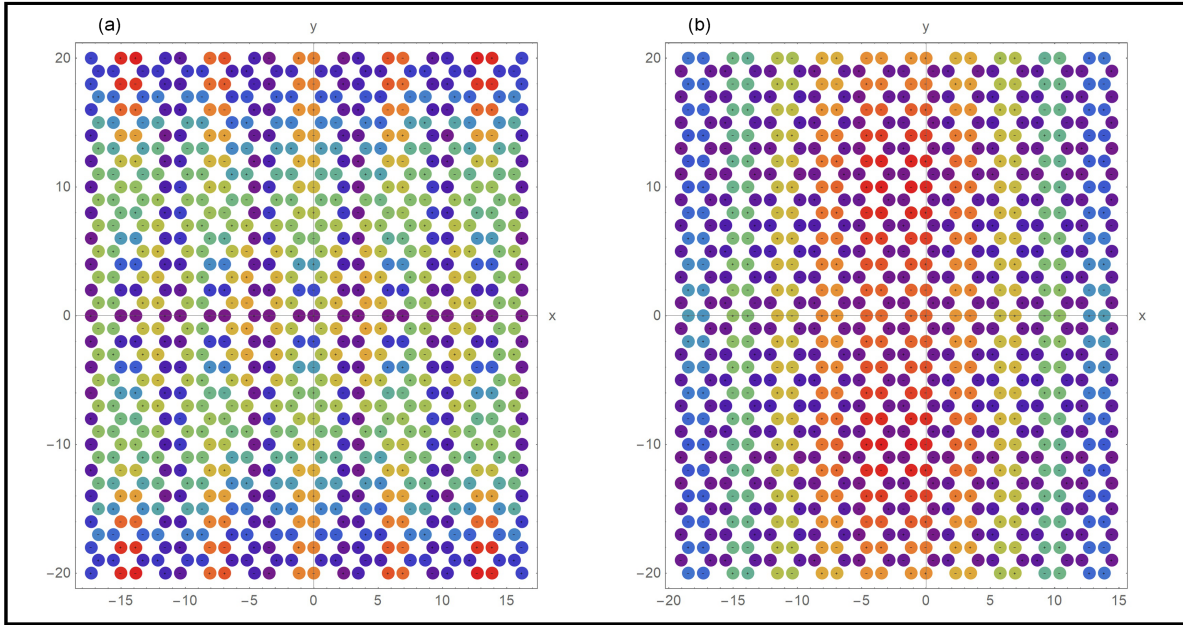


Figura 4.25: Estados atrapados simétricos de dos redes tipo grafeno (a) simétricas, con eigenvalor 2.68818×10^{-3} , y (b) asimétricas, con eigenvalor 2.99453×10^{-3} , ambas con $k = 820$ y en la iteración $j = 1$. A estas dos gráficas le corresponden los siguientes parámetros en el código: $a = 1$, $n = 21$, $r = 3l$, $\gamma = 5$, $A = 1$, $\delta x = 0.8$ y $d = 0.92376$. Tanto el eje horizontal como el vertical están en unidades arbitrarias.

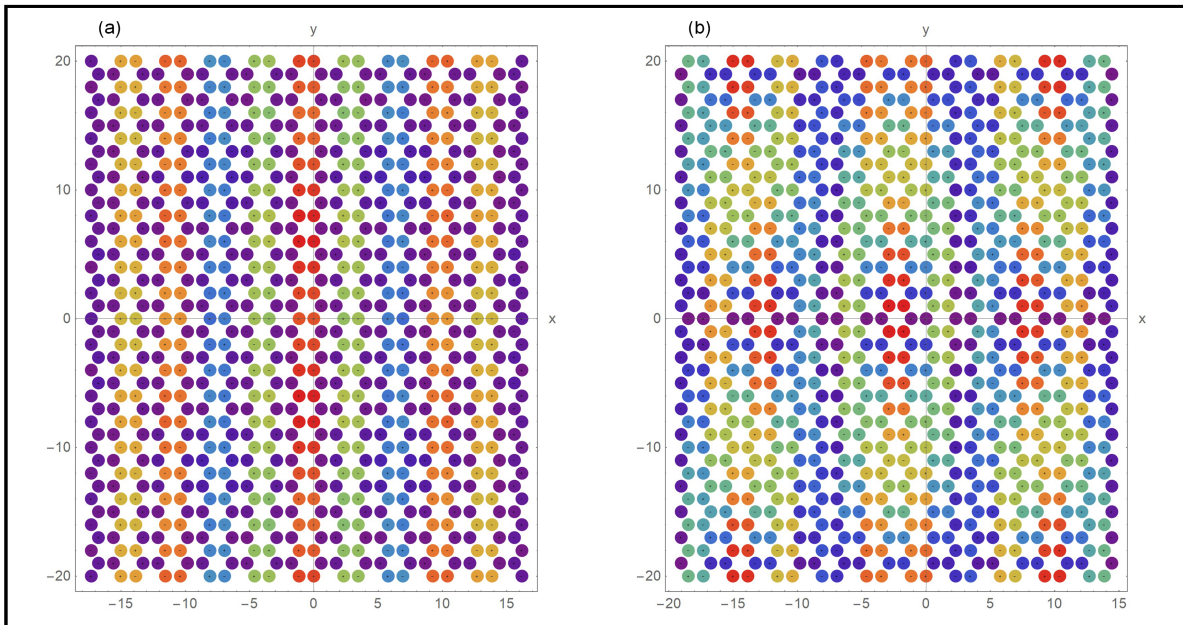


Figura 4.26: Estados atrapados antisimétricos de dos redes tipo grafeno (a) simétricas, con eigenvalor -3.17143×10^{-3} , y (b) asimétricas, con eigenvalor -2.7884×10^{-3} , ambas con $k = 820$ y en la iteración $j = 1$. A estas dos gráficas le corresponden los siguientes parámetros en el código: $a = 1$, $n = 21$, $r = 3l$, $\gamma = 5$, $A = 1$, $\delta x = 0.8$ y $d = 0.92376$. Tanto el eje horizontal como el vertical están en unidades arbitrarias.

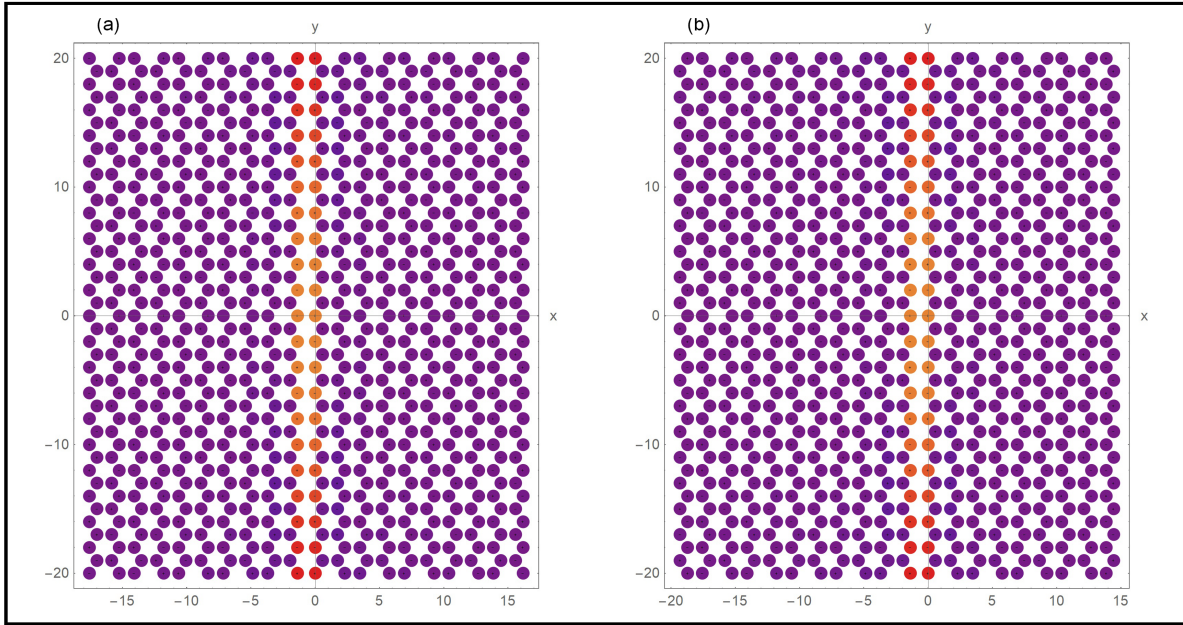


Figura 4.27: Estados atrapados simétricos de dos redes tipo grafeno (a) simétricas, con eigenvalor 8.8383×10^{-4} , y (b) asimétricas, con eigenvalor 8.83828×10^{-4} , ambas con $k = 820$ y en la iteración $j = 3$. A estas dos gráficas le corresponden los siguientes parámetros en el código: $a = 1$, $n = 21$, $r = 3l$, $\gamma = 5$, $A = 1$, $\delta x = 0.8$ y $d = 0.92376$. Tanto el eje horizontal como el vertical están en unidades arbitrarias.

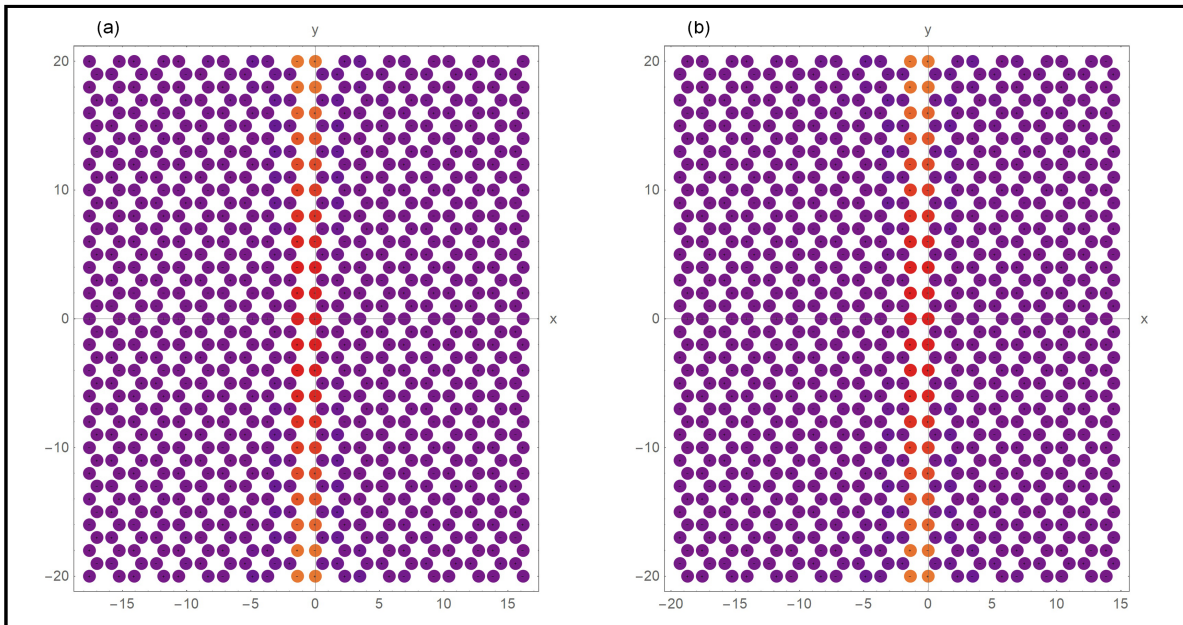


Figura 4.28: Estados atrapados antisimétricos de dos redes tipo grafeno (a) simétricas, con eigenvalor -1.05662×10^{-3} , y (b) asimétricas, con eigenvalor -1.05662×10^{-3} , ambas con $k = 820$ y en la iteración $j = 3$. A estas dos gráficas le corresponden los siguientes parámetros en el código: $a = 1$, $n = 21$, $r = 3l$, $\gamma = 5$, $A = 1$, $\delta x = 0.8$ y $d = 0.92376$. Tanto el eje horizontal como el vertical están en unidades arbitrarias.

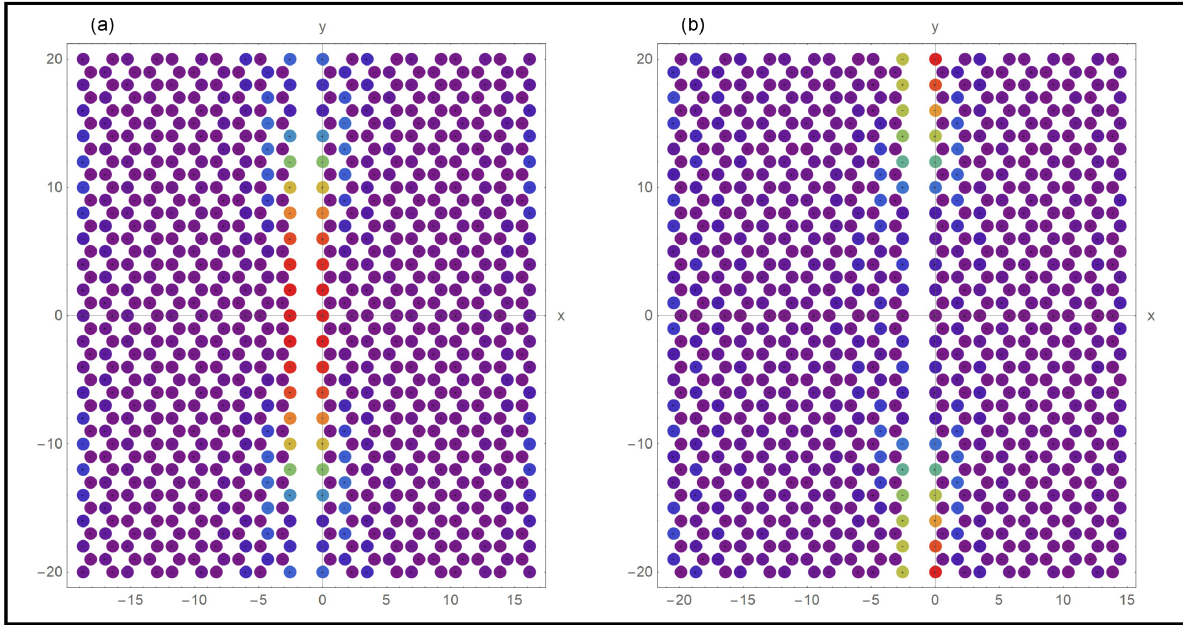


Figura 4.29: Estados atrapados simétricos de dos redes tipo grafeno (a) simétricas, con eigenvalor -8.9569×10^{-5} , y (b) asimétricas, con eigenvalor -7.75859×10^{-5} , ambas con $k = 820$ y en la iteración $j = 13$. A estas dos gráficas le corresponden los siguientes parámetros en el código: $a = 1$, $n = 21$, $r = 3l$, $\gamma = 5$, $A = 1$, $\delta x = 0.8$ y $d = 0.92376$. Tanto el eje horizontal como el vertical están en unidades arbitrarias.

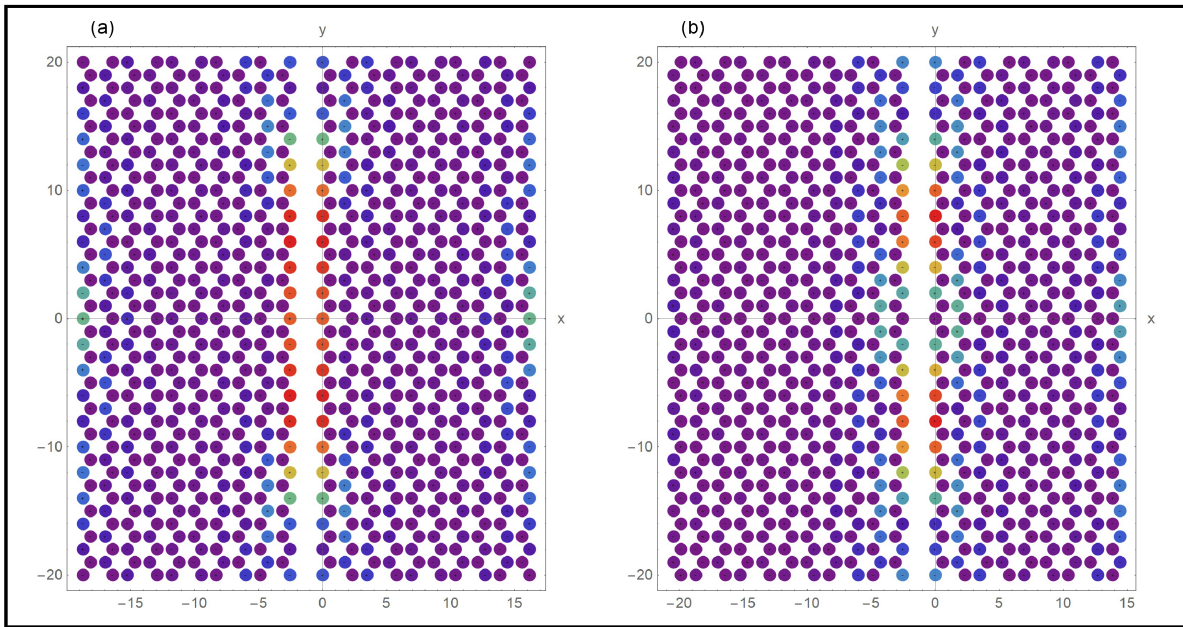


Figura 4.30: Estados atrapados antisimétricos de dos redes tipo grafeno (a) simétricas, con eigenvalor -9.48711×10^{-5} , y (b) asimétricas, con eigenvalor -9.44135×10^{-5} , ambas con $k = 820$ y en la iteración $j = 13$. A estas dos gráficas le corresponden los siguientes parámetros en el código: $a = 1$, $n = 21$, $r = 3l$, $\gamma = 5$, $A = 1$, $\delta x = 0.8$ y $d = 0.92376$. Tanto el eje horizontal como el vertical están en unidades arbitrarias.

Al inspeccionar las gráficas de los eigenvectores de las Figuras 4.25 y 4.26, se puede notar que los potenciales estados atrapados no se ven como los de las Figuras 4.27, 4.28, 4.29, y 4.30. Los estados que se muestran en la Figuras 4.25 y 4.26 son los más cercanos a ser potenciales estados atrapados para la primer iteración $j = 1$. Esto es debido a que como las dos redes están juntas inicialmente, actúan como una sola red y por lo tanto no hay interacción a distancia entre las dos redes que usualmente están separadas por una distancia mayor a l . Para las iteraciones de $j = 2$ hasta $j = 13$ sí aparecen los estados atrapados que se acostumbra ver.

En las Figuras 4.27 y 4.28, se observa que las magnitudes de los eigenvectores (los colores de los puntos) de los estados atrapados son aproximadamente iguales para las dos redes simétricas y asimétricas. Sin embargo, en el caso de las Figuras 4.29 y 4.30, las magnitudes de los estados atrapados son diferentes entre las dos redes simétricas y asimétricas. Se piensa que esto sucede debido a la asimetría que existe entre las dos redes.

Al comparar la Figura 4.27b con la Figura 4.16a, y la Figura 4.26b con la Figura 4.16b, los cuales representan los estados atrapados simétricos y antisimétricos para dos redes asimétricas tipo grafeno con los mismos parámetros en el código a excepción del radio de interacción, se observa que las gráficas son muy diferentes entre sí. Para las Figuras 4.25b y 4.26b los átomos tienen interacción a cuartos vecinos, y como en esta primera iteración las dos redes están juntas y actúan como una, los átomos en donde usualmente aparecen los estados atrapados (en las posiciones de los puntos rojos de las Figuras 4.16a y 4.16b, o sea, en la última fila de red de la izquierda y la primer fila de la red de la derecha) interaccionan con un mayor número de átomos debido a su mayor alcance y por eso la gráfica de los eigenvectores difiere en al compararlos con las gráficas correspondientes a las redes con interacción primeros vecinos.

Al comparar la Figura 4.27b con la Figura 4.17a, y la Figura 4.28b con la Figura 4.17b, se observa que las gráficas son similares entre sí. Ambos pares de gráficas presentan estados atrapados muy claros, pero las magnitudes de los eigenvectores (los colores de los puntos) de dichos estados atrapados en el caso de las gráficas de las Figuras 4.27b y 4.28b no son uniformes como los de las Figuras 4.16a y 4.16b. De hecho, en las Figuras 4.27b y 4.28b, entre más se acerca al borde superior e inferior a lo largo de las filas donde se ubica el estado atrapado, la magnitud de los eigenvectores va disminuyendo y esto se identifica por la intensidad de los colores de los puntos. Cabe mencionar que ambos pares de gráficas que se están comparando difieren en una iteración, la cual corresponde a una diferencia de distancia en $-1.38564 - (-1.50111) = 0.11547$ en unidades arbitrarias para la separación entre las dos redes.

Las Figuras 4.16, 4.17 y 4.18 muestran que los estados atrapados que se forman permanecen entre las dos redes asimétricas que se separan entre sí, siempre y cuando la distancia entre las dos redes sea menor que la distancia del radio de interacción que en este caso es primeros vecinos. Las Figuras 4.25 al 4.30 muestran que los estados atrapados no son homogéneos en el sentido de que todos los átomos de dichos estados no tienen la misma magnitud de eigenvector. A partir de esta información y de analizar las gráficas de los eigenvectores se concluye que los estados atrapados son más consistentes para dos redes asimétricas de grafeno cuando se tiene interacción a primeros vecinos que cuando se tiene interacción a cuartos vecinos y dejando los demás parámetros iguales.

A continuación a partir de la siguiente página se muestran los histogramas correspondientes a las Figuras del 4.25 al 4.30, juntándose por iteración y por la simetría de las dos redes.

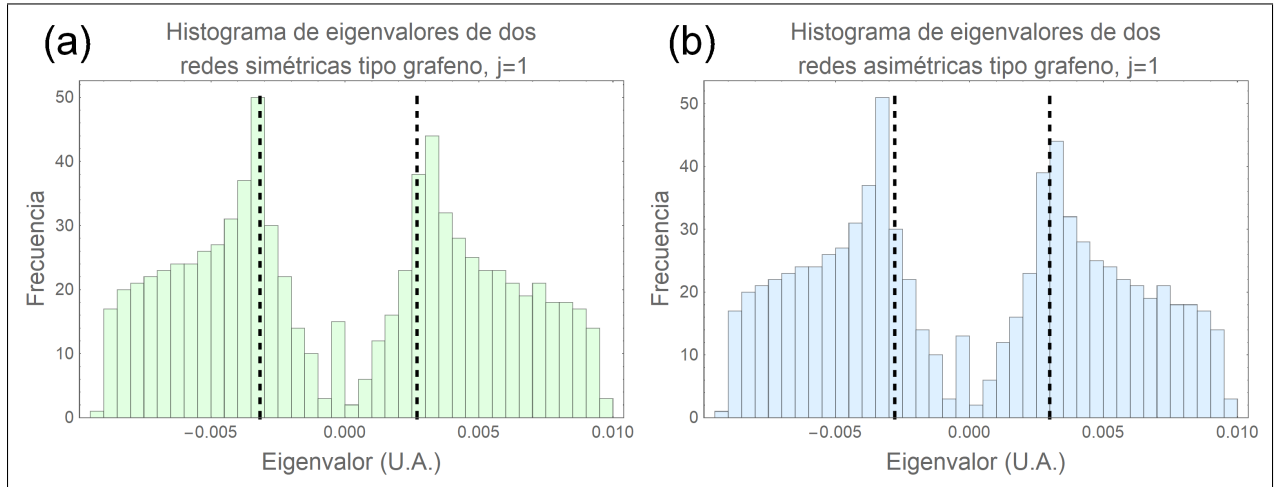


Figura 4.31: Histogramas de dos redes tipo grafeno (a) simétricas, cuyos eigenvalores de los estados atrapados, representados por las líneas punteadas verticales, son 2.68818×10^{-3} y -3.17143×10^{-3} , y (b) asimétricas, cuyos eigenvalores de los estados atrapados, representados por las líneas punteadas verticales, son 2.99453×10^{-3} y -2.7884×10^{-3} , ambos casos en la iteración $j = 1$ y con interacción a cuartos vecinos. A estas dos gráficas le corresponden los siguientes parámetros en el código: $a = 1$, $n = 21$, $r = 3l$, $\gamma = 5$, $A = 1$, $\delta x = 0.8$ y $d = 0.92376$.

