



UNIVERSIDAD DE CIENCIAS Y ARTES DE CHIAPAS

INSTITUTO DE INVESTIGACIÓN E INNOVACIÓN EN
ENERGÍAS RENOVABLES

TESIS

PROPIEDADES ELECTRÓNICAS EN MATERIALES CURVOS DE CARBONO

QUE PARA OBTENER EL GRADO DE:

DOCTOR EN MATERIALES Y SISTEMAS ENERGÉTICOS RENOVABLES

PRESENTA

VÍCTOR ANDRÉS GONZÁLEZ DOMÍNGUEZ

DIRECTORES

DR. PAVEL CASTRO VILLARREAL
DR. JUAN ANDRÉS REYES NAVA

Tuxtla Gutiérrez, Chiapas

Febrero de 2024.



UNIVERSIDAD DE CIENCIAS Y ARTES DE CHIAPAS
SECRETARÍA ACADÉMICA
DIRECCIÓN DE INVESTIGACIÓN Y POSGRADO

Tuxtla Gutiérrez, Chiapas a 13 de febrero de 2024

Oficio No. SA/DIP/0116/2024

Asunto: Autorización de Impresión de Tesis

C. Víctor Andrés González Domínguez

CVU: 736886

Candidato al Grado de Doctor en Materiales y Sistemas Energéticos Renovables

Instituto de Investigación e Innovación en Energías Renovables

UNICACH

Presente

Con fundamento en la **opinión favorable** emitida por escrito por la Comisión Revisora que analizó el trabajo terminal presentado por usted, denominado **Propiedades Electrónicas en Materiales Curvos de Carbono** cuyos Directores de tesis son el Dr. Pavel Castro Villarreal (CVU: 92896) y Dr. Juan Andrés Reyes Nava (CVU: 77112) quienes avalan el cumplimiento de los criterios metodológicos y de contenido; esta Dirección a mi cargo autoriza la impresión del documento en cita, para la defensa oral del mismo, en el examen que habrá de sustentar para obtener el **Grado de Doctor en Materiales y Sistemas Energéticos Renovables**.

Es imprescindible observar las características normativas que debe guardar el documento impreso, así como realizar la entrega en esta Dirección de un ejemplar empastado.

Atentamente

“Por la Cultura de mi Raza”

Dra. Carolina Orantes García
Directora



C.c.p. Dr. Héber Vilchis Bravo, Encargado de la Dirección, Instituto de Investigación e Innovación en Energías Renovables UNICACH. Para su conocimiento.

Dra. Laura Elena Vereza Valladares, Coordinadora de Posgrado, Instituto de Investigación e Innovación en Energías Renovables, UNICACH. Para su conocimiento.
Archivo/minutario.

RJAG/COG/igp/gtr

2024 Año de Felipe Carrillo Puerto
BENEMÉRITO DEL PROLETARIADO,
REVOLUCIONARIO Y DEFENSOR DEL MAYAB.



Dirección de Investigación y Posgrado
Libramiento Norte Poniente 1550 C.P. 29039
Tuxtla Gutiérrez, Chiapas, México
Teléfono: (961) 61 70440 Ext: 4360
investigacionyposgrado@unicach.mx

Índice general

Agradecimientos	9
Resumen	10
Parte I.- Introducción, Motivaciones y Fundamentos	11
1. Introducción	12
1.1. Antecedentes	12
1.2. Planteamiento del problema	18
1.2.1. Hipótesis	18
1.3. Objetivos	19
1.3.1. Objetivo general	19
1.3.2. Objetivo específicos	19
1.4. Justificación	19
2. Fundamentos Teóricos	21
2.1. Nociones básicas de geometría y topología	21
2.1.1. El concepto de curvatura	21
2.1.2. Variedades de Riemann	25
2.2. Superficies mínimas	26
2.2.1. Catenoide y Helicoide	28

<i>ÍNDICE GENERAL</i>	3
2.2.2. Superficie de Enneper	31
2.2.3. Superficies de Bour	33
2.3. Teoría de Dirac en espacio curvo	34
2.4. Teoría del Funcional de la Densidad	36
2.4.1. Ecuación de Schrödinger	36
2.4.2. Aproximación Born-Oppenheimer	37
2.4.3. Principio variacional	38
2.4.4. La aproximación de Hartree-Fock	39
3. Grafeno: una revisión a sus propiedades electrónicas	42
3.1. Estructura cristalina	42
3.2. Optimización geométrica con VASP	44
3.3. Densidad de estados (DOS)	47
3.4. Estructura de bandas	50
Parte II.- Resultados	53
4. Grafeno Catenoidal	54
4.1. Defectos en Nanocarbonos sp^2	55
4.2. Estructura catenoidal	57
4.3. Optimización geométrica con VASP	58
4.4. Densidad de estados (DOS)	61
5. Estados de Dirac en materiales curvos de carbono	65
5.1. Preliminares geométricos	65
5.1.1. Coordenadas naturales	66
5.1.2. Coordenadas polares	69
5.2. Ecuación de Dirac en la representación de WE	71
5.2.1. Superficie catenoidal	72
5.3. Ecuación de Dirac en la representación polar	73