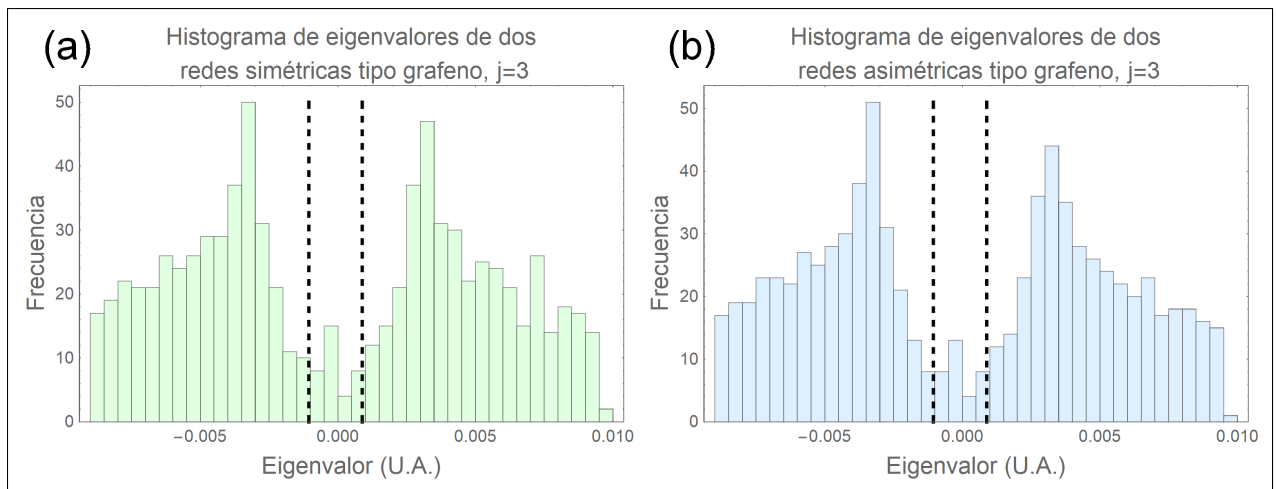


Figura 4.32: Histogramas de dos redes tipo grafeno (a) simétricas, cuyos eigenvalores de los estados atrapados, representados por las líneas punteadas verticales, son 8.8383×10^{-4} y -1.05662×10^{-3} , y (b) asimétricas, cuyos eigenvalores de los estados atrapados, representados por las líneas punteadas verticales, son 8.83828×10^{-4} y -1.05662×10^{-3} , ambos casos en la iteración $j = 3$ y con interacción a cuartos vecinos. A estas dos gráficas le corresponden los siguientes parámetros en el código: $a = 1$, $n = 21$, $r = 3l$, $\gamma = 5$, $A = 1$, $\delta x = 0.8$ y $d = 0.92376$.

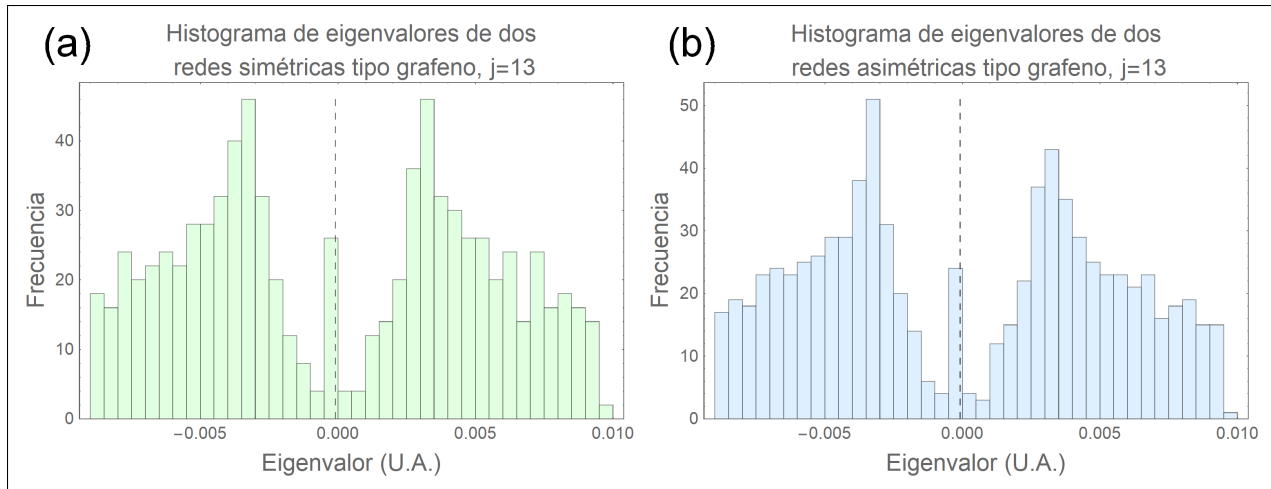


Figura 4.33: Histogramas de dos redes tipo grafeno (a) simétricas, cuyos eigenvalores de los estados atrapados, representados por las líneas punteadas verticales, son -8.9569×10^{-5} y -9.48711×10^{-5} , y (b) asimétricas, cuyos eigenvalores de los estados atrapados, representados por las líneas punteadas verticales, son -7.75859×10^{-5} y -9.44135×10^{-5} , ambos casos en la iteración $j = 13$ y con interacción a cuartos vecinos. A estas dos gráficas le corresponden los siguientes parámetros en el código: $a = 1$, $n = 21$, $r = 3l$, $\gamma = 5$, $A = 1$, $\delta x = 0.8$ y $d = 0.92376$.

Nuevamente se observan dos montañas en ambos lados del origen en las distribuciones de eigenvalores en las Figuras 4.31, 4.32 y 4.33. Las líneas punteadas verticales representan los eigenvalores de los estados atrapados simétricos y antisimétricos. La Figura 4.31 corresponde a la iteración $j = 1$ cuando las dos redes están juntas, y se observa que los eigenvalores de los estados atrapados se ubican dentro del bulto de cada red, específicamente en el rango de eigenvalores que tienen mayor frecuencia según el histograma. La Figura 4.32 corresponde a la iteración $j = 3$ cuando las dos redes están en algún punto medio de su separación, y se observa que los eigenvalores de los estados atrapados ya se salieron de su respectiva montaña de eigenvalores de cada red. Finalmente, la Figura 4.33 corresponde a la iteración $j = 13$ cuando las dos redes están en su máxima separación según los parámetros en el código, y aquí los eigenvalores de los estados atrapados están prácticamente en el centro de la distribución. De todo esto se puede concluir que es en la iteración $j = 3$ cuando los eigenvalores atrapados se salen de la montaña de su respectiva red para ambos casos de redes simétricas y asimétricas.

Así como se hizo para el caso de dos redes tipo grafeno con interacción a primeros vecinos en la Figura 4.22, a continuación en la siguiente página se muestra una gráfica de los eigenvalores de los estados atrapados simétricos y antisimétricos en función de la distancia a la segunda red tipo grafeno desde la primera para ambas redes simétricas y asimétricas. Para crear esta gráfica se utilizaron los datos de las columnas “Distancia a la segunda red (U.A.)” y “Eigenvalor (U.A.)” de las Tablas 4.5, 4.6, 4.7, y 4.8.

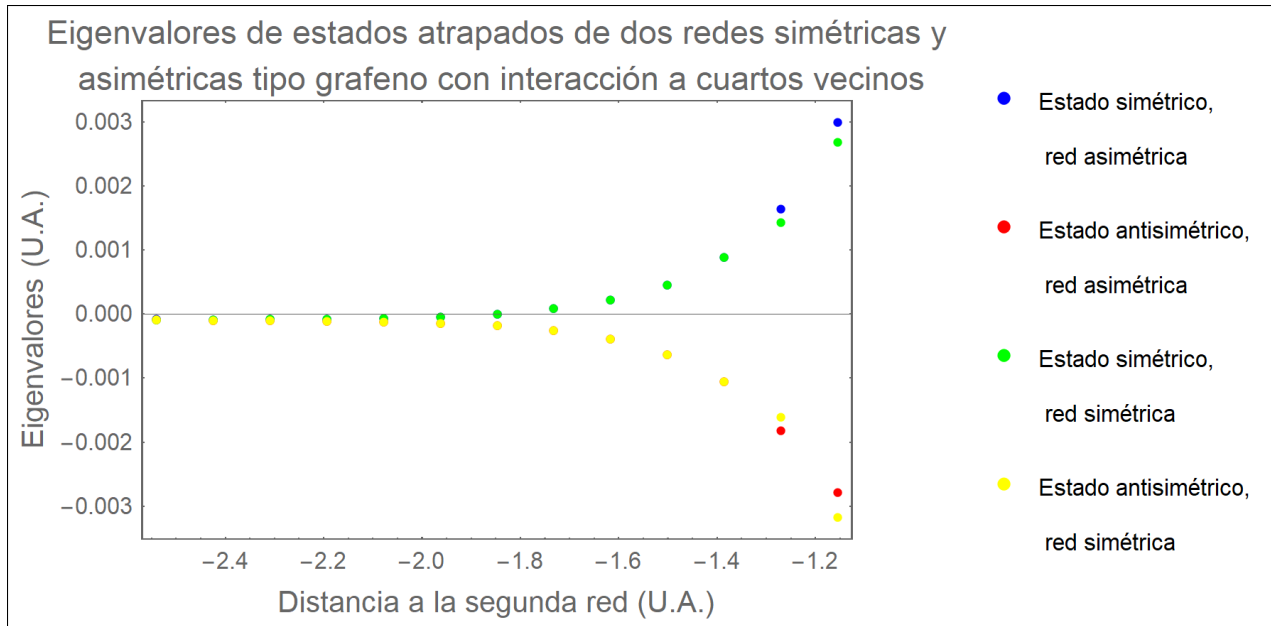


Figura 4.34: Eigenvalores de estados atrapados de signo igual y opuesto en dos redes de grafeno simétricas y asimétricas cuando la segunda red se separa poco a poco de la primera, asumiendo interacción a cuartos vecinos. A estas gráficas le corresponden los siguientes parámetros dentro del código: $a = 1$, $n = 21$, $r = 3l$, $\gamma = 5$, $A = 1$, $\delta x = 0.8$ y $d = 0.92376$.

La gráficas de la Figura 4.34 tienen el mismo comportamiento que las gráficas de las Figuras 4.22 y 4.12, las cuales corresponden a dos redes y dos cadenas con geometría en base al grafeno, respectivamente. El comportamiento que todas estas tres gráficas comparten es que los eigenvalores de los estados atrapados simétricos y antisimétricos van acercándose conforme las dos redes (dos cadenas) se alejan entre sí. Se observa que los eigenvalores de los estados atrapados simétricos y antisimétricos para ambas redes son aproximadamente iguales. A diferencia de las gráficas de las Figuras 4.12 y 4.34, la gráfica de la Figura 4.22 es simétrica respecto al eigenvalor cero, y esto se puede verificar con los datos de la Tablas 4.3 y 4.4.

En este capítulo se vio cómo aparecen los estados atrapados al alejar una red tipo grafeno (o cadena) de otra, utilizando el modelo de amarre fuerte con interacción a cuartos vecinos y en un caso particular una interacción a primeros vecinos. Se propuso un modelo teórico para describir las interacciones a primeros vecinos para una cadena lineal tipo grafeno y luego para dos cadenas acopladas. En ambos casos se llegó a una ecuación de eigenvalores. En todas las configuraciones de las redes con las que se trabajó se mantuvieron iguales todos los parámetros (en unidades arbitrarias) a excepción de la geometría de las dos redes y el radio de interacción. Para cada configuración se determinó el eigensistema en cada iteración conforme la segunda red (cadena) se alejaba de la primera, y con toda esa información se construyó gráficas de los componentes de los eigenvectores, eigenvalores de los estados atrapados, histogramas de los eigenvalores y las representaciones espaciales de cómo iba cambiando el sistema en cada iteración. Después de analizar toda la información que mostraban las gráficas, se concluye que los estados atrapados aparecen y permanecen en el sistema de forma similar para los tres diferentes casos que se trabajaron. Debido a las observaciones que se hicieron en este capítulo, también se puede concluir que los estados atrapados son robustos ante la simetría de la frontera de la red, además de que se logró dar un simple modelo teórico para entender su origen. En cuanto la distribución de eigenvalores y el comportamiento de los eigenvalores en función de la distancia de separación, todos los casos presentaron resultados muy similares.

Capítulo 5

Parámetros para el Modelo de Amarre Fuerte y Estados Atrapados del Grafeno

En los capítulos anteriores se encontraron estados atrapados para redes con geometría de red hexagonal, tanto con una frontera en forma de rombo y como en forma de rectángulo. También se ha propuesto un modelo para ver cómo surgen dichos estados atrapados. Al construir los diferentes tipos de redes que se han mostrado anteriormente y al determinar los eigensistemas correspondientes se utilizaron unidades arbitrarias de energía y de distancia. En este capítulo se espera encontrar estados atrapados para redes con los parámetros del grafeno real, es decir, utilizando las escalas de energía y distancias interatómicas medidas en el grafeno. Para esto, se debe investigar las dimensiones del grafeno y las energías de interacción cuando se utiliza el modelo de amarre fuerte. Teniendo los valores de las energías de interacción se pueden determinar de la ecuación (2.17) los valores numéricos (junto con sus respectivas unidades) de la amplitud A y el factor de decaimiento γ . Recordando dicha ecuación,

$$H_{ij} = A e^{-\gamma d_{ij}},$$

la cual describe la energía de interacción entre el i -ésimo y j -ésimo átomo de la red, en donde H_{ij} es el elemento ij del Hamiltoniano \hat{H} que se construyó en los programas, y d_{ij} es la distancia entre el i -ésimo y j -ésimo átomo.

Lo primero que se debe encontrar son las dimensiones del grafeno. A continuación se muestra una imagen de una red hexagonal de grafeno.

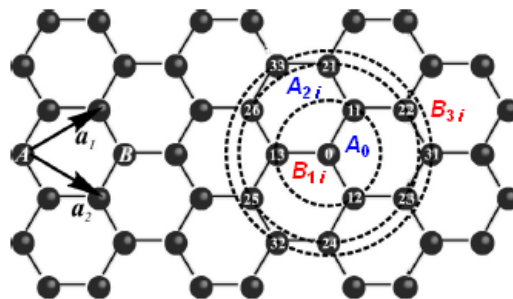


Figura 5.1: Una red hexagonal de grafeno. a_1 y a_2 son los vectores de la celda unitaria del grafeno, con una constante de red $a = 2.461\text{\AA}$. La celda unitaria contiene dos átomos de carbono A y B , los cuales pertenecen a las dos subredes. Un átomo A_0 tiene tres primeros vecinos B_{1i} , seis segundos vecinos A_{2i} , y tres terceros vecinos B_{3i} . Figura adaptada de la referencia [18].

Ahora que se conoce el valor de la constante de red del grafeno (2.461 Å) se puede determinar la longitud de un lado de un hexágono de grafeno con base en lo que muestra la Figura 4.14 en la página 49 del capítulo anterior. Al saber el valor de dicha longitud, fácilmente se puede calcular la longitud de la apotema, la cual se necesita para ingresar dicho valor en los programas que se han construido y así construir redes con las dimensiones reales del grafeno.

Regresando a la ecuación (4.19) la cual relaciona la distancia L (que es la constante de red) y el lado de un hexágono de grafeno l ,

$$\frac{\sin \alpha}{L} = \frac{\sin \beta}{l},$$

y despejando l , sabiendo que $\alpha = 120^\circ$ y $\beta = 30^\circ$, se tiene que

$$l = \frac{\sin \beta}{\sin \alpha} L = \frac{\sin 30^\circ}{\sin 120^\circ} (2.461 \text{ \AA}) = 1.42086 \text{ \AA}. \quad (5.1)$$

Con el valor de un lado de un hexágono de grafeno se puede determinar la longitud de la apotema a . Mediante el teorema de Pitágoras y como se ha descrito en el capítulo pasado, se sabe que

$$l = \frac{2}{\sqrt{3}} a,$$

despejando para la apotema a y sustituyendo el valor de la longitud l de la ecuación (5.1) se llega a

$$a = \frac{\sqrt{3}}{2} l = \frac{\sqrt{3}}{2} (1.42086 \text{ \AA}) = 1.2305 \text{ \AA}. \quad (5.2)$$

El valor de la apotema de 1.2305 Å es lo que se va ingresar como entrada en los programas Deformación de una red de grafeno en 2D.nb y Deformación de una red cuadrada de grafeno.nb, cuyos códigos se encuentran en el Apéndice A. Se van a construir redes de grafeno con fronteras en forma de rombos y rectángulos de diferente tamaño para después determinar sus respectivos eigenvectores y buscar los estados atrapados que se quieren estudiar.

Los parámetros que se determinaron fueron la amplitud A y el factor de decaimiento γ . En el artículo citado en la referencia [18], los autores determinan las energías de interacción a primeros, segundos, y terceros vecinos del grafeno utilizando la aproximación del modelo de amarre fuerte. En la tabla a continuación se reproducen los valores reportados en el artículo anteriormente mencionado.

Distancia entre los átomos de carbono	Símbolo	Energía de interacción (eV)
Primeros vecinos	γ_0	-2.70
Segundos vecinos	γ_1	-0.68
Terceros vecinos	γ_2	-0.30

Tabla 5.1: Energías de interacción a diferentes distancias entre los átomos de carbono para una red hexagonal de grafeno utilizando el modelo de amarre fuerte. Datos obtenidos de la referencia [18].

Desde el principio de este presente trabajo se ha propuesto la ecuación (2.17) como la energía de interacción para el modelo de amarre fuerte. Tomando el lado derecho de dicha ecuación e igualándolo a cada energía de interacción presentada en la Tabla 5.1, y cambiando la distancia d_{ij} por la distancia correspondiente señalada en la misma Tabla 5.1, se tienen las siguientes tres ecuaciones.

$$A e^{-\gamma l} = \gamma_0. \quad (5.3)$$

$$A e^{-\gamma L} = \gamma_1. \quad (5.4)$$

$$A e^{-2\gamma l} = \gamma_2. \quad (5.5)$$

Como la energía de interacción tiene unidades de eV, entonces la amplitud A también tiene unidades de eV. Debido a que el argumento de la exponencial debe ser adimensional, entonces el factor de decaimiento γ tiene unidades de \AA^{-1} porque la distancia tiene unidades de \AA . Ahora que se sabe las unidades de los parámetros lo que falta es determinar su valor. Se tiene un sistema de tres ecuaciones ((5.3), (5.4), y (5.5)) y dos incógnitas A y γ . En principio es sencillo resolver este sistema de ecuaciones para los dos incógnitas, pero se resolvió de otra manera. Se hizo un programa en Wolfram Mathematica 11 en donde se utilizó la función FindFit para determinar los valores numéricos de los parámetros A y γ dada la expresión $A e^{-\gamma x}$ que mejor se ajusta a las coordenadas (l, γ_0) , (L, γ_1) , y $(2l, \gamma_2)$ como función de la variable x . Ya con sus unidades correspondientes añadidas, dicha función dio como resultados

$$A = -19.9197 \text{ eV}, \quad (5.6)$$

y

$$\gamma = 1.40565 \text{ \AA}^{-1}. \quad (5.7)$$

A continuación se muestra una imagen de la gráfica del ajuste junto con las coordenadas anteriormente mencionadas y posteriormente una tabla en donde se muestra la comparación entre las energías de interacción reportadas en [18] y las resultantes debido al ajuste.

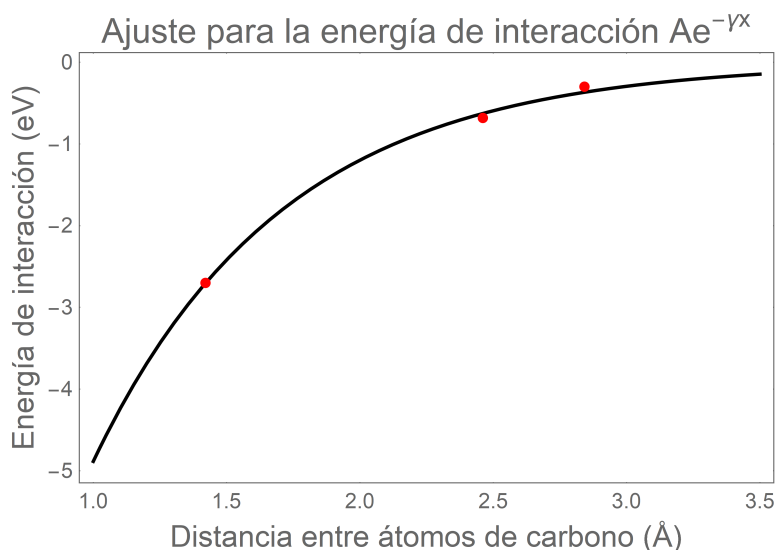


Figura 5.2: Gráfica de la expresión para la energía de interacción utilizando el modelo de amarre fuerte que mejor se ajusta a las coordenadas (l, γ_0) , (L, γ_1) y $(2l, \gamma_2)$, como función de la variable x . Los valores de los parámetros ajustados son $A = -19.9197$ y $\gamma = 1.40565$.

Energía de interacción	Reportados en [18] (eV)	Debido al ajuste (eV)	Error Absoluto (eV)
γ_0	-2.70	-2.70332	3.32167×10^{-3}
γ_1	-0.68	-0.62651	5.34899×10^{-2}
γ_2	-0.30	-0.36687	6.68696×10^{-2}

Tabla 5.2: Comparación de energías de interacción utilizando el modelo de amarre fuerte para una red hexagonal de grafeno entre los datos reportados en [18] y debido al ajuste a la función $Ae^{-\gamma x}$, junto con sus respectivos errores absolutos.

Observando la Figura 5.2 y los datos de la Tabla 5.2, se concluye que la curva ajustada $-19.9197e^{-1.42086x}$ debido a la función FindFit de Wolfram Mathematica no pasa exactamente por las energías de interacción γ_0 , γ_1 , y γ_2 , pero sí se acercan bastante a ellas porque los errores relativos son pequeños. Se puede concluir que los parámetros A y γ , dados por las ecuaciones (5.6) y (5.7) respectivamente, son una buena aproximación. Estos valores de A y γ calculados son los que se van a introducir en el programa para construir el Hamiltoniano \hat{H} .

Los parámetros que se han determinado hasta ahora son los siguientes: la apotema $a = 1.2305 \text{ \AA}$, la amplitud $A = -19.9197 \text{ eV}$, y el factor de decaimiento $\gamma = 1.40565 \text{ \AA}^{-1}$. El último parámetro que falta determinar antes de empezar a correr los programas para construir redes de grafeno y calcular sus respectivos eigenvectores es la deformación adecuada en el eje x cuya representación es δx .

Para poder determinar el valor de δx es necesario hacer una estimación relacionada a la energía de interacción a primeros vecinos γ_0 . Del modelo de amarre fuerte para dos cadenas acopladas de grafeno, se recuerda que los eigenvalores del sistema eran

$$E_{\pm} = E_0 \pm \delta. \quad (5.8)$$

Esto se deduce a partir de la ecuación (4.18) en la página 48 del capítulo anterior. El histograma de la distribución de eigenvalores para una red rectangular de grafeno utilizando el modelo de amarre fuerte con interacción a primeros vecinos se ilustra a continuación.

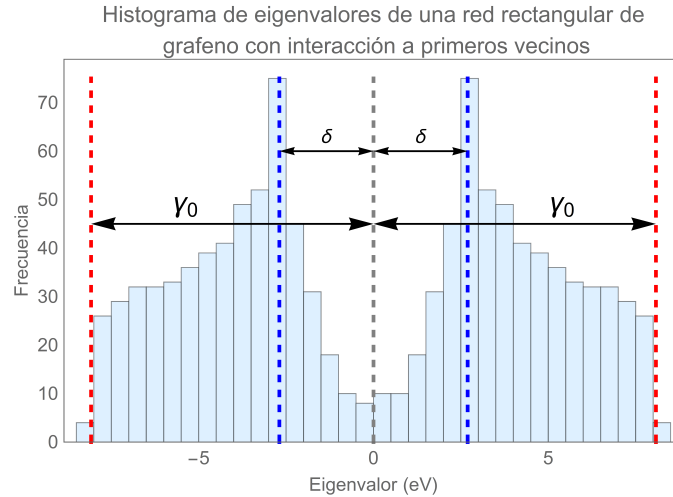


Figura 5.3: Histograma de los eigenvalores para una red rectangular de grafeno con $k = 1122$ átomos utilizando el modelo de amarre fuerte con interacción a primeros vecinos. Los parámetros en el código para la construcción de la red de grafeno correspondiente y el cálculo de los eigenvalores son los siguientes: $a = 1.2305$, $n = m = 17$, $r = l$, $A = -19.9197$, $\gamma = 1.40565$, $x_0 = 0$, $y_0 = 0$, $\delta x = 0$, y $\delta y = 0$. Las líneas punteadas rojas representan un eigenvalor $E_{\pm} = \pm\gamma_0$ mientras que las líneas punteadas azules representan los eigenvalores de los estados atrapados ubicados en $E_{\pm} = \pm\delta$. En este caso, de la ecuación (5.8) se hace $E_0 = 0$ porque así se construyó el Hamiltoniano \hat{H} desde un principio.

Es conocido que el ancho del histograma de la distribución de eigenvalores para una red de grafeno con interacción a primeros vecinos utilizando el modelo de amarre fuerte es dos veces la energía de interacción a primeros vecinos, es decir, $2\gamma_0$. Se puede notar que la Figura 5.3 es muy parecida a la Figura 4.19 en la página 53 la cual es de un histograma de los eigenvalores de dos redes asimétricas (actuando como una sola red porque aún no hay separación entre ellas) con geometría hexagonal con interacción a primeros vecinos. En la Figura 4.19 las líneas punteadas negras representan los eigenvalores de los estados atrapados y estos tienen el mismo valor pero son de signo contrario. Si hay estados atrapados para la red deformada de grafeno, entonces se estima que deben aparecer alrededor de $E_{\pm} = \pm 0.33\gamma_0$ como se muestra en la Figura 5.3 mediante las dos líneas punteadas azules, en otras palabras, a un tercio de la energía de interacción a primeros vecinos. De esto se puede decir que la razón entre el eigenvalor de los estados atrapados δ y la energía de interacción a primeros vecinos γ_0 debe ser 0.33

$$\frac{\delta}{\gamma_0} = 0.33. \quad (5.9)$$

En el modelo de amarre fuerte la energía de interacción se propuso de acuerdo a la ecuación (2.17). Para δ , esta energía de interacción tiene la forma de

$$\delta = A e^{-\gamma d}, \quad (5.10)$$

en donde d es la distancia de interacción entre cualquiera dos átomos de carbono dentro de la red de grafeno. Para γ_0 , la energía de interacción tiene la forma de

$$\gamma_0 = A e^{-\gamma l}, \quad (5.11)$$

en donde ahora la distancia de interacción es l debido a que se están considerando interacciones a primeros vecinos. Sustituyendo las ecuaciones (5.10) y (5.11) en la ecuación (5.9) se tiene que

$$\frac{A e^{-\gamma d}}{A e^{-\gamma l}} = 0.33. \quad (5.12)$$

Despejando la distancia d se llega al siguiente resultado

$$d = -\frac{\ln(0.33)}{\gamma} + l. \quad (5.13)$$

Sustituyendo los valores del factor de decaimiento γ y la longitud a primeros vecinos l en la ecuación (5.13) se tiene que

$$d = -\frac{\ln(0.33)}{1.40565 \text{ \AA}^{-1}} + 1.42086 \text{ \AA} = 2.20958 \text{ \AA}. \quad (5.14)$$

En el Capítulo 3, la deformación simétrica respecto a un punto fijo (ecuación (3.1)) en la dirección x se propuso como

$$x'_i = x_i + \delta x(x_i - x_0),$$

en donde x'_i es la coordenada en x del átomo después de la aplicar la deformación, x_i es la coordenada en x original, δx es la deformación en x y x_0 es la coordenada en x del punto fijo.

Se quiere construir dos tipos de fronteras para las redes de grafeno (cada tipo con tres tamaños diferente como se ha visto en capítulos anteriores). Una red de grafeno tendrá una frontera rectangular mientras que la otra red tendrá una frontera en forma de rombo así como se muestra en la Figura 2.5 en la página 10. Ya con estas redes construidas se va a determinar los eigenvectores correspondientes para posteriormente buscar

los estados atrapados. Analicemos la energía de interacción a terceros y cuartos vecinos. Comparando las energías de interacción correspondientes a terceros y primeros vecinos,

$$\frac{\gamma_2}{\gamma_0} = \frac{A e^{-2\gamma l}}{A e^{-\gamma l}} = e^{-\gamma l} = e^{-(1.40565 \text{ \AA}^{-1})(1.42086 \text{ \AA})} = 0.13572 \rightarrow \gamma_2 = 0.13571\gamma_0.$$

Comparando las energías de interacción correspondientes a cuartos y primeros vecinos,

$$\frac{\gamma_3}{\gamma_0} = \frac{A e^{-3\gamma l}}{A e^{-\gamma l}} = e^{-2\gamma l} = e^{-2(1.40565 \text{ \AA}^{-1})(1.42086 \text{ \AA})} = 0.0184173 \rightarrow \gamma_3 = 0.0184173\gamma_0.$$

Observando las anteriores comparaciones, se nota que la energía de interacción a terceros vecinos γ_2 es aproximadamente 13.5 % la energía de interacción a primeros vecinos γ_0 , mientras que la energía de interacción a cuartos vecinos γ_3 es aproximadamente 1.8 % la energía de interacción a primeros vecinos. Estas cantidades son muy pequeñas debido al exponencial decreciente de la energía de interacción. Por lo tanto, dado que las energías de interacción a terceros y cuartos vecinos en el grafeno son despreciables frente a la de primeros vecinos, vamos a considerarlas solo en el caso de la frontera rectangular, mientras que en el caso de la frontera en forma de rombo estudiaremos el sistema solo hasta segundos vecinos. Aunque ambas redes de grafeno tienen diferentes fronteras y radios de interacción, se espera que en ambos casos hayan estados atrapados.

Sea x'_1 y x'_2 las posiciones en x de dos átomos de carbono arbitrarios y diferentes después de aplicar la deformación. Estas posiciones están dadas por

$$x'_1 = x_1 + \delta x(x_1 - x_0),$$

y

$$x'_2 = x_2 + \delta x(x_2 - x_0).$$

Después de aplicar la deformación, la separación entre ambos átomos en la dirección x está dada por

$$\begin{aligned} \Delta x'_{21} &= |x'_2 - x'_1| \\ &= |x_2 + \delta x(x_2 - x_0) - x_1 - \delta x(x_1 - x_0)| \\ &= |(x_2 - x_1)(1 + \delta x)| \\ &= |x_2 - x_1||1 + \delta x| \end{aligned}$$

Como la deformación en x se hace alejando los átomos del punto fijo, entonces $\delta x > 0$ y se puede omitir el valor absoluto del término $|1 + \delta x|$ de la ecuación anterior, la cual se reduce a

$$\Delta x'_{21} = |\Delta x_{21}|(1 + \delta x), \quad (5.15)$$

en donde $\Delta x_{21} = |x_2 - x_1|$. Para ver estados atrapados las diferencias en las posiciones en x de cualquiera dos átomos de carbono diferentes tiene que ser menor que la distancia d , esto es

$$\Delta x'_{21} < d. \quad (5.16)$$

Sustituyendo la ecuación (5.15) en (5.16) y despejando para δx se llega a la siguiente desigualdad

$$0 < \delta x < \frac{d}{\Delta x_{21}} - 1. \quad (5.17)$$

Δx_{21} se va a tomar como la mínima distancia en la dirección x entre cualquiera dos diferentes átomos de carbono dentro de una red de grafeno. Esta distancia mínima es la distancia entre las dos filas de una cadena

de grafeno como la que se ilustra en la Figura 4.1 en la página 37. Por la geometría se sabe que dicha distancia es $l/2$, y sustituyendo esta expresión en Δx_{21} en la desigualdad (5.17) se llega a

$$0 < \delta x < \frac{2d}{l} - 1. \quad (5.18)$$

Se sustituyen los valores de d y l en (5.18) para obtener como resultado

$$0 < \delta x < \frac{2(2.0958 \text{ \AA})}{1.42086 \text{ \AA}} - 1,$$

$$0 < \delta x < 2.1102. \quad (5.19)$$

La desigualdad (5.19) restringe el valor que puede tomar δx para observar estados atrapados de acuerdo con el modelo desarrollado en el capítulo anterior. Sabiendo esto, se eligió el siguiente valor numérico

$$\delta x = 1.15. \quad (5.20)$$

Ahora que se encogieron todos los parámetros del grafeno, energía de interacción, y deformación en x , se puede proceder a deformar las diferentes redes y posteriormente determinar sus respectivos eigenvectores para buscar los estados atrapados que deberían aparecer según los criterios que se han propuesto en esta tesis. Como en el Capítulo 3, los programas que se utilizaron para la deformación de diferentes redes y cálculo de sus eigensistemas son Deformación de una red de grafeno en 2D.nb, Deformación de una red cuadrada de grafeno.nb y Eigensistema de una red deformada de grafeno en 2D.nb.

Lo primero que se hizo fue la construcción de dos tipos de fronteras para redes de grafeno: una en forma de rectángulo y la otra en forma de rombo. Cada tipo de red se construyó en tres tamaños diferentes: pequeña, mediana, y grande. Ambos tipos de redes tienen el mismo número de átomos a la largo de la línea vertical ubicada en $x = 0$ de tal manera que se obtiene la red en forma de rombo si se corta en diagonal la red rectangular. En el mismo programa se aplicó la deformación en la dirección x a todos los átomos de acuerdo a la ecuación (3.1). En cada caso todos los parámetros para la construcción de las redes, energías de interacción, y aplicación de la deformación fueron exportados para poder importarlos en el programa Eigensistema de una red deformada de grafeno en 2D.nb. También se exportaron las imágenes de las redes antes y después de aplicar la deformación. A continuación en la siguiente página se muestran los dos tipos de redes medianas antes y después de aplicar la deformación.

Las redes pequeñas y grandes de los dos tipos de redes de grafeno son parecidas a las gráficas que muestran en la Figura 5.4, pero obviamente de diferente tamaño. El número de átomos de carbono para la red rectangular pequeña y grande son $k = 462$ y $k = 1722$, respectivamente, mientras que para la red de rombo pequeña y grande son $k = 242$ y $k = 882$, respectivamente.

Como ya se había dicho antes, al construir y deformar cada tipo de red de grafeno, los parámetros utilizados en el código son exportados y importados al programa Eigensistema de una red deformada de grafeno en 2D.nb. En el Capítulo 3 ya se explicó cómo funciona este programa. Para los dos tipos de redes de grafeno se buscaron los posibles estados atrapados que permanecieran en las gráficas de los eigenvectores al crecer la red. Los eigenvalores correspondientes a esas tres gráficas tiene que ser alrededor del mismo orden como se vio en los resultados del Capítulo 3.

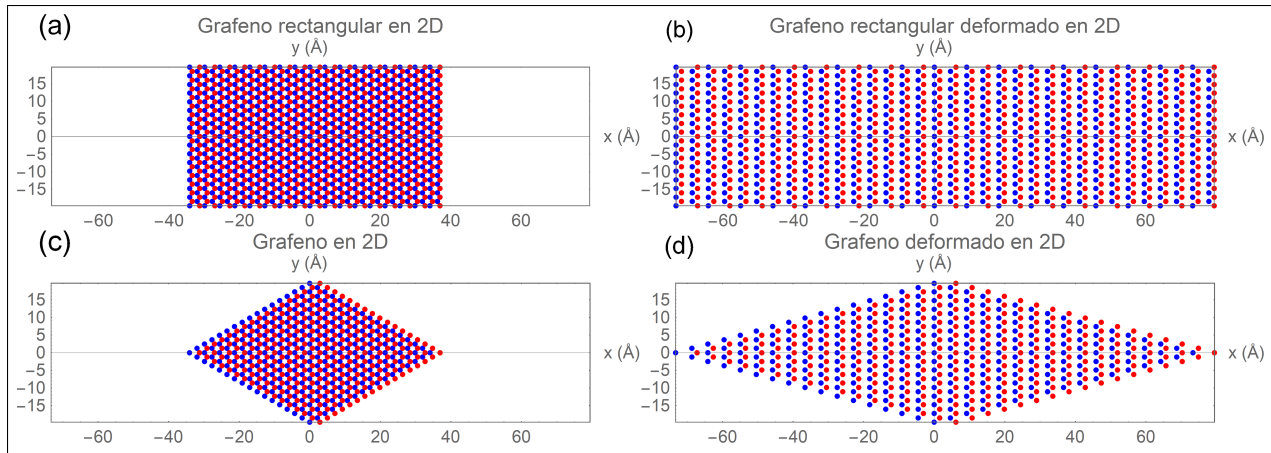


Figura 5.4: Red mediana y rectangular de grafeno con su estructura (a) no deformada y (b) deformada. A estas dos gráficas le corresponden los siguientes valores en el código: $a = 1.2305$, $n = m = 17$, $k = 1122$, $A = -19.9197$, y $\gamma = 1.40565$. Red de grafeno mediana y en forma de rombo con su estructura (c) no deformada y (d) deformada. A estas dos gráficas le corresponden los siguientes valores en el código: $a = 1.2305$, $n = m = 8$, $k = 578$, $A = -19.9197$, y $\gamma = 1.40565$. Los parámetros de deformación para las gráficas del inciso (b) y (d) son: $x_0 = 0$, $y_0 = 0$, $\delta x = 1.15$, y $\delta y = 0$.

Después de revisar todas las figuras de los eigenvectores para los tres tamaños diferentes y las dos fronteras, se encontraron varios candidatos para estados atrapados. Se encontraron más candidatos para la red rectangular que para la red en forma de rombo. Se tuvo que filtrar estos estados atrapados de la red rectangular para quedarse con los definitivos, y esto se hizo rompiendo la simetría de la red mediana de $k = 1122$ átomos. Para romper la simetría de la red, en el primer caso se eliminó la fila inferior de átomos, y en el segundo caso se eliminaron las últimas dos columnas. Después de esto para los dos nuevas redes (ambas ahora con menos átomos) se aplicó la misma deformación que describe este actual capítulo y posteriormente se determinaron los eigensistemas para buscar que los posibles estados atrapados anteriormente identificados permanecieran en estas nuevas redes asimétricas, además de también buscar que los eigenvalores correspondientes sean aproximadamente iguales a los originales. Se descartaron los candidatos cuyos estados atrapados no permanecieran en las gráficas de los eigenvectores al romper la simetría horizontal y verticalmente. Los demás candidatos sí cumplieron los requisitos de romper la simetrías verticalmente, es decir, los estados atrapados eran muy similares a los originales (en las mismas posiciones pero con un ligero cambio en la magnitud de los eigenvectores, o en otras palabras, la intensidad de los colores de los puntos) y los eigenvalores eran muy cercanos entre sí. A continuación a partir de la siguiente página se muestran los resultados de los estados atrapados que permanecen en las tres redes de diferente tamaño para las ambos tipos de redes de grafeno construidas.

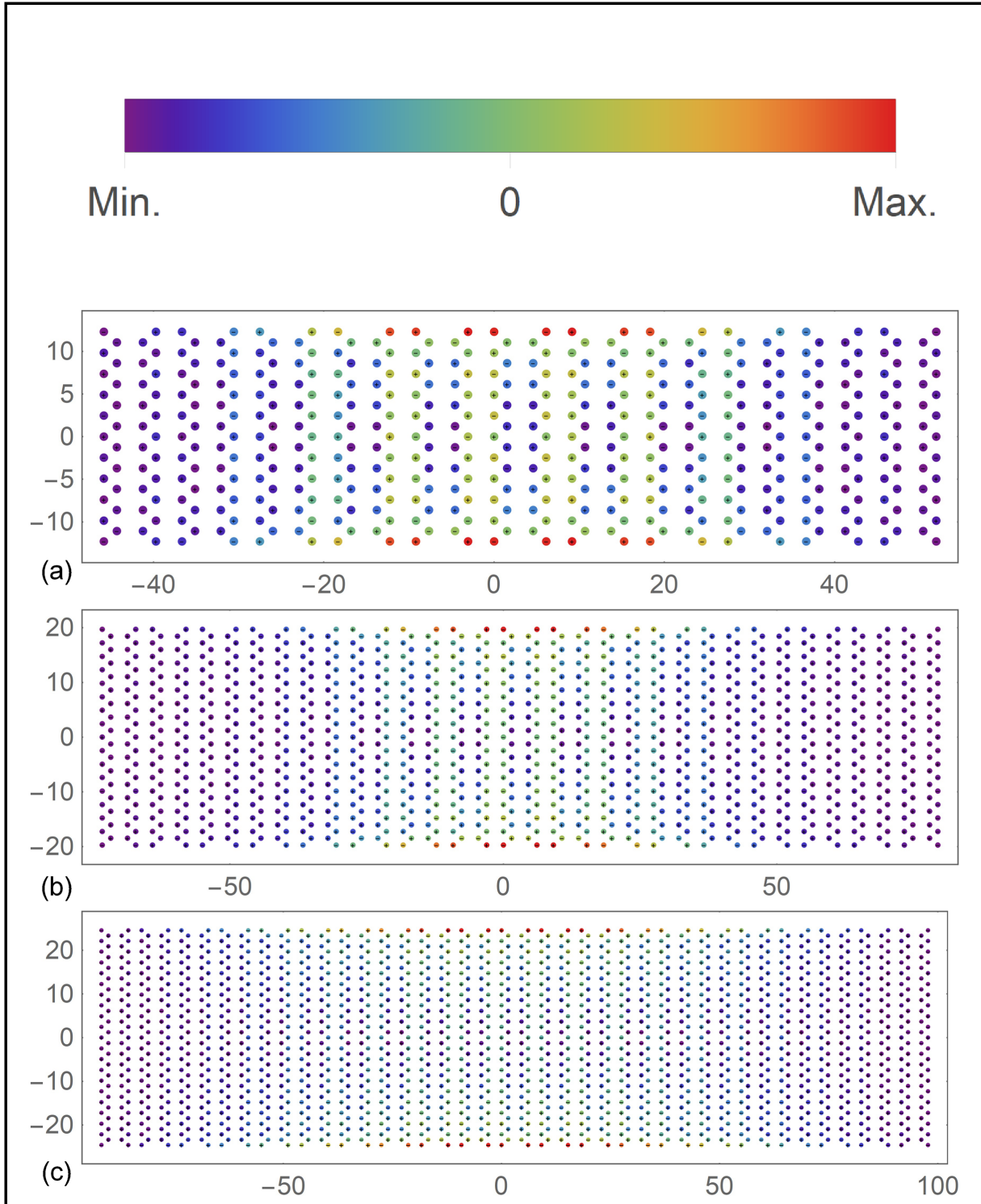


Figura 5.5: A estas tres gráficas de eigenvectores con interacción a cuartos vecinos para (a) eigenvalor 1.22658 eV y con 462 átomos, (b) eigenvalor 1.25972 eV y con 1122 átomos, y (c) eigenvalor 1.2705 eV y con 1722 átomos, le corresponden los siguientes parámetros en el código: $a = 1.2305$, $r = 3l$, $\gamma = 1.40565$, $A = -19.9197$, $x_0 = 0$, $y_0 = 0$, $\delta x = 1.15$, y $\delta y = 0$. Las unidades en ambos ejes son de Å .

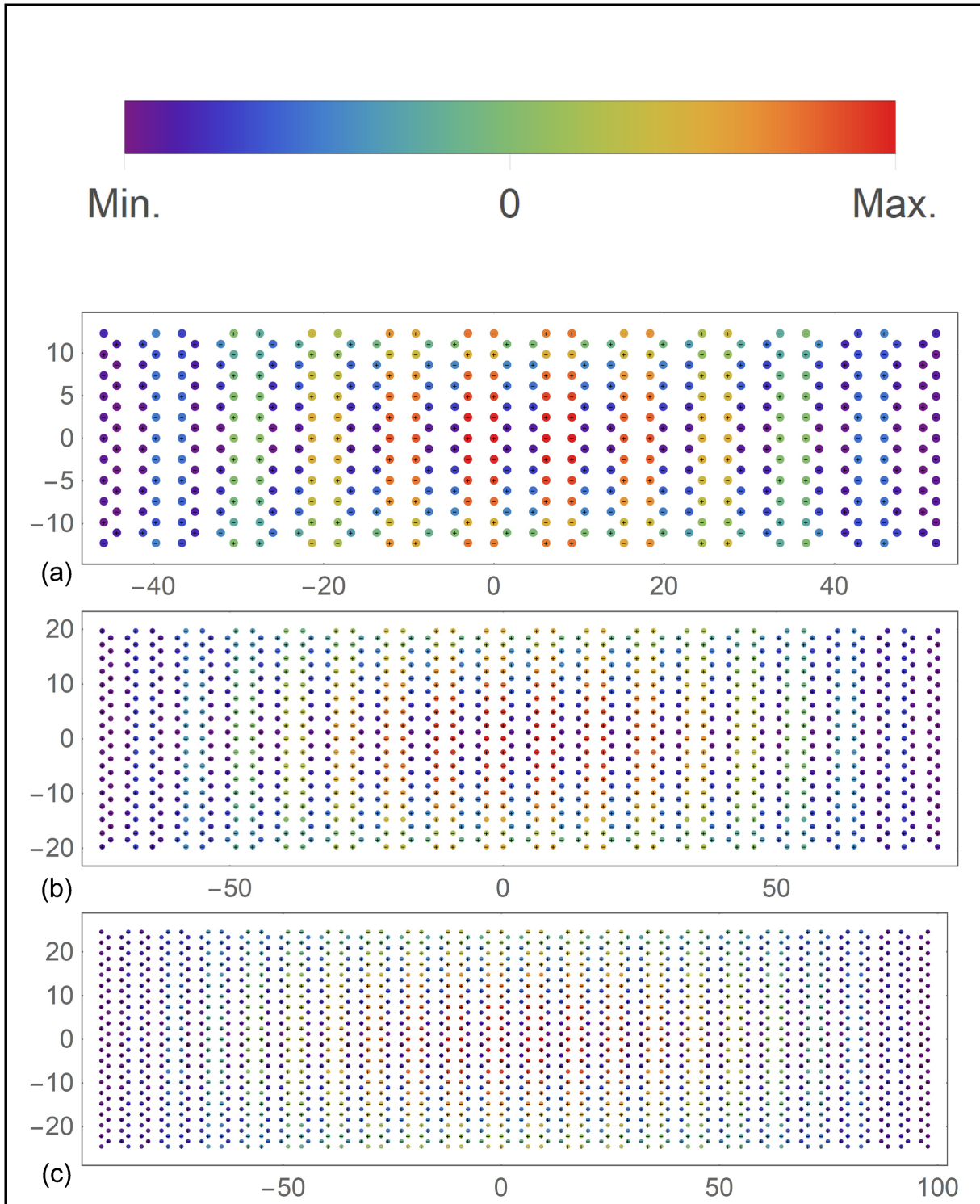


Figura 5.6: A estas tres gráficas de eigenvectores con interacción a cuartos vecinos para (a) eigenvalor 1.02479 eV y con 462 átomos, (b) eigenvalor 1.07374 eV y con 1122 átomos, y (c) eigenvalor 1.09032 eV y con 1722 átomos, le corresponden los siguientes parámetros en el código: $a = 1.2305$, $r = 3l$, $\gamma = 1.40565$, $A = -19.9197$, $x_0 = 0$, $y_0 = 0$, $\delta x = 1.15$, y $\delta y = 0$. Las unidades en ambos ejes son de Å.

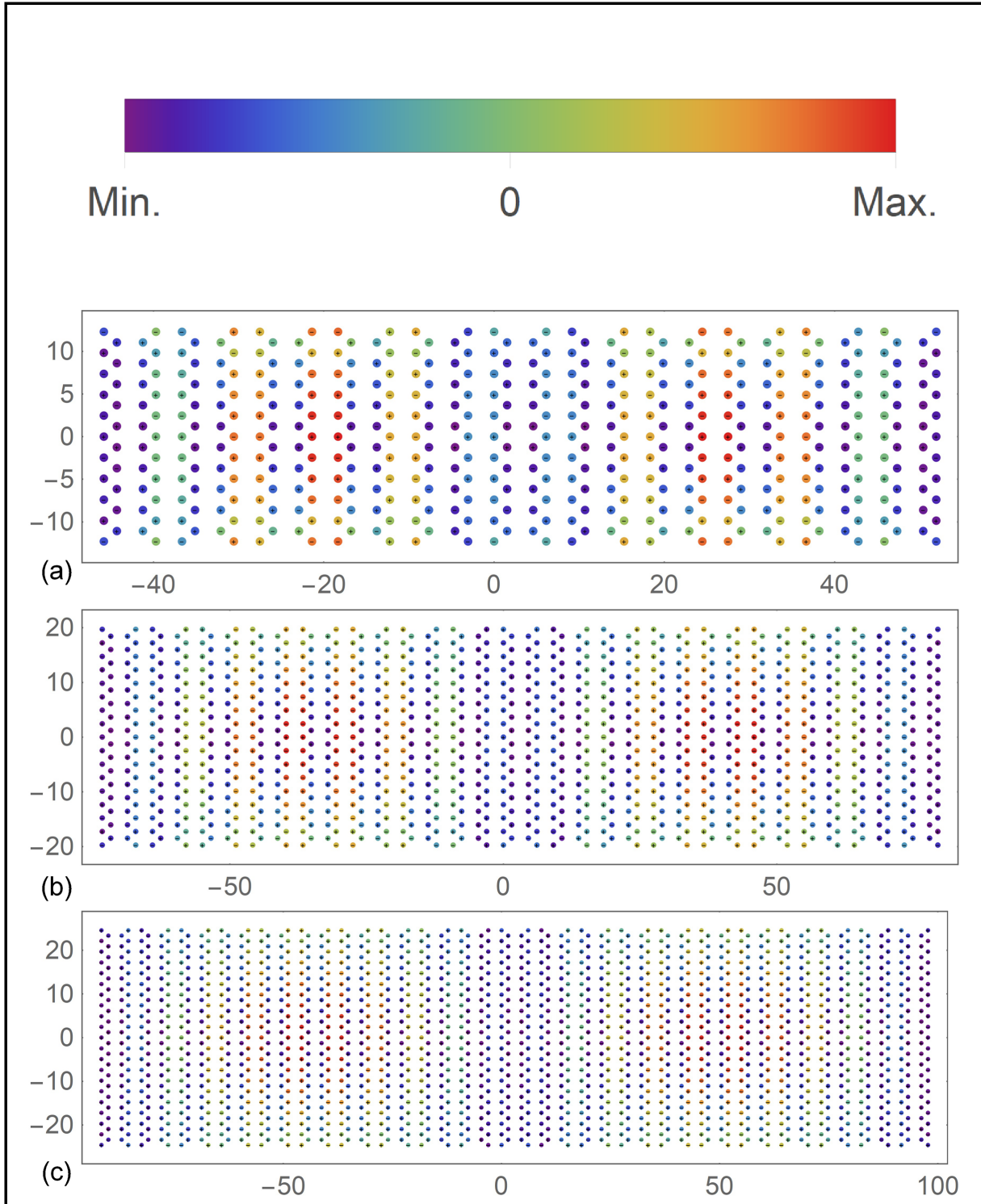


Figura 5.7: A estas tres gráficas de eigenvectores con interacción a cuartos vecinos para (a) eigenvalor 1.02227 eV y con 462 átomos, (b) eigenvalor 1.07287 eV y con 1122 átomos, y (c) eigenvalor 1.08983 eV y con 1722 átomos, le corresponden los siguientes parámetros en el código: $a = 1.2305$, $r = 3l$, $\gamma = 1.40565$, $A = -19.9197$, $x_0 = 0$, $y_0 = 0$, $\delta x = 1.15$, y $\delta y = 0$. Las unidades en ambos ejes son de Å.

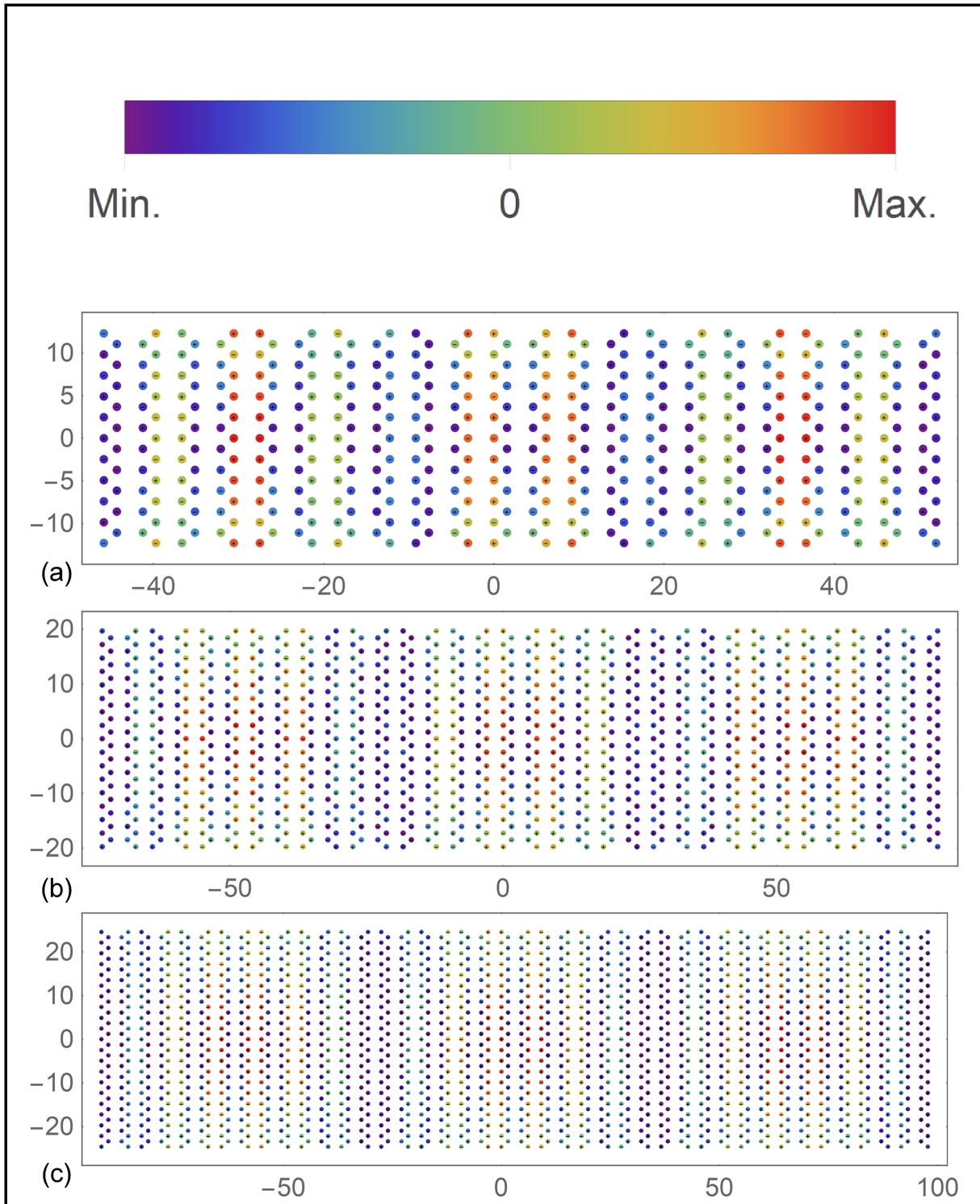


Figura 5.8: A estas tres gráficas de eigenvectores con interacción a cuartos vecinos para (a) eigenvalor 1.01819 eV y con 462 átomos, (b) eigenvalor 1.07144 eV y con 1122 átomos, y (c) eigenvalor 1.08903 eV y con 1722 átomos, le corresponden los siguientes parámetros en el código: $a = 1.2305$, $r = 3l$, $\gamma = 1.40565$, $A = -19.9197$, $x_0 = 0$, $y_0 = 0$, $\delta x = 1.15$, y $\delta y = 0$. Las unidades en ambos ejes son de Å.

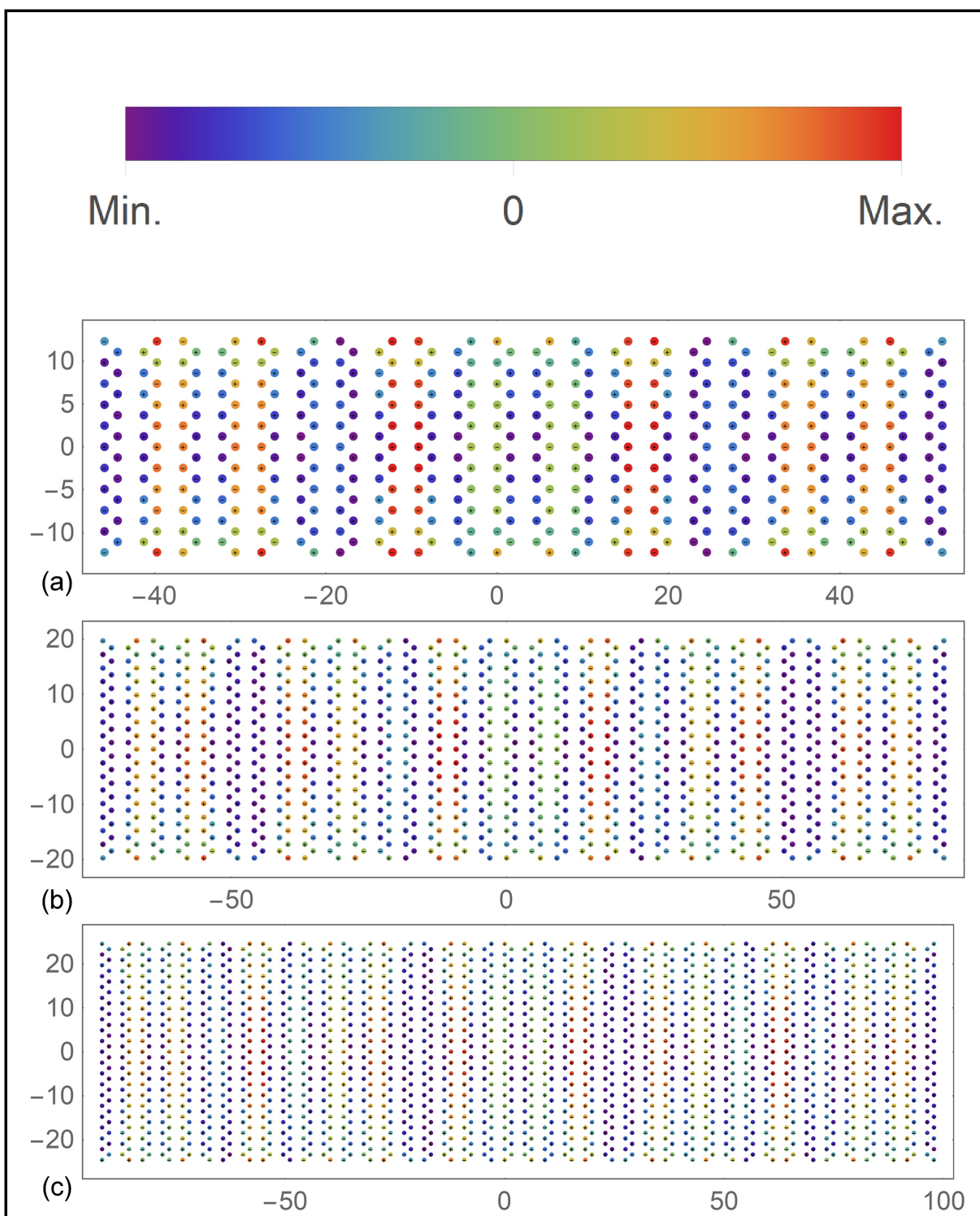


Figura 5.9 A estas tres gráficas de eigenvectores con interacción a cuartos vecinos para (a) eigenvalor 1.01275 eV y con 462 átomos, (b) eigenvalor 1.06383 eV y con 1122 átomos, y (c) eigenvalor 1.08012 eV y con 1722 átomos, le corresponden los siguientes parámetros en el código: $a = 1.2305$, $r = 3l$, $\gamma = 1.40565$, $A = -19.9197$, $x_0 = 0$, $y_0 = 0$, $\delta x = 1.15$, y $\delta y = 0$. Las unidades en ambos ejes son de Å.

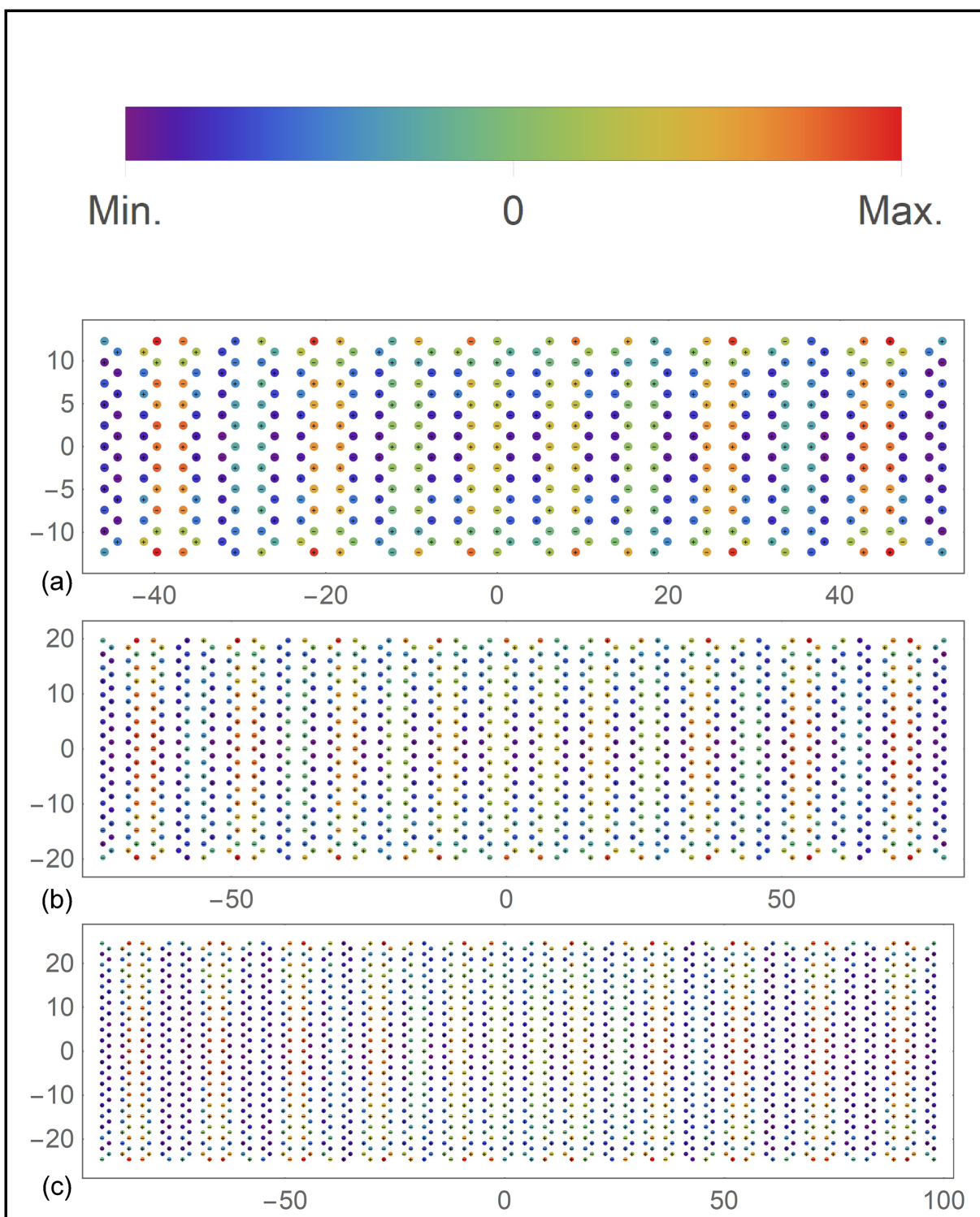


Figura 5.10: A estas tres gráficas de eigenvectores con interacción a cuartos vecinos para (a) eigenvalor 1.00621 eV y con 462 átomos, (b) eigenvalor 1.05619 eV y con 1122 átomos, y (c) eigenvalor 1.07073 eV y con 1722 átomos, le corresponden los siguientes parámetros en el código: $a = 1.2305$, $r = 3l$, $\gamma = 1.40565$, $A = -19.9197$, $x_0 = 0$, $y_0 = 0$, $\delta x = 1.15$, y $\delta y = 0$. Las unidades en ambos ejes son de Å .

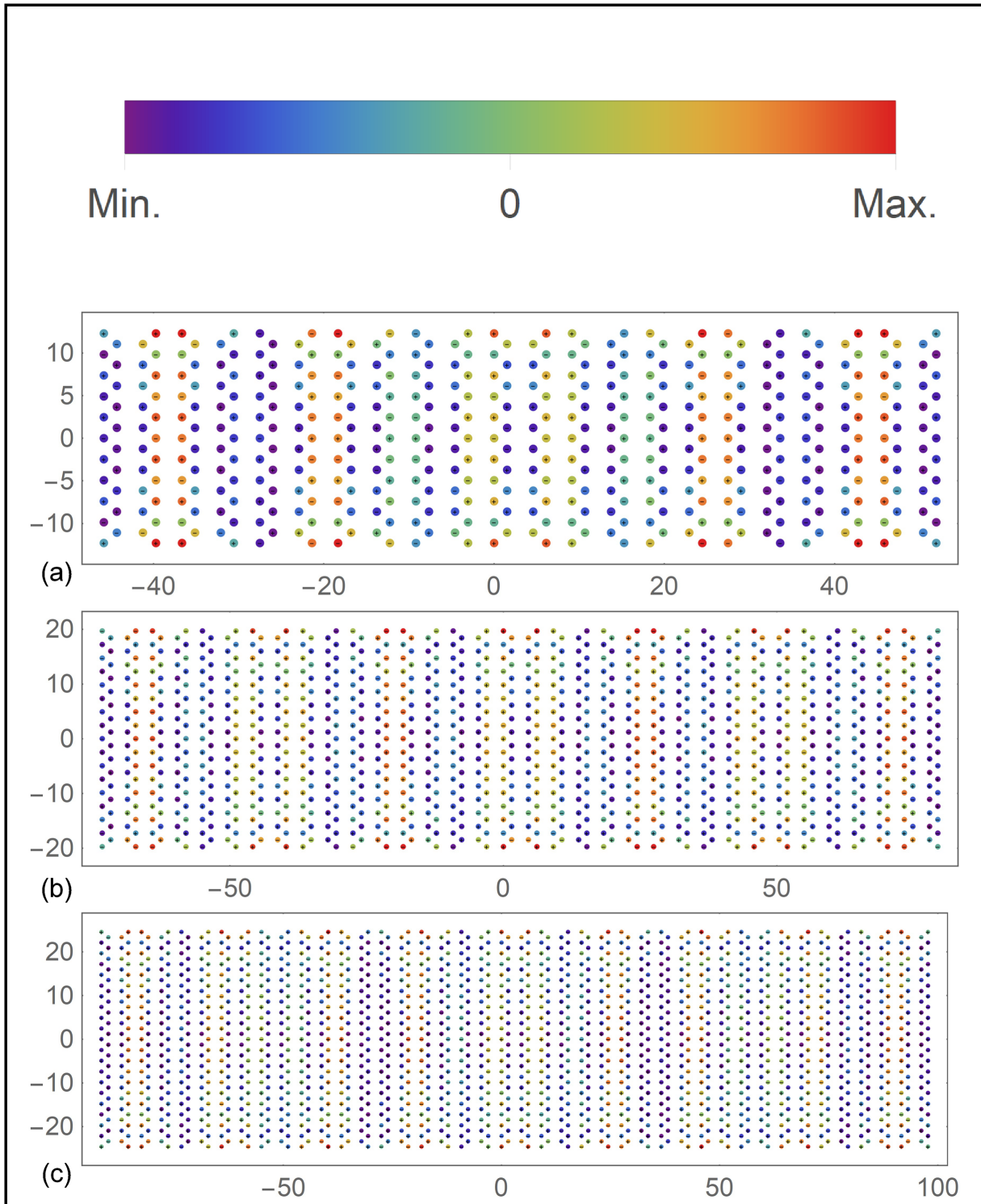


Figura 5.11: A estas tres gráficas de eigenvectores con interacción a cuartos vecinos para (a) eigenvalor 0.998916 eV y con 462 átomos, (b) eigenvalor 1.04666 eV y con 1122 átomos, y (c) eigenvalor 1.06677 eV y con 1722 átomos, le corresponden los siguientes parámetros en el código: $a = 1.2305$, $r = 3l$, $\gamma = 1.40565$, $A = -19.9197$, $x_0 = 0$, $y_0 = 0$, $\delta x = 1.15$, y $\delta y = 0$. Las unidades en ambos ejes son de Å .

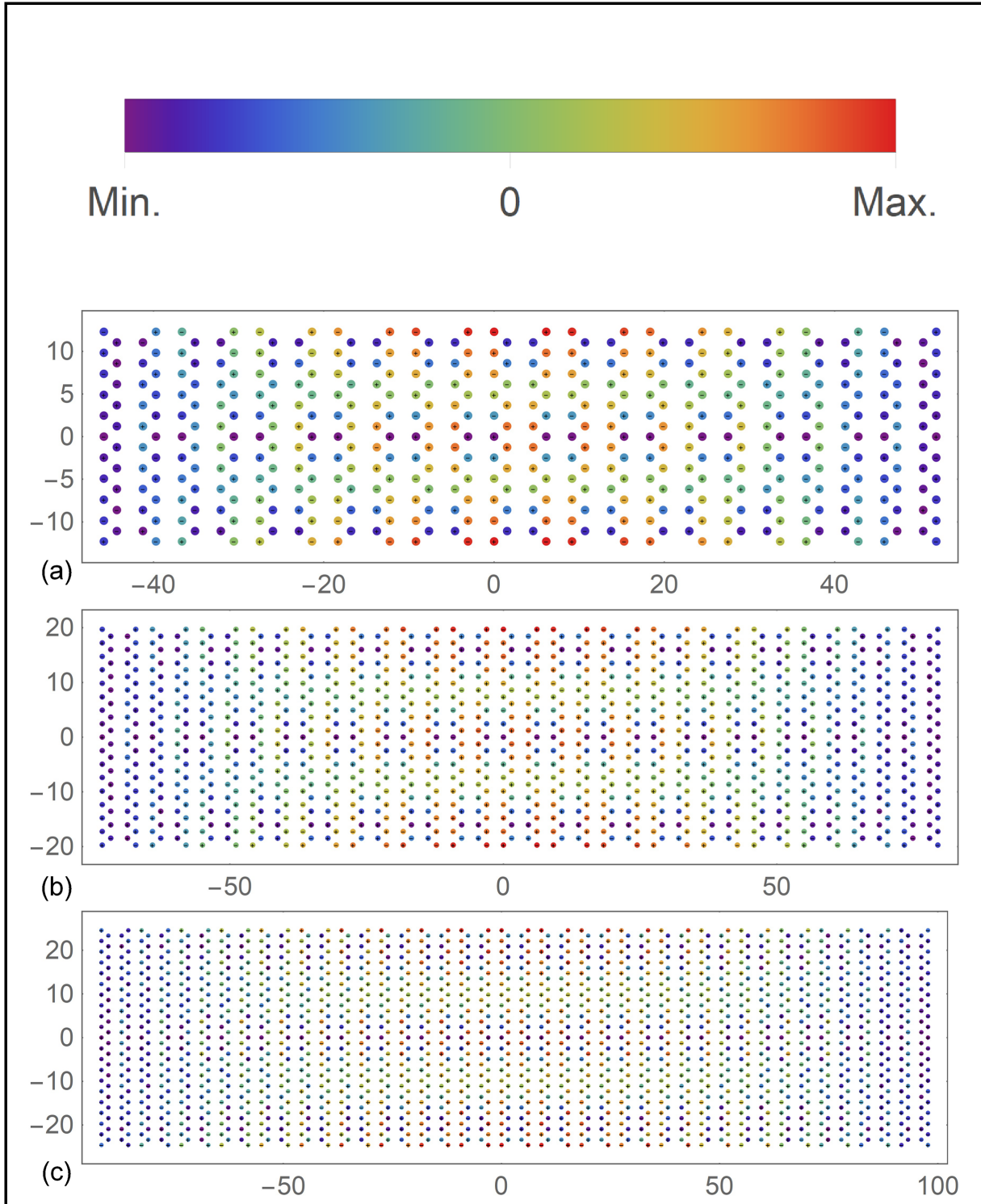


Figura 5.12: A estas tres gráficas de eigenvectores con interacción a cuartos vecinos para (a) eigenvalor 0.905661 eV y con 462 átomos, (b) eigenvalor 1.07956 eV y con 1122 átomos, y (c) eigenvalor 1.23702 eV y con 1722 átomos, le corresponden los siguientes parámetros en el código: $a = 1.2305$, $r = 3l$, $\gamma = 1.40565$, $A = -19.9197$, $x_0 = 0$, $y_0 = 0$, $\delta x = 1.15$, y $\delta y = 0$. Las unidades en ambos ejes son de Å .

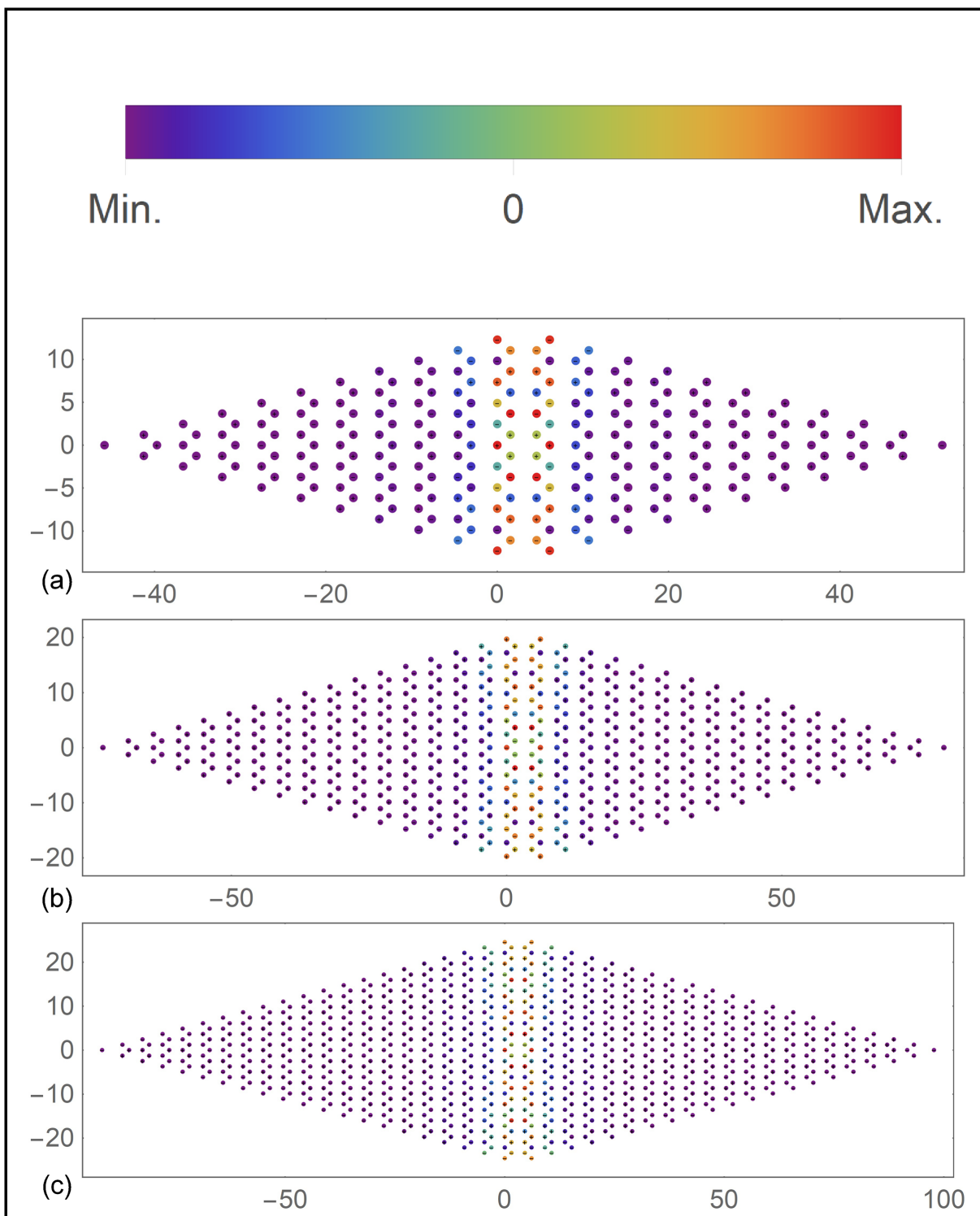


Figura 5.13: A estas tres gráficas de eigenvectores con interacción a segundos vecinos para (a) eigenvalor -1.09309 eV y con 242 átomos, (b) eigenvalor -0.99543 eV y con 578 átomos, y (c) eigenvalor -1.18111 eV y con 882 átomos, le corresponden los siguientes parámetros en el código: $a = 1.2305$, $r = 3.1$, $\gamma = 1.40565$, $A = -19.9197$, $x_0 = 0$, $y_0 = 0$, $\delta x = 1.15$, y $\delta y = 0$. Las unidades en ambos ejes son de Å .

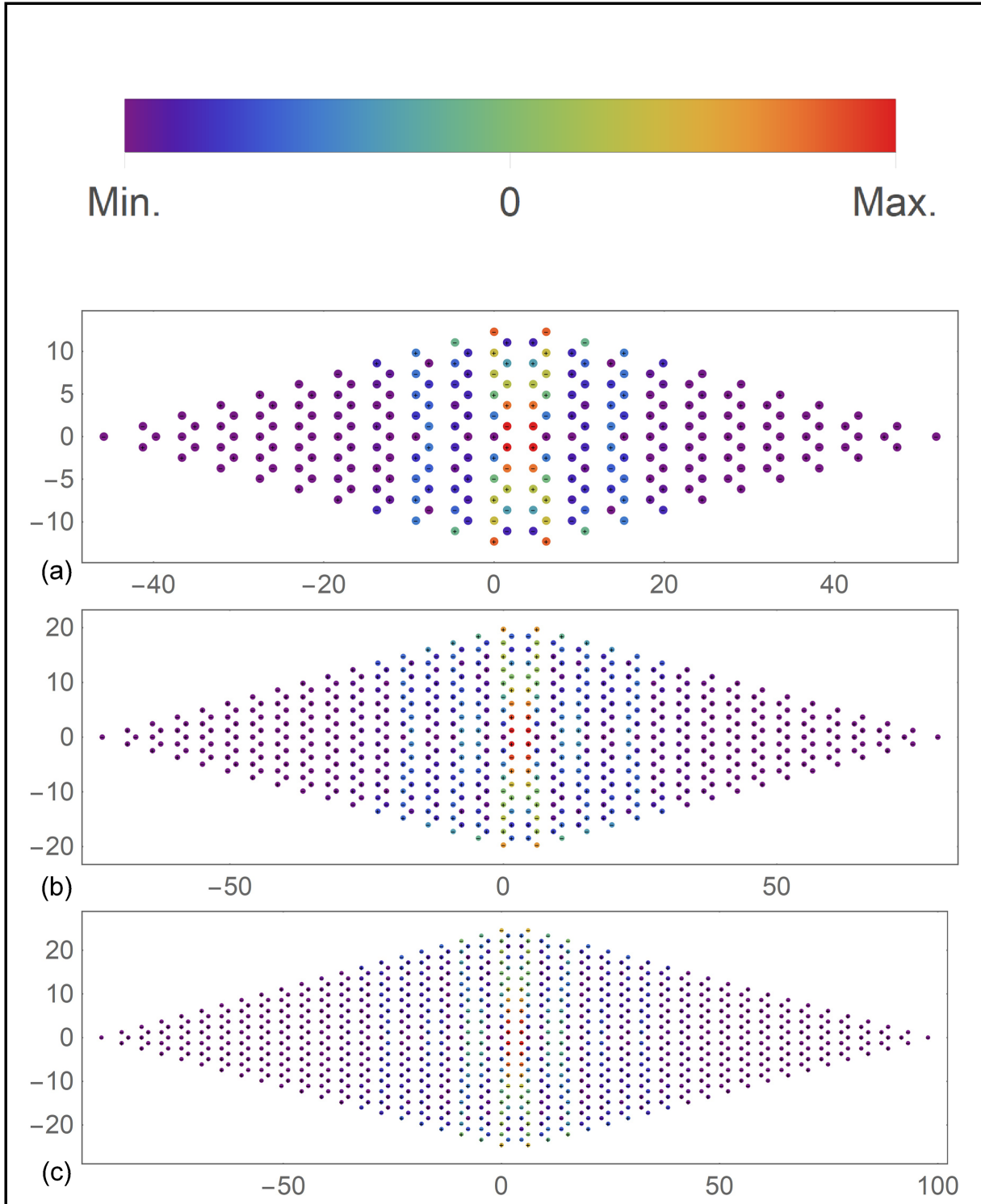


Figura 5.14: A estas tres gráficas de eigenvectores con interacción a segundos vecinos para (a) eigenvalor 0.58372 eV y 242 átomos, (b) eigenvalor 0.770887 eV y con 578 átomos, y (c) eigenvalor 0.831384 eV y con 882 átomos, le corresponden los siguientes parámetros en el código: $a = 1.2305$, $r = 3.1$, $\gamma = 1.40565$, $A = -19.9197$, $x_0 = 0$, $y_0 = 0$, $\delta x = 1.15$, y $\delta y = 0$. Las unidades en ambos ejes son de Å .

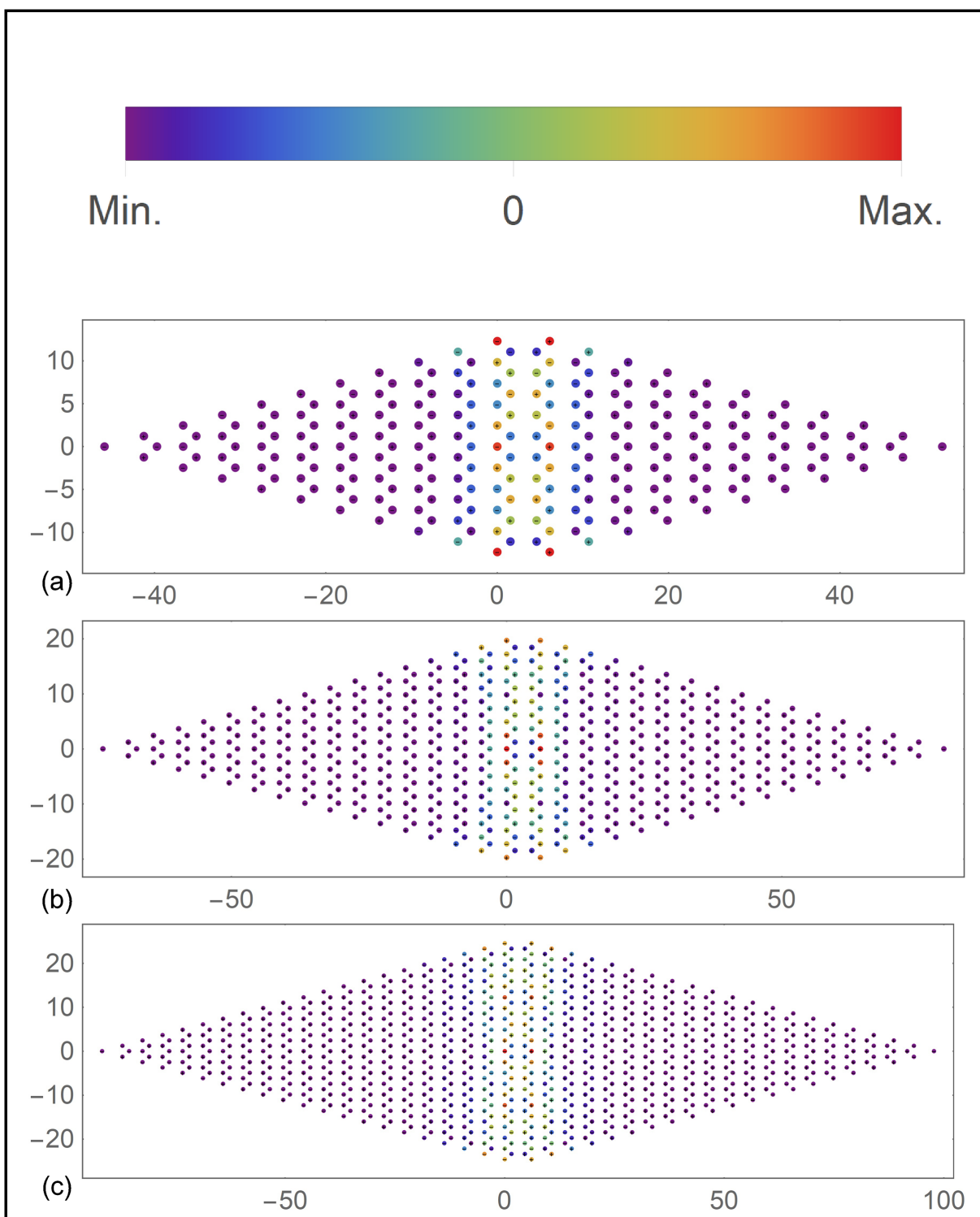


Figura 5.15: A estas tres gráficas de eigenvectores con interacción a segundos vecinos para (a) eigenvalor 0.301632 eV y con 242 átomos, (b) eigenvalor 0.679576 eV y con 578 átomos, y (c) eigenvalor 0.278077 eV y con 882 átomos, le corresponden los siguientes parámetros en el código: $a = 1.2305$, $r = 3.1$, $\gamma = 1.40565$, $A = -19.9197$, $x_0 = 0$, $y_0 = 0$, $\delta x = 1.15$, y $\delta y = 0$. Las unidades en ambos ejes son de Å.

En el Capítulo 3 se encontraron estados atrapados al deformar dos tipos de redes con la geometría del grafeno. Aunque los parámetros introducidos en el código, tales como las dimensiones de la red, amplitud y factor de decaimiento, se tomaron en unidades arbitrarias en ese entonces, aún así se lograron ver estados atrapados en las gráficas de los eigenvectores, entre los diferentes tamaños de red. Teniendo esto en mente, se esperaba ver estados atrapados al deformar unas redes con los parámetros del grafeno y teniendo aproximadamente los valores adecuados para la amplitud y factor de decaimiento de la energía de interacción según los resultados del ajuste de los datos reportados en la referencia [18]. Además, para asegurar ver dichos estados atrapados, se propuso una relación entre los eigenvalores de los estados atrapados $\pm\delta$ y la energía de interacción a primeros vecinos $\pm\gamma_0$ de una red de grafeno, la cual al desarrollarla daba un criterio para elegir un valor adecuado de δx para poder obtener los estados atrapados al aplicar una deformación en x a ambos tipos de redes.

Teniendo ya todos los valores necesarios y con sus respectivas unidades, se corrieron los programas para crear gráficas de los eigenvectores y se buscaron los estados atrapados en los diferentes tipos y tamaños de redes de grafeno creadas. Y, efectivamente, sí se encontraron los estados atrapados justo como se esperaba ya que al crecer la red los estados permanecen y sus respectivos eigenvalores son relativamente similares entre sí. Es claro que los resultados obtenidos en este actual capítulo no iban a ser iguales a los resultados reportados en el Capítulo 3, es decir, las gráficas de los eigenvectores y los valores numéricos de los eigenvalores no son iguales. Sin embargo, los resultados reportados en este actual capítulo se consideran como estados atrapados del grafeno los que están en el bulto de la red en lugar de en las orillas.

En el Capítulo 4 se propuso un modelo teórico que describe cómo surgen los estados atrapados al ir separando dos redes o cadenas de átomos con geometría en base del grafeno. Se vio que dichos estados atrapados podrían ser simétricos o antisimétricos. En este actual capítulo, en donde se trabajaron con redes reales de grafeno, es decir, con las dimensiones interatómicas aceptadas, de diferentes fronteras geométricas, se vio que también surgen dichos estados atrapados. Las Figuras 5.5 y 5.12 presentan estados atrapados antisimétricos, mientras que las Figuras 5.6 al 5.11 y 5.13 al 5.15 presentan los que son simétricos. Los resultados reportados en este capítulo están de acuerdo con el modelo propuesto del Capítulo 4.

Capítulo 6

Conclusiones

En nuestra opinión se cumplió con el objetivo inicial de la tesis que era estudiar y en su caso determinar estados atrapados dentro del bulto en redes tipo grafeno. Dichos estados atrapados se calcularon y graficaron tomando el eigensistema de una red tipo grafeno considerando interacciones desde primeros hasta cuartos vecinos, según el caso particular que se estudió, utilizando el modelo de amarre fuerte. Se construyó un Hamiltoniano \hat{H} que describe las energías de interacción entre todos los posibles pares de átomos en la red. La energía de interacción que se propuso decae exponencialmente conforme aumenta la separación entre los átomos.

A través de Wolfram Mathematica 11, desde cero se construyeron programas para estudiar redes hexagonales (con geometría en base al grafeno) y finitas bajo un modelo de amarre fuerte. Estos programas se verificaron a través del histograma de sus eigenvalores. Para un red aleatoria, resultó un histograma cuya distribución era tipo gaussiana. Para una red hexagonal a primeros vecinos se verificó un histograma simétrico, mientras que con dos o más vecinos se verificó que el histograma era asimétrico. Esto está de acuerdo con lo reportado en la literatura.

Se estableció una metodología y una serie de criterios mínimos para identificar estados atrapados en el bulto de redes hexagonales bajo una deformación.

En esta tesis se encontró evidencia de estados atrapados que pueden cruzar toda la red en una dirección perpendicular a la deformación aplicada. Dichos estados atrapados se mantienen aún cuando la red aumenta de tamaño, es decir, permanecen en los mismos sitios. También, estos estados se hacen antisimétricos frente a reflexiones y cambio de frontera.

Se propuso un un modelo teórico que considera interacciones a primeros vecinos utilizando el modelo de amarre fuerte para explicar las observaciones numéricas que se realizaron en esta tesis. Dicho modelo consiste en describir las interacciones a primeros vecinos de una cadena lineal infinita y de dos cadenas acopladas infinitas (ambos casos en base a la geometría del grafeno). El modelo propuesto predice la existencia de al menos dos estados atrapados, uno simétrico y otro antisimétrico, a causa de la deformación aplicada a la red. Ambos estados fueron identificados en todas las redes estudiadas.

Para los parámetros del grafeno reportados en la literatura se encontró una región de deformaciones para la cual, de acuerdo al modelo propuesto, sería posible observar estados atrapados que cruzan toda la red. Esto último es fundamental para lograr transportar corrientes de forma muy eficiente y robusta a energías muy específicas, sin que éstas fluyan por los bordes de la red.

Se proyecta implementar a futuro un programa que analice las gráficas de los eigenvectores para hacer el filtrado automático y reducir así el tiempo de este proceso, ya que para esta tesis se hizo de forma manual, siendo así un trabajo lento y laborioso. Una opción es implementar dicho programa utilizando la tecnología de las redes neuronales de autoaprendizaje. Con el filtrado automático se pueden analizar otras deformaciones, tales como las no lineales y en una y dos direcciones, así como estudiar otros alótropos del grafeno, por ejemplo.

Se espera que un futuro estos estados atrapados sean verificados experimentalmente, como es el caso, por ejemplo, de las redes macroscópicas de discos dieléctricos en medio de un campo electromagnético que emula

las propiedades electrónicas de algunos materiales bidimensionales.

Apéndice A

Código de los programas creados en Wolfram Mathematica 11

En esta parte se incluye el código de los programas desarrollados en esta tesis. En algunos casos se describe cómo funciona el programa mientras que en otros casos no porque están basados en programas anteriores los cuales habrían sido descritos.

Gráfica, eigenvalores e histograma de una red aleatoria de átomos.nb

```
n = Input["Número de átomos"];
min = Input["Cota inferior de la posición de números aleatorios"];
max = Input["Cota superior de la posición de números aleatorios"];
r = Abs[10  $\frac{max-min}{n}$ ]; (* radio mínimo de interacción *)
 $\gamma$  = 1; (* factor de la exponencial *)
A = 1; (* amplitud *)

Pos = Table[RandomReal[{min,max},2], {n}];
TableForm[Pos,TableHeadings  $\rightarrow$  {None, {"x", "y"}}, TableAlignments  $\rightarrow$  Center];
GA = ListPlot[Pos, PlotRange  $\rightarrow$  {{min-r, max+r}}, {{min-r, max+r}}, AxesLabel  $\rightarrow$  {"x", "y"}, PlotLabel
 $\rightarrow$  "Átomos en posiciones aleatorias en 2D y sus radios de interacción", PlotStyle  $\rightarrow$  {PointSize[0.025], Red},
AspectRatio  $\rightarrow$  1];
GB = Graphics[Table[{Gray, Circle[Pos[[i]], r]}, {i, Length[Pos]}], AspectRatio  $\rightarrow$  1];
RedAleatoria = Show[GA, GB]

d = Table[ $\sqrt{((Pos[[i,1]] - Pos[[j,1]])^2 + (Pos[[i,2]] - Pos[[j,2]])^2)}$ , {i, n}, {j, n}];
H = Table[0, {i, n}, {j, n}];

For[i = 1, i  $\leq$  n, i++,
For[j = 1, j  $\leq$  n, j++,
If[RegionMember[
Disk[{Pos[[j, 1]], Pos[[j, 2]]}, r], {Pos[[i, 1]], Pos[[i, 2]]}],
H[[i, j]] = N[A Exp[- $\gamma$  d[[i, j]]]]]]

For[i = 1, i  $\leq$  n, i++, H[[i, i]] =  $\epsilon$ ]
EV = Eigenvalues[H /. { $\epsilon$   $\rightarrow$  0}] //N;

Print["Eigenvalores de  $\hat{H}$  :", EV]

SetDirectory[NotebookDirectory[]];
Export["RedAleatoria.png", RedAleatoria, ImageResolution  $\rightarrow$  300];
Export["Lista de EV-aleatorio.dat", Chop[EV]];
```

```

EVi = Select[Import["Lista de EV-aleatorio.dat", "List"], Abs[#] > 0 &];
Print["Eigenvalores de  $\hat{H}$  diferentes de cero: ", EVi]
h = Histogram[EVi, Round[Length[EVi]], PlotLabel -> Style["Eigenvalores de  $\hat{H}$  diferentes de cero", 14],
Frame -> True, FrameLabel -> {Style["Eigenvalor (U.A.)", 14], Style["Frecuencia", 14]} RotateLabel ->
True]
Export["HistogramaAleatorio.png", h, ImageResolution -> 300];

```

Después de solicitar los parámetros que se describieron en la página 8 y de crear una lista aleatoria de coordenadas (x, y) en función de dichos parámetros para después graficar la red bidimensional aleatoria junto con los radios de interacción, lo que se hace es calcular las distancias entre todos los pares posibles de átomos (incluyendo al átomo mismo, cuya distancia entre sí mismo es siempre cero). Este cálculo se hace mediante el teorema de Pitágoras

$$d_{ij} = \sqrt{(x_i - x_j)^2 + (y_i - y_j)^2}, \quad (\text{A.1})$$

en donde d_{ij} es la distancia entre el i -ésimo átomo con coordenadas (x_i, y_i) y el j -ésimo átomo con coordenadas (x_j, y_j) . Este cálculo se ejecuta en el código generando una tabla en donde los índices i y j varían desde 1 hasta n , en donde n es el número de átomos en la red aleatoria. De esta manera se tienen las distancias entre todos los átomos y éstos valores se guardan en una matriz de tamaño $n \times n$.

Luego, en el código se crea la matriz del Hamiltoniano \hat{H} . Esta matriz se inicializa con todos sus elementos igual a cero para que de esta manera se tenga una matriz de ceros de tamaño $n \times n$ y posteriormente éstos puedan cambiar de valor según la interacción entre los átomos.

La siguiente parte del programa es donde se elige si un átomo se encuentra dentro del radio mínimo de interacción de otro átomo. Obviamente, este procedimiento es aplicado para todos los átomos de la red, así que se realiza a través de dos ciclos (For). Dentro de estos dos ciclos se utiliza una condición (If) que pregunta si el átomo de interés se encuentra dentro de la región limitada por el radio mínimo de interacción de cualquier otro átomo. Si la respuesta es sí, entonces el elemento de matriz del Hamiltoniano \hat{H} se convierte en la energía de interacción de acuerdo a la ecuación (2.17), excepto cuando se trata del mismo átomo.

En el caso en el que un átomo no se encuentre dentro del radio mínimo de interacción de otro átomo, no se hace nada en el código ya que ese elemento de matriz H_{ij} es igual a cero porque se había establecido antes. Físicamente, esto representa que los dos átomos están lo suficientemente alejados entre sí y por lo tanto la energía de interacción entre ellos es despreciable.

Lo que ahora se tiene en los elementos de la matriz del Hamiltoniano \hat{H} son números diferentes e iguales a cero. La diagonal de esta matriz representa los átomos que interaccionan con ellos mismos. Como todos estos átomos son iguales, entonces la energía debe ser igual y por lo tanto en el código los elementos de la diagonal se cambian por la energía ϵ . Las energías de interacción entre cualquier par de átomos son iguales, esto significa que $H_{ij} = H_{ji}$. También, como todos los valores de las energías son reales $H_{ij} = H_{ij}^*$, y por estas dos últimas igualdades que se tienen entre los elementos de la matriz, se tiene que el Hamiltoniano es Hermitiano, es decir, $H = H^\dagger$.

Luego, se determinan los eigenvalores de \hat{H} cuando $\epsilon = 0$. De esta manera se obtiene una lista de n eigenvalores y se muestran al usuario. Esta lista primero es redondeada de tal manera que los eigenvalores cuyo magnitud sea menor que 10^{-10} sean reemplazados por un cero. Después, se exporta del programa esta lista como un archivo llamado Lista de EV-aleatorio.dat en donde se guarda en la misma carpeta donde está ubicado este programa. La exportación de estos datos sirve para analizarlos posteriormente.

En la siguiente parte del código, se analizan los eigenvalores recientemente exportados. Se crea una nueva lista cuyo contenido son los eigenvalores guardados en Lista de EV-aleatorio.dat pero de tal manera que solamente los eigenvalores diferentes de cero estén en esta lista. Ahora, con esta nueva lista de eigenvalores se crea un histograma para analizar la distribución de la energía en rangos específicos. El número de barras que aparecen en el histograma es igual al valor redondeado al entero más próximo del número de elementos de la lista de eigenvalores. Se exporta el histograma del programa como una imagen.

Gráfica y eigenvalores de una red de grafeno en 2D.nb

```
a = Input["Longitud de la apotema"];
n = Input["n (entero)"];
m = Input["m (entero)"];
l = N[ $\frac{2}{\sqrt{3}}$  a]; (* Longitud de una lado de un hexágono *)
r = Input["Radio mínimo de interacción"];
 $\gamma$  = 1; (* factor de la exponencial *)
A = 1; (* amplitud *)

a1 = {3 l/2, a}; (* vector de la base *)
a2 = {3 l/2, -a}; (* vector de la base *)

PosA = {}; (* puntos de la red A *)
PosB = {}; (* puntos de la red B *)
A0 = {0, 0}; (* desplazamiento de la red A *)
B0 = {2 l, 0}; (* desplazamiento de la red B *)

For[i = -n, i ≤ n, i++,
For[j = -m, j ≤ m, j++,
AppendTo[PosA, i a1 + j a2 + A0]
AppendTo[PosB, i a1 + j a2 + B0]]]

Pos = Join[PosA, PosB]; (* puntos de la red A y B *)
k = Length[Pos];
Print["Número de átomos de carbono: ", k]

TableForm[Pos, TableHeadings → {None, {"x", "y"}}, TableAlignments → Center];
GA = ListPlot[PosA, PlotRange → {{Min[Pos[[All, 1]]] - r, Max[Pos[[All, 1]]] + r}, {Min[Pos[[All, 2]]] - r, Max[Pos[[All, 2]]] + r}}, PlotStyle → {PointSize[0.025], Blue}];
GB = ListPlot[PosB, PlotRange → {{Min[Pos[[All, 1]]] - r, Max[Pos[[All, 1]]] + r}, {Min[Pos[[All, 2]]] - r, Max[Pos[[All, 2]]] + r}}, PlotStyle → {PointSize[0.025], Red}];
GC = Graphics[Table[{Gray, Circle[Pos[[i], r]}, {i, k}], PlotLabel → Style["Red basada en el grafeno", 14], Frame → True, Axes → True, AxesLabel → {"x (U.A.)", "y (U.A.)"}];

RedHexagonal = Show[GC, GA, GB]

d = Table[ $\sqrt{((\text{Pos}[[i, 1]] - \text{Pos}[[j, 1]])^2 + (\text{Pos}[[i, 2]] - \text{Pos}[[j, 2]])^2)}$ , {i, k}, {j, k}];
H = Table[0, {i, k}, {j, k}];

For[i = 1, i ≤ k, i++,
For[j = 1, j ≤ k, j++,
If[RegionMember[
Disk[{Pos[[j, 1]], Pos[[j, 2]], r}, {Pos[[i, 1]], Pos[[i, 2]]}],
H[[i, j]] = N[A Exp[- $\gamma$  d[[i, j]]]]]]]

For[i = 1, i ≤ k, i++, H[[i, i]] =  $\epsilon$ ]

EV = Eigenvalues[H /. { $\epsilon$  → 0}] // N;

Print["Eigenvalores de  $\hat{H}$ : ", EV]
SetDirectory[NotebookDirectory[]];
Export["RedBGrafeno.png", RedHexagonal, ImageResolution → 300];
Export["Lista de EV.dat", Chop[EV]];
```

Después de solicitar los parámetros al usuario y de definir los vectores de la base dados por las ecuaciones (2.18) y (2.19), se definieron dos vectores de desplazamiento. El primer vector de desplazamiento es en

realidad el vector cero

$$\mathbf{A}_0 = 0\mathbf{i} + 0\mathbf{j}, \quad (\text{A.2})$$

porque la subred A es la referencia, y el segundo vector de desplazamiento es

$$\mathbf{B}_0 = 2l\mathbf{i} + 0\mathbf{j}, \quad (\text{A.3})$$

el cual mueve todos los puntos de la subred A una distancia de $2l$ en la dirección x para así generar los puntos de la subred B.

En la siguiente sección del código es donde se crean los puntos de cada red parcial. Dentro de dos ciclos (For), en donde el ciclo interno corre de $-m$ a m en pasos de uno con el índice j y el ciclo externo corre de $-n$ a n en pasos de uno con el índice i , se agregan a las listas vacías las coordenadas de los puntos. A la primera lista corresponden las posiciones de la red A y se representa gráficamente por puntos azules, mientras que a la segunda lista contiene las posiciones de la red B y su representación gráfica son puntos rojos.

La manera en la que se creó los puntos de la redes es con los siguientes vectores dentro de los ciclos (For):

$$\mathbf{R}_A(i, j) = i\mathbf{a}_1 + j\mathbf{a}_2 + \mathbf{A}_0, \quad (\text{A.4})$$

$$\mathbf{R}_B(i, j) = i\mathbf{a}_1 + j\mathbf{a}_2 + \mathbf{B}_0. \quad (\text{A.5})$$

Los vectores \mathbf{R}_A y \mathbf{R}_B sirven para generar los puntos de las subredes A y B respectivamente. Dentro de los ciclos (For), los valores de los índices i y j varían, y de tal manera se obtienen las coordenadas de ambas redes y éstas se anexan en su respectiva lista.

Ahora se tienen dos listas: en una de ellas se encuentran las posiciones de los átomos de la subred A, y en la otra lista están las posiciones de los átomos de la subred B. Estas dos listas se juntan en una sola para así tener todas las posiciones de los átomos de la red hexagonal en una sola lista. El número de pares ordenados en esta lista es el número de átomos en la red, y esta cantidad se denomina k dentro del código. Así, se le muestra al usuario el número de átomos que tiene en su red utilizando un comando que cuenta el número de elementos en una lista.

La siguiente sección del código es la gráfica de la red hexagonal. Se grafican las subredes A y B para tener todos los puntos de la red. Una gráfica adicional es colocar círculos cuyos centros son los puntos de la red. A cada punto le corresponde un círculo, y el radio lo especificó el usuario. El significado físico de estos círculos es el radio de interacción para cada átomo. Las tres gráficas que se han descrito se combinan en una sola.

La siguiente parte del código es exactamente la misma que el programa anterior (**Gráfica, eigenvalores e histograma de una red aleatoria de átomos.nb**): se calculan las distancias entre todos los pares de átomos, se inicializa en ceros la matriz de tamaño $k \times k$ del Hamiltoniano, se determinan cuáles átomos se encuentran dentro de los radios de interacción de los demás átomos y se les asigna una valor de energía de acuerdo a la ecuación (2.17), se calculan los eigenvalores del Hamiltoniano y se exporta la lista redondeada (con el mismo criterio del programa anterior) como un archivo llamado Lista de EV.dat. Finalmente en el actual programa se le muestra al usuario la lista de los eigenvalores.

Histograma de eigenvalores de grafeno en 2D.nb

```
SetDirectory[NotebookDirectory[]];
EVi = Select[Import["Lista de EV.dat", "List "], Abs[#] > 0 &];
Print["Eigenvalores de  $\hat{H}$  diferentes de cero: ", EVi]
h = Histogram[EVi, Round[Length[EVi]/5], PlotLabel -> Style["Eigenvalores de  $\hat{H}$  diferentes de cero", 14],
Frame -> True, FrameLabel -> {Style["Eigenvalor (U.A.)", 14], Style["Frecuencia", 14]}, RotateLabel ->
True]
Export["HistogramaGrafeno2D.png", h, ImageResolution -> 300];
```


Como un ejemplo, a continuación se muestra el histograma de eigenvalores correspondiente a la Figura 2.5 que se encuentra en la página 10. Esta gráfica se encuentra en este parte de la tesis porque realmente no aporta a la discusión del Capítulo 2.

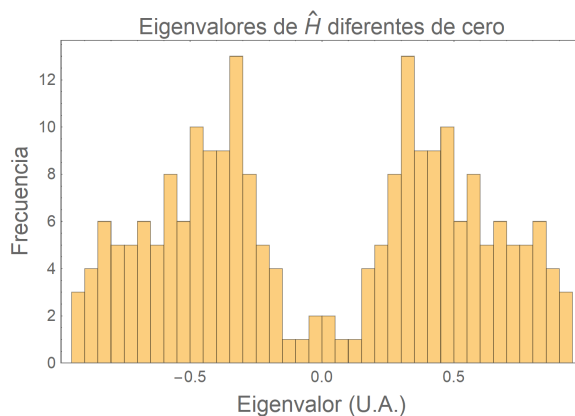


Figura A.1: Histograma correspondiente a la red hexagonal de la Figura 2.5. En este caso se tuvo interacción a primeros vecinos con un valor de $\gamma = 1$ en el código.

Se observa que el histograma es simétrico para una red hexagonal con interacción a primeros vecinos usando el modelo de amarre fuerte.

Eigensistema de una red de grafeno 2D.nb

```

a = Input["Longitud de la apotema"];
n = Input["n (entero)"];
m = Input["m (entero)"];
l = N[ $\frac{2}{\sqrt{3}}$  a]; (* Longitud de una lado de un hexágono *)
r = Input["Radio mínimo de interacción"];
 $\gamma = 5$ ; (* factor de la exponencial *)
A = 1; (* amplitud *)

a1 = {3 l/2, a}; (* vector de la base *)
a2 = {3 l/2, -a}; (* vector de la base *)

PosA = {}; (* puntos de la red A *)
PosB = {}; (* puntos de la red B *)
A0 = {0, 0}; (* desplazamiento de la red A *)
B0 = {2 l, 0}; (* desplazamiento de la red B *)

For[i = -n, i ≤ n, i++,
For[j = -m, j ≤ m, j++,
AppendTo[PosA, i a1 + j a2 + A0]
AppendTo[PosB, i a1 + j a2 + B0]]]

Pos = Join[PosA, PosB]; (* puntos de la red A y B *)
k = Length[Pos];
Print["Número de átomos de carbono: ", k]

d = Table[ $\sqrt{((\text{Pos}[[i, 1]] - \text{Pos}[[j, 1]])^2 + (\text{Pos}[[i, 2]] - \text{Pos}[[j, 2]])^2)}$ , {i, k}, {j, k}];
H = Table[0, {i, k}, {j, k}];

For[i = 1, i ≤ k, i++,
For[j = 1, j ≤ k, j++,
If[RegionMember[

```

```

Disk[{Pos[[j, 1]], Pos[[j, 2]]}, r], {Pos[[i, 1]], Pos[[i, 2]]},
H[[i, j]] = N[A Exp[- $\gamma$  d[[i, j]]]]]]]]
For[i = 1, i ≤ k, i++, H[[i, i]] = 0]

H//MatrixForm

ES = Eigensystem[H]; (* eigenvalores y eigenvectores de H *)

q = Input["Elige el número del eigenvalor q, en donde 1 ≤ q ≤ k "];
Print["El valor de q es: ", q]

PosEV = {}; (* componente z de las posiciones en Pos *)

Print["El eigenvalor correspondiente a  $\lambda_q$  es: ", ES[[1, q]]]
Print["El eigenvector correspondiente a  $\lambda_q$  es: ", ES[[2, q]]]

For[i = 1, i ≤ k, i++, AppendTo[PosEV, ES[[2, q, i]]]]
For[i = 1, i ≤ k, i++, AppendTo[Pos[[i]], PosEV[[i]]]]

EVec3D = ListPointPlot3D[Pos, ColorFunction → "Rainbow", AxesLabel → {"x", "y", "z"}, PlotStyle →
PointSize[0.025], PlotLabel → "Gráfica de los eigenvectores de\n la red de grafeno en 2D"]

EVec2D = Graphics[Table[{ColorData["Rainbow"][Abs[Pos[[i, 3]]]/Abs [Max[Pos[[All, 3]]]]], Disk[{Pos[[i, 1]],
Pos[[i, 2]], 0.5}], {i, Length[Pos]}], Axes → True, AxesLabel → {Style["x (U.A.)", 12], Style["y (U.A.)",
12]}, Frame → True, PlotLabel → Style["Gráfica de los eigenvectores\n de una red tipo grafeno ", 14]]

SetDirectory[NotebookDirectory[]];
Export["Eigenectores3D.png", EVec3D, ImageResolution → 300];
Export["Eigenectores2D.png", EVec2D, ImageResolution → 300];

BL = BarLegend[{ "Rainbow", {Min[ES[[2, q]]], Max[ES[[2, q]]]}}, LegendLayout → "Column"];
EVecL = Framed[Legended[EVec2D, Placed[BL, After]]]
Export["EVec2DLegend.png", EVecL, ImageResolution → 300];

```

El código para la construcción de la red hexagonal es idéntico que el código en el programa **Gráfica y eigenvalores de una red de grafeno en 2D.nb**. La siguiente parte del código también es idéntica al programa mencionado anteriormente. En esta parte se calculan las distancias entre todos los pares de átomos de la red hexagonal y se guardan estos valores en una tabla. Luego se crea la matriz del Hamiltoniano \hat{H} llenándola con ceros al inicio, y luego se van cambiando los valores de la matriz del Hamiltoniano de acuerdo a la energía de interacción expresada por la ecuación (2.17). Posteriormente, se hace cero todos los elementos de la diagonal del Hamiltoniano porque estos representan los átomos que interactúan con ellos mismos. A partir de esta parte en el código es donde se difiere con el resto de los programas hasta ahora. Con un nuevo comando se determina el eigensistema del Hamiltoniano \hat{H} , es decir, el programa muestra en una lista los eigenvalores y los eigenvectores de la matriz cuadrada. El contenido de esta lista será útil para graficar los eigenvectores. Ahora, debido a que hay un número k de átomos, el programa le pide al usuario que ingrese un número entero entre 1 y k y a este valor lo guarda en una variable llamada q . El significado de q es el número del eigenvalor dado que el programa tiene almacenado k eigenvalores, y por consecuencia, debido al eigensistema, hay k listas con k componentes cada una. Estas listas son los eigenvectores de la red a estudiar. Lo que hace el programa es entonces pedir que el usuario elija un eigenvalor del eigensistema, y grafica los eigenvectores correspondientes a ese eigenvalor.

Para graficar los eigenvectores se necesita guardar en una lista los eigenvectores para un eigenvalor particular. Entonces, en el código se crea una lista vacía en donde posteriormente se llenará con los eigenvectores. Esta lista representa las coordenadas en z para la gráfica de los eigenvectores, y las coordenadas x y y de esta misma gráfica son las mismas coordenadas x y y que tienen los átomos, y estos datos ya están guardados en un lista.

Se imprime el valor de q que especificó el usuario para saber cuál eigenvalor eligió, y también se imprime el

eigenvalor y la lista de los eigenvectores correspondientes al valor de q .

Ahora en el código lo que se hace es añadir a la lista vacía mencionada anteriormente los valores de los eigenvectores con un ciclo (For). Después, con otro ciclo (For), se añade a la lista de las coordenadas x y y de los átomos los valores de los eigenvectores. Entonces ahora lo que tiene es una lista con todas las coordenadas (x, y, z) que se necesitan para graficar los eigenvectores.

En la parte última del código se grafica la lista anterior como puntos en tres dimensiones. Las direcciones x y y representan la distribución espacial de los átomos de la red, y la dirección z representa los componentes del eigenvector. Todos los puntos tienen un color distinto para visualizar la distribución de los eigenvectores. Los colores se normalizan con una función de Wolfram Mathematica, de tal manera que para el componente más alto de la lista de los eigenvectores le corresponde el color rojo y para el componente más bajo de la misma lista le corresponde el color violeta. Así, se tiene una distribución de los colores de un arco iris para representar las magnitudes de los eigenvectores.

Ahora se grafica la misma lista pero en dos dimensiones. Como en el caso anterior, las direcciones x y y representan la distribución espacial de los átomos de la red. Las componentes en z , es decir, los valores de las componentes de los eigenvectores, sirven para darles color a los puntos con el mismo criterio de normalización descrito en el párrafo anterior, pero en este caso se tuvo que normalizar manualmente el espectro de colores en función de las magnitudes de los componentes de los eigenvectores. Finalmente, se exportan las dos gráficas creadas como imágenes para su uso posterior.

Deformación de una red de grafeno en 2D.nb

```
a = Input["Longitud de la apotema"];
n = Input["n (entero)"];
m = Input["m (entero)"];
l = N[ $\frac{2}{\sqrt{3}}$  a]; (* Longitud de una lado de un hexágono *)
r = Input["Radio mínimo de interacción"];
 $\gamma$  = 5; (* factor de la exponencial *)
A = 1; (* amplitud *)

a1 = {3 l/2, a}; (* vector de la base *)
a2 = {3 l/2, -a}; (* vector de la base *)

PosA = {}; (* puntos de la red A *)
PosB = {}; (* puntos de la red B *)
A0 = {0, 0}; (* desplazamiento de la red A *)
B0 = {2 l, 0}; (* desplazamiento de la red B *)

For[i = -n, i ≤ n, i++,
For[j = -m, j ≤ m, j++,
AppendTo[PosA, i a1 + j a2 + A0]
AppendTo[PosB, i a1 + j a2 + B0]]]

Pos = Join[PosA, PosB]; (* puntos de la red A y B *)
k = Length[Pos];
Print["Número de átomos de carbono: ", k]

TableForm[Pos, TableHeadings → {None, {"x", "y"}}, TableAlignments → Center];
GA = ListPlot[PosA, PlotStyle → {PointSize[0.015], Blue}];
GB = ListPlot[PosB, PlotStyle → {PointSize[0.015], Red}];
GC = Graphics[Table[{Gray, Circle[Pos[[i]], r]}, {i, k}], Axes → True, AxesLabel → {"x (U.A.)", "y (U.A.)"},
PlotRange → All, PlotLabel → "Red tipo grafeno"];
RedHexagonal = Show[GC, GA, GB, Frame → True]

x0 = Input["Coordenada x del punto fijo"];
y0 = Input["Coordenada y del punto fijo"];
```

```

δx = Input["Deformación en el eje x"];
δy = Input["Deformación en el eje y"];

Print["a = ", a]
Print["n = ", n]
Print["m = ", m]
Print["r = ", r]
Print["γ = ", γ]
Print["A = ", A]
Print["x0 = ", x0]
Print["y0 = ", y0]
Print["δx = ", δx]
Print["δy = ", δy]

PosAD = Table[0, {i, Length[PosA]}, {j,2}]; (* inicializando los puntos de la red A deformada *)
PosBD = Table[0, {i, Length[PosB]}, {j,2}]; (* inicializando los puntos de la red A deformada *)

(* Deformación simétrica respecto al punto fijo *)

For[i = 1, i ≤ Length[PosAD], i++,
PosAD[[i]] = {PosA[[i,1]] + δx *(PosA[[i,1]] - x0), PosA[[i,2]] + δy *(PosA[[i,2]] - y0)}] (* aplicando la deformación a la red A *)

For[i = 1, i ≤ Length[PosBD], i++,
PosBD[[i]] = {PosB[[i,1]] + δx *(PosB[[i,1]] - x0), PosB[[i,2]] + δy *(PosB[[i,2]] - y0)}] (* aplicando la deformación a la red B *)

PosD = Chop[Join[PosAD, PosBD]]; (* puntos de la red A y B después de aplicar la deformación *)

TableForm[PosD, TableHeadings → {None, {"x", "y"}}, TableAlignments → Center];
GAD = ListPlot[PosAD, PlotStyle → {PointSize[0.015], Blue}];
GBD = ListPlot[PosBD, PlotStyle → {PointSize[0.015], Red}];
GCDe = Graphics[Table[{Gray, Circle[PosD[[i]], r]}, {i, k}], Axes → True, AxesLabel → {"x (U.A.)", "y (U.A.)"}, PlotRange → All, PlotLabel → "Red tipo grafeno deformado"];
RedHexagonalD = Show[GCDe, GAD, GBD, Frame → True]

{RedHexagonal, RedHexagonalD}

SetDirectory[NotebookDirectory[]];
Export["Posiciones del grafeno deformado.dat", PosD];
Export["a.dat", a];
Export["n.dat", n];
Export["m.dat", m];
Export["r.dat", r];
Export["gamma.dat", γ];
Export["A.dat", A];
Export["x0.dat", x0];
Export["y0.dat", y0];
Export["dx.dat", δx];
Export["dy.dat", δy];
Export["Grafeno_a" <> ToString[a] <> "_n" <> ToString[n] <> "_m" <> ToString[m] <> "_r" <> ToString[r] <> "_gamma" <> ToString[γ] <> "_A" <> ToString[A] <> "_x" <> ToString[x0] <> "_y" <> ToString[y0] <> "_dxs" <> ToString[δx] <> "_dys" <> ToString[δy] <> ".png", RedHexagonal, ImageResolution → 500];
Export["GrafenoDeformado_a" <> ToString[a] <> "_n" <> ToString[n] <> "_m" <> ToString[m] <> "_r" <> ToString[r] <> "_gamma" <> ToString[γ] <> "_A" <> ToString[A] <> "_x" <> ToString[x0] <> "_y" <>

```

```
ToString[y0] <> “.dxs” <> ToString[ $\delta x$ ] <> “.dys” <> ToString[ $\delta y$ ] <> “.png”, RedHexagonalD, Image-Resolution  $\rightarrow$  500];
```

El inicio de este programa es igual que el programa de Gráfica y eigenvalores de una red de grafeno en 2D.nb. Se solicita al usuario el valor de la apotema a , dos enteros n y m que sirven para la construcción de la red, el radio de interacción r , el factor de decaimiento γ y la amplitud A . Luego, con los vectores de la base se crea la red hexagonal mediante dos ciclos (For).

La siguiente parte del código es la que difiere del programa del cual está basado. Ahora se le pide al usuario que ingrese las coordenadas (x_0, y_0) del punto fijo. El significado físico que tiene este punto es que sus coordenadas son invariantes después de aplicar la deformación. A excepción del punto fijo, todos los demás puntos de la red van a cambiar de posición de acuerdo a las ecuaciones (3.1) y (3.2) que se encuentran en la página 15 Después de esto se le pide al usuario que ingrese los valores de δx y δy , los cuales son dos parámetros que describen qué tanto se va a deformar la red tipo grafeno. Para valores positivos la red se estirará en su respectiva dirección, y para valores negativos la red se comprimirá en su respectiva dirección. Cabe mencionar que las distancias que se desplazan los átomos después de la deformación están en unidades arbitrarias.

Se imprimen todos los valores de los parámetros que el usuario ingresó. Luego, se crean dos listas vacías en donde van a ir las posiciones de los átomos de la red después de aplicar la deformación. Ahora en el código es donde se aplica la deformación a todos los puntos de la red. Mediante un ciclo iterativo se aplican las siguientes deformaciones a los puntos (x_i, y_i) , en donde i es el subíndice que va cambiando con el ciclo (For) para así barrer todas las posiciones de la red.

Entre más alejado está el punto (x_i, y_i) del punto fijo (x_0, y_0) , más se va separar de él. Actualmente se tienen dos conjuntos de datos: las posiciones de la red tipo grafeno y las posiciones de la red tipo grafeno deformada. Se grafican ambas redes con sus respectivos radios de interacción representados por círculos alrededor de los puntos. Finalmente, se exportan todos los valores de los parámetros para utilizarlos en el siguiente programa, las posiciones de los átomos y ambas gráficas de las redes.

Eigensistema de una red deformada de grafeno en 2D.nb

```
PosDI = Import[“Posiciones del grafeno deformado.dat”];
```

```
ai = Import[“a.dat”];
aI = ai[[1,1]]; (* valor de la apotema *)
ni = Import[“n.dat”];
nI = ni[[1,1]]; (* valor de n *)
mi = Import[“m.dat”];
mI = mi[[1,1]]; (* valor de m *)
ri = Import[“r.dat”];
rI = ri[[1,1]]; (* valor del radio de interacción *)
 $\gamma$ i = Import[“gamma.dat”];
 $\gamma$ I =  $\gamma$ i[[1,1]]; (* valor del factor de decaimiento *)
Ai = Import[“A.dat”];
AI = Ai[[1,1]]; (* valor de la amplitud *)
x0i = Import[“x0.dat”];
x0I = x0i[[1,1]]; (* valor de x0 *)
y0i = Import[“y0.dat”];
y0I = y0i[[1,1]]; (* valor de y0 *)
dxi = Import[“dx.dat”];
dxI = dxi[[1,1]]; (* valor de  $\delta x$  *)
dyi = Import[“dy.dat”];
dyI = di[[1,1]]; (* valor de  $\delta y$  *)
```

```
k = Length[PosDI];
```

```
d = Table[ $\sqrt{(\text{PosDI}[[i, 1]] - \text{PosDI}[[j, 1]])^2 + (\text{PosDI}[[i, 2]] - \text{PosDI}[[j, 2]])^2}$ ], {i, k}, {j, k}];
```

```

H = Table[0, {i, k}, {j, k}];

For[i = 1, i ≤ k, i++,
For[j = 1, j ≤ k, j++,
If[RegionMember[
Disk[{PosDI[[j, 1]], PosDI[[j, 2]], rI], {PosDI[[i, 1]], PosDI[[i, 2]]}],
H[[i, j]] = N[AI *Exp[-γI *d[[i, j]]]]]]]]

For[i = 1, i ≤ k, i++, H[[i, i]] = 0]

H//MatrixForm

ESis = Eigensystem[H]; (* eigenvalores y eigenvectores de H *)

SetDirectory[NotebookDirectory[]];

For[i = 1, i ≤ k, i++,
PosAux = {};
PosAux = PosDI;

For[j = 1, j ≤ k, j++, AppendTo[PosAux[[j]], ESis[[2, i, j]]];

(* Deformación simétrica respecto al punto fijo *)

EVec2Ds1 = Graphics[Table[{ColorData[“Rainbow”][Abs[PosAux[[p,3]]/Abs[ Max[PosAux[[All,3]]]]], Disk
[{PosAux[[p,1]], PosAux[[p,2]], 0.5}], {p, Length[PosAux]}], Axes → True, Frame → True, AxesLabel →
{“x”, “y”}];
EVec2Ds2 = Graphics[Table[Text[Style[If[Sign[[PosAux[[p,3]]] == 1, “+”, “-”], FontSize → 7], {PosAux[[p,1]],
PosAux[[p,2]]}], {p, Length[PosAux]}];
EVec2D = Show[EVec2Ds1, EVec2Ds2];

BL = BarLegend[{“Rainbow”, {Min[ESis[[2, i]], Max[ESis[[2, i]]]}}, LegendLayout → “Row”, LegendMar-
kerSize → Automatic, LegendMargins → 0];
EVec2DL = Frame[Legended[EVec2D, Placed[BL, Below]]];

Export[“NewBLEigenvectoresDeformados2D_EV” <> ToString[i] <> “_N” <> ToString[AccountingForm[ESis[[1,i],
6]] <> “_a” <> ToString[aI] <> “_n” <> ToString[nI] <> “_m” <> ToString[mI] <> “_k” <> ToString[k] <>
“_r” <> ToString[rI] <> “_gamma” <> ToString[γI] <> “_A” <> ToString[AI] <> “_x” <> ToString[x0I]
<> “_y” <> ToString[y0I] <> “_dxs” <> ToString[dxI] <> “_dys” <> ToString[dyI] <> “.png”, EVec2DL,
ImageResolution → 300];

Clear[PosAux]
]

```

Como hay un número k de átomos, hay k eigenvalores y a cada uno le corresponde un eigenvector de k componentes. Este programa grafica todos los eigenvectores y los exporta como imágenes para su futuro análisis.

Al inicio del programa se importan las posiciones de los átomos de la red tipo grafeno deformada y todos los valores de los parámetros del programa anterior Deformación de una red de grafeno en 2D.nb, y se les asigna un nombre nuevo de variable. Nuevamente, se le llama k al número de átomos en la red deformada. Se calculan todas las distancias entre todos los pares de átomos, se inicializa la matriz del Hamiltoniano con ceros y posteriormente estos cambian de valor según la energía de interacción dada por la ecuación (2.17) si un átomo se encuentra dentro del rango de interacción de cualquier otro átomo considerando una interacción a cuartos vecinos. Se calcula el eigensistema del Hamiltoniano \hat{H} y como resultado se obtiene una lista de los eigenvalores y eigenvectores de la matriz.

Mediante un ciclo iterativo, para cada eigenvalor de la red deformada (que son k eigenvalores) se crea la gráfica de los eigenvectores (que tienen k componentes) y se exporta como una imagen. Como se implementó

un ciclo (For) para este paso, el programa va a exportar k imágenes a la carpeta en donde se encuentra ubicado el programa actual. Para esto, dentro del código se implementó que el nombre de cada gráfica sea única. Para esto, el nombre de cada imagen depende de lo siguiente: el número del eigenvalor que va desde 1 hasta k , el valor numérico del eigenvalor que puede ser positivo o negativo, y todos los valores de los parámetros importados del programa anterior *Deformación de una red de grafeno en 2D.nb*. Así, cuando se corre el programa se generan k imágenes, cada una con su nombre específico para poder identificar el número del eigenvalor, el valor numérico del eigenvalor y el valor de todos los parámetros que se usaron para la creación de dicha red deformada. El nombre extensivo de cada imagen también sirve para tener un mejor control de todos los archivos que se generan cuando se corre el programa.

Una vez generada todas las imágenes para una corrida del programa, éstas se guardan en una carpeta cuyo nombre es igual a los valores de los parámetros de la red deformada actual. Si se quieren variar los parámetros de la red, se tiene que ejecutar el programa pasado para que exporte los valores de los parámetros, y luego correr este actual programa para generar todas las gráficas de los eigenvectores y después guardarlos en su respectiva carpeta.

Ahora se explica cómo se generó cada gráfica de los eigenvectores. Para cualquier red deformada se tiene guardado en una lista todas las posiciones de los átomos. Dentro del ciclo (For) anteriormente mencionado, se crea una lista vacía que nos sirve como una variable auxiliar. Después, se iguala esa lista auxiliar con la lista de las posiciones de los átomos de la red deformada. Con otro ciclo (For), que corre desde $j = 1$ hasta $j = k$, se le añade a esa lista auxiliar el valor del componente j -ésimo de la lista del eigenvector. Una vez terminado este ciclo se tiene una lista de coordenadas (x, y, z) , en donde los componentes x y y son las posiciones de los átomos y la componente z es el valor de la componente correspondiente del eigenvector. Se grafican puntos con las coordenadas (x, y) que representan la distribución de los átomos, y la componente z se utiliza para darle color a ese punto. Se utilizaron todos los componentes del eigenvector para hacer una normalización en una escala de colores. A la componente cuyo valor sea máximo le corresponde el color rojo mientras que a la componente cuyo valor sea mínimo le corresponde el color violeta. Después, se le agrega encima de cada punto un signo de $+$ o $-$, dependiendo de si la componente correspondiente del eigenvector es positiva o negativa. El programa después crea la gráfica y la exporta como una imagen y el ciclo se vuelve a repetir para el siguiente eigenvalor con su respectivo eigenvector. Todas las gráficas generadas tienen las mismas posiciones para los átomos pero diferentes colores para cada uno.

Lo que ahora se tiene a disposición son dos programas que nos permiten deformar una red de grafeno en las direcciones x y y para después calcular y graficar todos sus eigenvalores y eigenvectores.

Deformación de una red cuadrada de grafeno.nb

```
a = Input["Longitud de la apotema"];
n = Input["n (entero)"];
m = n;
l = N[ $\frac{2}{\sqrt{3}}$  a]; (* Longitud de una lado de un hexágono *)
r = Input["Radio mínimo de interacción"];
 $\gamma$  = 5; (* factor de la exponencial *)
A = 1; (* amplitud *)

a1 = {3 l/2, a}; (* vector de la base *)
a2 = {3 l/2, -a}; (* vector de la base *)

PosA = {}; (* puntos de la red A *)
PosB = {}; (* puntos de la red B *)
A0 = {0, 0}; (* desplazamiento de la red A *)
B0 = {2 l, 0}; (* desplazamiento de la red B *)

For[i = -n, i ≤ n, i++,
For[j = -m, j ≤ m, j++,
AppendTo[PosA, i a1 + j a2 + A0]
AppendTo[PosB, i a1 + j a2 + B0]]]
```



```

Pos = Join[PosA, PosB]; (* puntos de la red A y B *)
k = Length[Pos];
Print["Número de átomos de carbono: ", k]

TableForm[Pos, TableHeadings → {None, {"x", "y"}}, TableAlignments → Center];
GA = ListPlot[PosA, PlotStyle → {PointSize[0.01], Blue}];
GB = ListPlot[PosB, PlotStyle → {PointSize[0.01], Red}];
GC = Graphics[Table[{Gray, Circle[Pos[[i]], r]}, {i, k}], Axes → True, AxesLabel → {"x", "y"}, PlotRange
→ All, PlotLabel → "Grafeno en 2D"];
RedHexagonal = Show[GC, GA, GB, Frame → True, GridLines → {{(3/2)(1-n)l, -(3/2)(1-n)l+2l}, {(
-n+1)a, (n-1)a}}, GridLinesStyle → Directive[Black, Thick, Dashed]];
RedHexagonal

(* Recortando la red para que sea cuadrada *)

PosAC = DeleteCases[PosA, {x_, y_} /; x < (3/2)(1-n)l || x > -(3/2)(1-n)l+2l || y < (-n+1)a || y > (n-1)a];
PosBC = DeleteCases[PosB, {x_, y_} /; x < (3/2)(1-n)l || x > -(3/2)(1-n)l+2l || y < (-n+1)a || y > (n-1)a];
PosC = Join[PosAC, PosBC];
kC = Length[PosC];
Print["Número de átomos de carbono de la red cuadrada: ", kC]

TableForm[PosC, TableHeadings → {None, {"x", "y"}}, TableAlignments → Center];
GAC = ListPlot[PosAC, PlotStyle → {PointSize[0.01], Blue}];
GBC = ListPlot[PosBC, PlotStyle → {PointSize[0.01], Red}];
GCC = Graphics[Table[{Gray, Circle[PosC[[i]], r]}, {i, kC}], Axes → True, AxesLabel → {"x", "y"}, PlotRange
→ All, PlotLabel → "Grafeno cuadrado en 2D"];
RedHexagonalC = Show[GCC, GAC, GBC, Frame → True];
RedHexagonalC

x0 = Input["Coordenada x del punto fijo"];
y0 = Input["Coordenada y del punto fijo"];
δx = Input["Deformación en el eje x"];
δy = Input["Deformación en el eje y"];

Print["a = ", a]
Print["n = ", n]
Print["m = ", m]
Print["r = ", r]
Print["γ = ", γ]
Print["A = ", A]
Print["x0 = ", x0]
Print["y0 = ", y0]
Print["δx = ", δx]
Print["δy = ", δy]

PosACD = Table[0, {i, Length[PosAC]}, {j, 2}]; (* inicializando los puntos de la red A deformada *)
PosBCD = Table[0, {i, Length[PosBC]}, {j, 2}]; (* inicializando los puntos de la red A deformada *)

(* Deformación simétrica respecto al punto fijo *)

For[i = 1, i ≤ Length[PosACD], i++,
PosACD[[i]] = {PosAC[[i,1]] + δx *(PosAC[[i,1]] - x0), PosAC[[i,2]] + δy *(PosAC[[i,2]] - y0)}] (* aplicando
la deformación a la red A *)

For[i = 1, i ≤ Length[PosBCD], i++,
PosBCD[[i]] = {PosBC[[i,1]] + δx *(PosBC[[i,1]] - x0), PosBC[[i,2]] + δy *(PosBC[[i,2]] - y0)}] (* aplicando
la deformación a la red B *)

```

```

PosCD = Chop[Join[PosACD, PosBCD]]; (* puntos de la red A y B después de aplicar la deformación *)

TableForm[PosCD, TableHeadings → {None, {"x", "y"}}, TableAlignments → Center];
GACD = ListPlot[PosACD, PlotStyle → {PointSize[0.01], Blue}];
GBCD = ListPlot[PosBCD, PlotStyle → {PointSize[0.01], Red}];
GCCDe = Graphics[Table[{Gray, Circle[PosCD[[i]], r]}, {i, kC}], Axes → True, AxesLabel → {"x", "y"},
PlotRange → All, PlotLabel → "Grafeno cuadrado deformado en 2D"];
RedHexagonalCD = Show[GCCDe, GACD, GBCD, Frame → True]

{RedHexagonalC, RedHexagonalCD}

SetDirectory[NotebookDirectory[]];
Export["Posiciones del grafeno deformado.dat", PosCD];
Export["a.dat", a];
Export["n.dat", n];
Export["m.dat", m];
Export["r.dat", r];
Export["gamma.dat",  $\gamma$ ];
Export["A.dat", A];
Export["x0.dat", x0];
Export["y0.dat", y0];
Export["dx.dat",  $\delta x$ ];
Export["dy.dat",  $\delta y$ ];
Export["RedHexagonal_a" <> ToString[a] <> "_n" <> ToString[n] <> "_m" <> ToString[m] <> "_k" <>
ToString[k] <> "_r" <> ToString[r] <> "_gamma" <> ToString[ $\gamma$ ] <> "_A" <> ToString[A] <> ".png",
RedHexagonal, ImageResolution → 800];
Export["GrafenoC_a" <> ToString[a] <> "_n" <> ToString[n] <> "_m" <> ToString[m] <> "_kC" <> ToString[kC] <>
"_r" <> ToString[r] <> "_gamma" <> ToString[ $\gamma$ ] <> "_A" <> ToString[A] <> "_x" <>
ToString[x0] <> "_y" <> ToString[y0] <> "_dxs" <> ToString[ $\delta x$ ] <> "_dys" <> ToString[ $\delta y$ ] <> ".png",
RedHexagonalC, ImageResolution → 800];
Export["GrafenoCDeformado_a" <> ToString[a] <> "_n" <> ToString[n] <> "_m" <> ToString[m] <>
"_kC" <> ToString[kC] <> "_r" <> ToString[r] <> "_gamma" <> ToString[ $\gamma$ ] <> "_A" <> ToString[A]
<> "_x" <> ToString[x0] <> "_y" <> ToString[y0] <> "_dxs" <> ToString[ $\delta x$ ] <> "_dys" <> ToString[ $\delta y$ ]
<> ".png", RedHexagonalCD, ImageResolution → 800];

```

Como el nuevo programa funciona igual que el programa Deformación de una red de grafeno en 2D.nb, solo se va a explicar la parte nueva.

La red rectangular es resultado de recortar la red original en forma de rombo. Para hacer esto, se tuvo que tener en cuenta las posiciones de los átomos de la red original. Se debe conocer las coordenadas en x de los átomos en la extremidad izquierda y derecha, y también las coordenadas de y de los átomos en la extremidad inferior y superior de la red original. Sabiendo el valor de estas coordenadas se pudo remover de la lista de las posiciones de los átomos todos aquellos cuyas coordenadas no estuvieran dentro de ese rango. Los valores de esas coordenadas no pueden ser un número fijo, sino que deben variar conforme aumenta el tamaño de la red. Se pudo expresar estas posiciones en función de los parámetros a y n que el usuario especificó. Recuerde que el programa solicita al usuario dos parámetros n y m para la construcción de la red, pero en este nuevo programa se hace que $m = n$ para simplificar la construcción de la red rectangular. En seguida se muestran los rangos en x y en y que deben satisfacer las coordenadas de los átomos para poder permanecer en la red rectangular cuando se hace el recorte de la red original:

$$\frac{3}{2}(1-n)l < x < -\frac{3}{2}(1-n)l + 2l, \quad (\text{A.6})$$

$$(-n+1)a < y < (n-1)a. \quad (\text{A.7})$$

Lo que ahora sigue en el programa es exactamente lo mismo que se ha explicado anteriormente. El usuario ingresa el valor de los parámetros para la deformación, y luego se aplican las ecuaciones (3.1) y (3.2) para

deformar la red rectangular. Se muestran las imágenes de la redes sin y con deformación y se exportan todos los parámetros para poder usarlos en el programa que determina el eigensistema de la red.

Eigensistema de dos redes asimétricas de grafeno.nb

```
a = Input["Longitud de la apotema"];
n = Input["Número de átomos a lo largo de la vertical mayor"];
l = N[ $\frac{2}{\sqrt{3}}$  a]; (* Longitud de una lado de un hexágono *)
r = Input["Radio mínimo de interacción"];
 $\gamma$  = 5; (* factor de decaimiento *)
A = 1; (* amplitud *)
 $\delta x$  = 0.8; (* deformación en x de los programas pasados *)
d =  $\delta x * l$ ; (* la segunda red se moverá en secciones de esta distancia *)
ps = 0.01; (* tamaño de los puntos en las gráficas *)
```

```
Print["a = ", a]
Print["n = ", n]
Print["k = ", 20(2n-1)]
Print["r = ", r]
Print[" $\gamma$  = ",  $\gamma$ ]
Print["A = ", A]
Print[" $\delta x$  = ",  $\delta x$ ]
Print["d = ", d]
```

(* En esta parte se crea la red de la derecha, R. A denota la vertical mayor y B la vertical menor de las cadenas. *)

```
PosA1R = {}; (* puntos de A1R *)
PosB1R = {}; (* puntos de B1R *)
PosA2R = {}; (* puntos de A2R *)
PosB2R = {}; (* puntos de B2R *)
PosA3R = {}; (* puntos de A3R *)
PosB3R = {}; (* puntos de B3R *)
PosA4R = {}; (* puntos de A4R *)
PosB4R = {}; (* puntos de B4R *)
PosA5R = {}; (* puntos de A5R *)
PosB5R = {}; (* puntos de B5R *)
PosA6R = {}; (* puntos de A6R *)
PosB6R = {}; (* puntos de B6R *)
PosA7R = {}; (* puntos de A7R *)
PosB7R = {}; (* puntos de B7R *)
PosA8R = {}; (* puntos de A8R *)
PosB8R = {}; (* puntos de B8R *)
PosA9R = {}; (* puntos de A9R *)
PosB9R = {}; (* puntos de B9R *)
```

```
A1Ri = {0, (n-1)a}; (* punto inicial de A1R *)
B1Ri = {1/2, (n-2)a}; (* punto inicial de B1R *)
A2Ri = {2l, (n-1)a}; (* punto inicial de A2R *)
B2Ri = {3l/2, (n-2)a}; (* punto inicial de B2R *)
A3Ri = {3l, (n-1)a}; (* punto inicial de A3R *)
B3Ri = {7l/2, (n-2)a}; (* punto inicial de B3R *)
A4Ri = {5, (n-1)a}; (* punto inicial de A4R *)
B4Ri = {9l/2, (n-2)a}; (* punto inicial de B4R *)
A5Ri = {6l, (n-1)a}; (* punto inicial de A5R *)
```

B5Ri = {13l/2, (n-2)a}; (* punto inicial de B5R *)
 A6Ri = {8l, (n-1)a}; (* punto inicial de A6R *)
 B6Ri = {15l/2, (n-2)a}; (* punto inicial de B6R *)
 A7Ri = {9l, (n-1)a}; (* punto inicial de A7R *)
 B7Ri = {19l/2, (n-2)a}; (* punto inicial de B7R *)
 A8Ri = {11l, (n-1)a}; (* punto inicial de A8R *)
 B8Ri = {21l/2, (n-2)a}; (* punto inicial de B8R *)
 A9Ri = {12l, (n-1)a}; (* punto inicial de A9R *)
 B9Ri = {25l/2, (n-2)a}; (* punto inicial de B9R *)

For[j = 0, j ≤ n-1, j++, AppendTo[PosA1R, {A1Ri[[1]], A1Ri[[2]] - j2a}]]
 For[j = 0, j ≤ n-2, j++, AppendTo[PosB1R, {B1Ri[[1]], B1Ri[[2]] - j2a}]]
 For[j = 0, j ≤ n-1, j++, AppendTo[PosA2R, {A2Ri[[1]], A2Ri[[2]] - j2a}]]
 For[j = 0, j ≤ n-2, j++, AppendTo[PosB2R, {B2Ri[[1]], B2Ri[[2]] - j2a}]]
 For[j = 0, j ≤ n-1, j++, AppendTo[PosA3R, {A3Ri[[1]], A3Ri[[2]] - j2a}]]
 For[j = 0, j ≤ n-2, j++, AppendTo[PosB3R, {B3Ri[[1]], B3Ri[[2]] - j2a}]]
 For[j = 0, j ≤ n-1, j++, AppendTo[PosA4R, {A4Ri[[1]], A4Ri[[2]] - j2a}]]
 For[j = 0, j ≤ n-2, j++, AppendTo[PosB4R, {B4Ri[[1]], B4Ri[[2]] - j2a}]]
 For[j = 0, j ≤ n-1, j++, AppendTo[PosA5R, {A5Ri[[1]], A5Ri[[2]] - j2a}]]
 For[j = 0, j ≤ n-2, j++, AppendTo[PosB5R, {B5Ri[[1]], B5Ri[[2]] - j2a}]]
 For[j = 0, j ≤ n-1, j++, AppendTo[PosA6R, {A6Ri[[1]], A6Ri[[2]] - j2a}]]
 For[j = 0, j ≤ n-2, j++, AppendTo[PosB6R, {B6Ri[[1]], B6Ri[[2]] - j2a}]]
 For[j = 0, j ≤ n-1, j++, AppendTo[PosA7R, {A7Ri[[1]], A7Ri[[2]] - j2a}]]
 For[j = 0, j ≤ n-2, j++, AppendTo[PosB7R, {B7Ri[[1]], B7Ri[[2]] - j2a}]]
 For[j = 0, j ≤ n-1, j++, AppendTo[PosA8R, {A8Ri[[1]], A8Ri[[2]] - j2a}]]
 For[j = 0, j ≤ n-2, j++, AppendTo[PosB8R, {B8Ri[[1]], B8Ri[[2]] - j2a}]]
 For[j = 0, j ≤ n-1, j++, AppendTo[Pos91R, {A9Ri[[1]], A9Ri[[2]] - j2a}]]
 For[j = 0, j ≤ n-2, j++, AppendTo[PosB9R, {B9Ri[[1]], B9Ri[[2]] - j2a}]]

xA1L = Table[-l - i, {i, 0, $\frac{3d}{2}, \frac{d}{8}$ }; (* posiciones en x de A1L *)
 xB1L = Table[- $\frac{3l}{2}$ - i, {i, 0, $\frac{3d}{2}, \frac{d}{8}$ }; (* posiciones en x de B1L *)
 xA2L = Table[-3l - i, {i, 0, $\frac{3d}{2}, \frac{d}{8}$ }; (* posiciones en x de A2L *)
 xB2L = Table[- $\frac{5l}{2}$ - i, {i, 0, $\frac{3d}{2}, \frac{d}{8}$ }; (* posiciones en x de B2L *)
 xA3L = Table[-4l - i, {i, 0, $\frac{3d}{2}, \frac{d}{8}$ }; (* posiciones en x de A3L *)
 xB3L = Table[- $\frac{9l}{2}$ - i, {i, 0, $\frac{3d}{2}, \frac{d}{8}$ }; (* posiciones en x de B3L *)
 xA4L = Table[-6l - i, {i, 0, $\frac{3d}{2}, \frac{d}{8}$ }; (* posiciones en x de A4L *)
 xB4L = Table[- $\frac{11l}{2}$ - i, {i, 0, $\frac{3d}{2}, \frac{d}{8}$ }; (* posiciones en x de B4L *)
 xA5L = Table[-7l - i, {i, 0, $\frac{3d}{2}, \frac{d}{8}$ }; (* posiciones en x de A5L *)
 xB5L = Table[- $\frac{15l}{2}$ - i, {i, 0, $\frac{3d}{2}, \frac{d}{8}$ }; (* posiciones en x de B5L *)
 xA6L = Table[-9l - i, {i, 0, $\frac{3d}{2}, \frac{d}{8}$ }; (* posiciones en x de A6L *)
 xB6L = Table[- $\frac{17l}{2}$ - i, {i, 0, $\frac{3d}{2}, \frac{d}{8}$ }; (* posiciones en x de B6L *)
 xA7L = Table[-10l - i, {i, 0, $\frac{3d}{2}, \frac{d}{8}$ }; (* posiciones en x de A7L *)
 xB7L = Table[- $\frac{21l}{2}$ - i, {i, 0, $\frac{3d}{2}, \frac{d}{8}$ }; (* posiciones en x de B7L *)
 xA8L = Table[-12l - i, {i, 0, $\frac{3d}{2}, \frac{d}{8}$ }; (* posiciones en x de A8L *)
 xB8L = Table[- $\frac{23l}{2}$ - i, {i, 0, $\frac{3d}{2}, \frac{d}{8}$ }; (* posiciones en x de B8L *)
 xA9L = Table[-13l - i, {i, 0, $\frac{3d}{2}, \frac{d}{8}$ }; (* posiciones en x de A9L *)
 xB9L = Table[- $\frac{27l}{2}$ - i, {i, 0, $\frac{3d}{2}, \frac{d}{8}$ }; (* posiciones en x de B9L *)
 xA10L = Table[-15l - i, {i, 0, $\frac{3d}{2}, \frac{d}{8}$ }; (* posiciones en x de A10L *)
 xB10L = Table[- $\frac{29l}{2}$ - i, {i, 0, $\frac{3d}{2}, \frac{d}{8}$ }; (* posiciones en x de B10L *)
 xA11L = Table[-16l - i, {i, 0, $\frac{3d}{2}, \frac{d}{8}$ }; (* posiciones en x de A11L *)
 xB11L = Table[- $\frac{33l}{2}$ - i, {i, 0, $\frac{3d}{2}, \frac{d}{8}$ }; (* posiciones en x de B11L *)

For[s = 1, s ≤ Length[xA1L], s++,

```

PosA1L = {}; (* puntos de A1L *)
PosB1L = {}; (* puntos de B1L *)
PosA2L = {}; (* puntos de A2L *)
PosB2L = {}; (* puntos de B2L *)
PosA3L = {}; (* puntos de A3L *)
PosB3L = {}; (* puntos de B3L *)
PosA4L = {}; (* puntos de A4L *)
PosB4L = {}; (* puntos de B4L *)
PosA5L = {}; (* puntos de A5L *)
PosB5L = {}; (* puntos de B5L *)
PosA6L = {}; (* puntos de A6L *)
PosB6L = {}; (* puntos de B6L *)
PosA7L = {}; (* puntos de A7L *)
PosB7L = {}; (* puntos de B7L *)
PosA8L = {}; (* puntos de A8L *)
PosB8L = {}; (* puntos de B8L *)
PosA9L = {}; (* puntos de A9L *)
PosB9L = {}; (* puntos de B9L *)
PosA10L = {}; (* puntos de A10L *)
PosB10L = {}; (* puntos de B10L *)
PosA11L = {}; (* puntos de A11L *)
PosB11L = {}; (* puntos de B11L *)

```

```

A1Li = {xA1L[[s]], (n-1)a}; (* punto inicial A1L *)
B1Li = {xB1L[[s]], (n-2)a}; (* punto inicial B1L *)
A2Li = {xA2L[[s]], (n-1)a}; (* punto inicial A2L *)
B2Li = {xB2L[[s]], (n-2)a}; (* punto inicial B2L *)
A3Li = {xA3L[[s]], (n-1)a}; (* punto inicial A3L *)
B3Li = {xB3L[[s]], (n-2)a}; (* punto inicial B3L *)
A4Li = {xA4L[[s]], (n-1)a}; (* punto inicial A4L *)
B4Li = {xB4L[[s]], (n-2)a}; (* punto inicial B4L *)
A5Li = {xA5L[[s]], (n-1)a}; (* punto inicial A5L *)
B5Li = {xB5L[[s]], (n-2)a}; (* punto inicial B5L *)
A6Li = {xA6L[[s]], (n-1)a}; (* punto inicial A6L *)
B6Li = {xB6L[[s]], (n-2)a}; (* punto inicial B6L *)
A7Li = {xA7L[[s]], (n-1)a}; (* punto inicial A7L *)
B7Li = {xB7L[[s]], (n-2)a}; (* punto inicial B7L *)
A8Li = {xA8L[[s]], (n-1)a}; (* punto inicial A8L *)
B8Li = {xB8L[[s]], (n-2)a}; (* punto inicial B8L *)
A9Li = {xA9L[[s]], (n-1)a}; (* punto inicial A9L *)
B9Li = {xB9L[[s]], (n-2)a}; (* punto inicial B9L *)
A10Li = {xA10L[[s]], (n-1)a}; (* punto inicial A10L *)
B10Li = {xB10L[[s]], (n-2)a}; (* punto inicial B10L *)
A11Li = {xA11L[[s]], (n-1)a}; (* punto inicial A11L *)
B11Li = {xB11L[[s]], (n-2)a}; (* punto inicial B11L *)

```

```

For[j = 0, j ≤ n-1, j++, AppendTo[PosA1L, {A1Li[[1]], A1Li[[2]] - j2a}]
For[j = 0, j ≤ n-2, j++, AppendTo[PosB1L, {B1Li[[1]], B1Li[[2]] - j2a}]
For[j = 0, j ≤ n-1, j++, AppendTo[PosA2L, {A2Li[[1]], A2Li[[2]] - j2a}]
For[j = 0, j ≤ n-2, j++, AppendTo[PosB2L, {B2Li[[1]], B2Li[[2]] - j2a}]
For[j = 0, j ≤ n-1, j++, AppendTo[PosA3L, {A3Li[[1]], A3Li[[2]] - j2a}]
For[j = 0, j ≤ n-2, j++, AppendTo[PosB3L, {B3Li[[1]], B3Li[[2]] - j2a}]
For[j = 0, j ≤ n-1, j++, AppendTo[PosA4L, {A4Li[[1]], A4Li[[2]] - j2a}]
For[j = 0, j ≤ n-2, j++, AppendTo[PosB4L, {B4Li[[1]], B4Li[[2]] - j2a}]

```

```

For[j = 0, j ≤ n-1, j++, AppendTo[PosA5L, {A5Li[[1]], A5Li[[2]] - j2a}]]
For[j = 0, j ≤ n-2, j++, AppendTo[PosB5L, {B5Li[[1]], B5Li[[2]] - j2a}]]
For[j = 0, j ≤ n-1, j++, AppendTo[PosA6L, {A6Li[[1]], A6Li[[2]] - j2a}]]
For[j = 0, j ≤ n-2, j++, AppendTo[PosB6L, {B6Li[[1]], B6Li[[2]] - j2a}]]
For[j = 0, j ≤ n-1, j++, AppendTo[PosA7L, {A7Li[[1]], A7Li[[2]] - j2a}]]
For[j = 0, j ≤ n-2, j++, AppendTo[PosB7L, {B7Li[[1]], B7Li[[2]] - j2a}]]
For[j = 0, j ≤ n-1, j++, AppendTo[PosA8L, {A8Li[[1]], A8Li[[2]] - j2a}]]
For[j = 0, j ≤ n-2, j++, AppendTo[PosB8L, {B8Li[[1]], B8Li[[2]] - j2a}]]
For[j = 0, j ≤ n-1, j++, AppendTo[PosA9L, {A9Li[[1]], A9Li[[2]] - j2a}]]
For[j = 0, j ≤ n-2, j++, AppendTo[PosB9L, {B9Li[[1]], B9Li[[2]] - j2a}]]
For[j = 0, j ≤ n-1, j++, AppendTo[PosA10L, {A10Li[[1]], A10Li[[2]] - j2a}]]
For[j = 0, j ≤ n-2, j++, AppendTo[PosB10L, {B10Li[[1]], B10Li[[2]] - j2a}]]
For[j = 0, j ≤ n-1, j++, AppendTo[PosA11L, {A11Li[[1]], A11Li[[2]] - j2a}]]
For[j = 0, j ≤ n-2, j++, AppendTo[PosB11L, {B11Li[[1]], B11Li[[2]] - j2a}]]

```

(* Juntando las posiciones de los átomos en las dos redes. *)

```

PosC = Join[PosA1R, PosB1R, PosA2R, PosB2R, PosA3R, PosB3R, PosA4R, PosB4R, PosA5R, PosB5R,
PosA6R, PosB6R, PosA7R, PosB7R, PosA8R, PosB8R, PosA9R, PosB9R, PosA1L, PosB1L, PosA2L, PosB2L,
PosA3L, PosB3L, PosA4L, PosB4L, PosA5L, PosB5L, PosA6L, PosB6L, PosA7L, PosB7L, PosA8L, PosB8L,
PosA9L, PosB9L, PosA10L, PosB10L, PosA11L, PosB11L];
PosC = Sort[PosC #1[[2]] > #2[[2]]&];
k = Length[PosC];

```

```

TableForm[PosC, TableHeadings → {None, {"x", "y"}}, TableAlignments → Center];
GR = ListPlot[{{PosA1R, PosB1R, PosB2R, PosA2R, PosA3R, PosB3R, PosB4R, PosA4R, PosA5R, PosB5R,
PosB6R, PosA6R, PosA7R, PosB7R, PosB8R, PosA8R, PosA9R, PosB9R}, PlotStyle → {{PointSize[ps],
Blue}, {PointSize[ps], Red}, {PointSize[ps], Blue}, {PointSize[ps], Red}, {PointSize[ps], Blue}, {PointSize[ps],
Red}, {PointSize[ps], Blue}, {PointSize[ps], Red}, {PointSize[ps], Blue}, {PointSize[ps], Red}, {PointSize[ps],
Blue}, {PointSize[ps], Red}, {PointSize[ps], Blue}, {PointSize[ps], Red}, {PointSize[ps], Blue}, {PointSize[ps],
Red}, {PointSize[ps], Blue}, {PointSize[ps], Red}}];
GL = ListPlot[{{PosA1L, PosB1L, PosB2L, PosA2L, PosA3L, PosB3L, PosB4L, PosA4L, PosA5L, PosB5L,
PosB6L, PosA6L, PosA7L, PosB7L, PosB8L, PosA8L, PosA9L, PosB9L, PosB10L, PosA10L, PosA11L,
PosB11L}, PlotStyle → {{PointSize[ps], Red}, {PointSize[ps], Blue}, {PointSize[ps], Red}, {PointSize[ps],
Blue}, {PointSize[ps], Red}, {PointSize[ps], Blue}, {PointSize[ps], Red}, {PointSize[ps], Blue}, {PointSize[ps],
Red}, {PointSize[ps], Blue}, {PointSize[ps], Red}, {PointSize[ps], Blue}, {PointSize[ps], Red}, {PointSize[ps],
Blue}, {PointSize[ps], Red}, {PointSize[ps], Blue}, {PointSize[ps], Red}, {PointSize[ps], Blue}, {PointSize[ps],
Red}, {PointSize[ps], Blue}, {PointSize[ps], Red}, {PointSize[ps], Blue}}];
GC = Graphics[Table[{Gray, Circle[PosC[[i]], r]}, {i, k}], Axes → True, AxesLabel → {"x", "y"}, PlotRange
→ All, PlotLabel → "Dos redes asimétricas de grafeno, i=" <> ToString[s];
Grafeno2Redes = Show[GC, GR, GL, Frame → True];

```

```

Dis = Table[((PosC[[i, 1]] - PosC[[j, 1]])2 + (PosC[[i, 2]] - PosC[[j, 2]])2)1/2, {i, k}, {j, k}];
H = Table[0, {i, k}, {j, k}];

```

```

For[i = 1, i ≤ k, i++,
For[j = 1, j ≤ k, j++,
If[RegionMember[Disk[{PosC[[j, 1]], PosC[[j, 2]]}, r], {PosC[[i, 1]], PosC[[i, 2]]}], H[[i, j]] = N [A*Exp[-γ*Dis[[i,
j]]]]]]]]];

```

```

For[i=1, i ≤ k, i++, H[[i, j]] = 0];

```

```

ES = Eigensystem[H]; (* eigensistema de H *)
EV = Sort[ES[[1]], Greater]; (* eigenvalores de H ordenados de mayor a menor *)

```

```

CEV = {}; (* inicializando las coordenadas de las gráficas de eigenvalores *)

```

```

For[i = 0, i ≤ Length[EV]-1, i++, AppendTo[CEV, {i, EV[[i+1]]}]];
EVG = ListPlot[CEV, AxesLabel → {"x", "y"}, Frame → True, PlotRange → All, PlotLabel → "Eigenvalores de dos redes asimétricas de grafeno, i=" <> ToString[s]];

Export["Grafeno2RedesAs_a" <> ToString[a] <> "_n" <> ToString[n] <> "_k" <> ToString[k] <> "_r" <> ToString[r] <> "_gamma" <> ToString[γ] <> "_A" <> ToString[A] <> "_dx" <> ToString[δx] <> "_d" <> ToString[d] <> "_i" <> ToString[s] <> "_Dmax" <> ToString[3d/2] <> "_iD" <> ToString[d/8] <> "_DC" <> ToString[xA1L[[s]]] <> ".png", Grafeno2Redes, ImageResolution → 300];
Export["EVGrafeno2RedesAs_a" <> ToString[a] <> "_n" <> ToString[n] <> "_k" <> ToString[k] <> "_r" <> ToString[r] <> "_gamma" <> ToString[γ] <> "_A" <> ToString[A] <> "_dx" <> ToString[δx] <> "_d" <> ToString[d] <> "_i" <> ToString[s] <> "_Dmax" <> ToString[3d/2] <> "_iD" <> ToString[d/8] <> "_DC" <> ToString[xA1L[[s]]] <> ".png", EVG, ImageResolution → 300];

For[i = 1, i ≤ k, i++,
PosAux = {};
PosAux = PosC;

For[j = 1, j ≤ k, j++, AppendTo[PosAux[[j]], ES[[2, i, j]]];

EVec2Ds1 = Graphics[Table[{ColorData["Rainbow"][Abs[PosAux[[p,3]]/Abs[ Max[PosAux[[All,3]]]]], Disk[{PosAux[[p,1]], PosAux[[p,2]], 0.5}], {p, Length[PosAux]}], Axes → True, Frame → True, AxesLabel → {"x", "y"}];
EVec2Ds2 = Graphics[Table[Text[Style[If[Sign[[PosAux[[p,3]]] == 1, "+", "-"], FontSize → 3], {PosAux[[p,1]], PosAux[[p,2]]}], {p, Length[PosAux]}]];
EVec2D = Show[EVec2Ds1, EVec2Ds2];
Export["EVecGrafeno2RedesAs" <> ToString[i] <> "_N" <> ToString[AccountingForm[ES[[1,i], 6]] <> "_a" <> ToString[a] <> "_n" <> ToString[n] <> "_k" <> ToString[k] <> "_r" <> ToString[r] <> "_gamma" <> ToString[γ] <> "_A" <> ToString[A] <> "_dx" <> ToString[δx] <> "_d" <> ToString[d] <> "_i" <> ToString[s] <> "_Dmax" <> ToString[3d/2] <> "_iD" <> ToString[d/8] <> "_DC" <> ToString[xA1L[[s]]] <> ".png", EVec2D, ImageResolution → 300];

Clear[PosAux]
];
]

```

Bibliografía

- [1] Novoselov, K. S., Geim, A. K., Morozov, S. V., Jiang, D., Zhang, Y., Dubonos, S. V., ... & Firzov, A. A. (2004) Electric field effect in atomically thin carbon films. *Science*, *306*(5696), 666-669.
- [2] Berger, C., Song, Z., Li, T., Li, X., Ogbazghi, A. Y., Feng, R., ... & De Heer, W. A. (2004). Ultrathin epitaxial graphite: 2D electron gas properties and a route toward graphene-based nanoelectronics. *The Journal of Physical Chemistry B*, *108*(52), 19912-19916.
- [3] Berger, C., Song, Z., Li, X., Wu, X., Brown, N., Naud, C., ... & Conrad, E. H. (2006). Electronic confinement and coherence in patterned epitaxial graphene. *Science*, *312*(5777), 1191-1196.
- [4] Ribeiro, R. M., Pereira, V. M., Peres, N. M. R., Briddon, P. R., & Neto, A. C. (2009). Strained graphene: tight-binding and density functional calculations. *New Journal of Physics*, *11*(11), 115002.
- [5] Geim, A. K. (2009). Graphene: status and prospects. *Science*, *324*(5934), 1530-1534.
- [6] Huang, X., Yin, Z., Wu, S., Qi, X., He, Q., Zhang, Q., ... & Zhang, H. (2011). Graphene-based materials: synthesis, characterization, properties, and applications. *Small*, *7*(14), 1876-1902.
- [7] Li, X., Wang, X., Zhang, L., Lee, S., & Dai, H. (2008). Chemically derived, ultrasmooth graphene nanoribbon semiconductors. *Science*, *319*(5867), 1229-1232.
- [8] Ci, L., Xu, Z., Wang, L., Gao, W., Ding, F., Kelly, K. F., ... & Ajayan, P. M. (2008). Controlled nanocutting of graphene. *Nano Research*, *1*(2), 116-122.
- [9] Tong, G. P. (2013). Electronic Properties of Deformed Graphene Nanoribbons. *New Progress on Graphene Research*, 81.
- [10] Choi, S. M., Jhi, S. H., & Son, Y. W. (2010). Effects of strain on electronic properties of graphene. *Physical Review B*, *81*(8), 081407.
- [11] Xie, Y. E., Chen, Y. P., Sun, L. Z., Zhang, K. W., & Zhong, J. (2009). The effect of corner form on electron transport of L-shaped graphene nanoribbons. *Physica B: Condensed Matter*, *404*(12-13), 1771-1775.
- [12] Recher, P., Nilsson, J., Burkard, G., & Trauzettel, B. (2009). Bound states and magnetic field induced valley splitting in gate-tunable graphene quantum dots. *Physical Review B*, *79*(8), 085407.
- [13] E. Y. Tsymbal, University of Nebraska-Lincoln, Department of Physics and Astronomy, Physics 927, Introduction to Solid State Physics, Lecture Notes of Section 11: Methods for calculating band structure. physics.unl.edu/tsymbal/teaching/SSP-927/Section%2011_Methods_for_calculating_band_structure.pdf
- [14] Burns, G. (1996) *Solid State Physics* Boston: Academic Press. p. 191.
- [15] Neil W. Ashcroft, N. David Mermin, *Solid State Physics* (1976) p. 133-134.
- [16] Neto, A. C., Guinea, F., Peres, N. M., Novoselov, K. S., & Geim, A. K. (2009). The electronic properties of graphene. *Reviews of modern physics*, *81*(1), 109.

- [17] Mervyn Roy, University of Leicester, Department of Physics and Astronomy, The Tight Binding Method. physics.rutgers.edu/~eandrei/chengdu/reading/tight-binding.pdf
- [18] Reich, S., Maultzsch, J., Thomsen, C., & Ordejon, P. (2002). Tight-binding description of graphene. *Physical Review B*, 66(3), 035412.