5.3.1. Superficies mínimas B_n	74
5.4. Estados asintóticos de Dirac sobre las superficies de Bour . . .	81
6. Dispersión análoga en las superficies de Bour	84
6.1. Ecuación de Lippmann-Schwinger	84
6.1.1. Aproximación de Born	86
6.1.2. Aproximación Born de orden superior	88
6.2. Transmisión de onda de Dirac	92
6.2.1. Función de densidad de probabilidad J^0	93
6.2.2. Transmitancia y conductancia	94
7. Conclusiones	104
A. Programa VASP	108
A.1. Archivos de entrada	108
A.2. Archivos de salida	111
B. Red de Bravais	114
C. Cálculo de la función de Green	116
D. Cálculo de la aproximación de Born de orden superior	117
D.1. Cálculo de los términos $\tau_{n+1}(p)$	117
D.2. Cálculo de los términos $C_{n+1}(x)$	121
E. Parametrización explícita	122
Referencias	123
Anexo	132

Índice de figuras

1.1. Imagen de grafeno.	12
1.2. Propiedades mecánicas, térmicas y eléctricas del grafeno. . .	13
1.3. Grafeno y otros alótropos del carbono	14
1.4. Una estructura rugosa de grafeno.	15
1.5. Estructuras grafiticas curvadas	16
1.6. Molécula de fullereno esférico C_{60}	17
2.1. Geometrías 2D en 3D	24
2.2. Superficie catenoidal y helicoidal	28
2.3. Vista de un catenoide.	29
2.4. Superficie de Enneper	32
3.1. Estructura cristalina del grafeno y espacio recíproco	43
3.2. Archivo INCAR para la optimización del grafeno	44
3.3. Archivo POSCAR de la estructura cristalina del grafeno . . .	45
3.4. Parámetros del archivo KPOINT del grafeno	45
3.5. Archivo CONTCAR de la estructura cristalina del grafeno . .	46
3.6. Celda unitaria optimizada del grafeno	47
3.7. Archivo INCAR para el cálculo SC	48
3.8. Densidad de carga electrónica del grafeno	49

3.9. Archivo INCAR para el DOS del grafeno	49
3.10. DOS del grafeno	50
3.11. Archivo KPOINTS de la estructura de bandas del grafeno	51
3.12. Estructura de bandas del grafeno	51
4.1. Diagrama de generación de curvatura superficial	56
4.2. Generador SWNT	58
4.3. Grafeno catenoidal	59
4.4. Archivo INCAR para la optimización geométrica	59
4.5. Archivo POSCAR de la nanoestructura catenoidal	60
4.6. Archivo KPOINT de la nanoestructura catenoidal	60
4.7. Archivo CONTCAR de la nanoestructura catenoidal	61
4.8. Archivo INCAR para el cálculo SC	62
4.9. Densidad de carga electrónica del grafeno catenoidal	62
4.10. Archivo INCAR para el DOS del grafeno catenoidal	63
4.11. DOS del grafeno catenoidal	64
5.1. Gráfica de la curvatura gaussiana	76
5.2. Gráfica del potencial efectivo	78
6.1. Curvas de nivel	93
6.2. Gráfica de coeficientes de transmisión y reflexión correspon- diente a la geometría catenoidal/helicoidal.	97
6.3. Gráfica de coeficientes de transmisión y reflexión correspon- diente a la geometría B_1 -Bour.	99
6.4. Gráfica de la transformada de Fourier.	100
6.5. Gráfica de coeficientes de transmisión y reflexión correspon- diente a la geometría clásica de Enneper.	102
6.6. Gráfica de coeficientes de transmisión y reflexión correspon- diente a las geometrías $B_{n>2}$ -Bour.	103

A.1. Estructura del archivo POSCAR	109
A.2. Estructura del archivo POTCAR	110
A.3. Parámetros del archivo INCAR	111
A.4. Parámetros del archivo KPOINT	112
A.5. Estructura del archivo DOSCAR	113
B.1. Tipo de red de Bravais	115
D.1. Curvas de contorno Γ_1 y Γ_2	119

Nomenclatura

v_F	Velocidad de Fermi
H	Curvatura media
K	Curvatura gaussiana
κ	Curvatura principal
$g_{\mu\nu}$	Métrica
$\Gamma_{\mu\nu}^{\sigma}$	Símbolo de Christoffel
$R_{\alpha\nu\beta}^{\mu}$	Tensor de curvatura de Riemann
R_{ab}	Tensor de Ricci
γ^A	Matrices de Dirac
$e^{\alpha}_A(x)$	Vierbeins
ω_{α}^{AB}	Coefficiente de conexión espín
σ^a	Matrices de Pauli
\hat{H}	Operador Hamiltoniano
\mathcal{T}	Transmitancia
\mathcal{R}	Reflectancia
\mathcal{G}	Conductancia

Agradecimientos

Agradezco a la Universidad de Ciencias y Artes de Chiapas y al Instituto de Investigación e Innovación en Energías Renovables por darme la oportunidad de estudiar en sus instalaciones y desarrollar mi proyecto de investigación.

Al Consejo Nacional de Humanidades, Ciencias y Tecnologías por el apoyo financiero a lo largo de mi estudio de doctorado.

A mis directores de tesis; Dr. Pavel Castro Villarreal y Dr. Juan Andrés Reyes Nava, por haberme permitido trabajar con ustedes y por brindarme de sus conocimientos y motivaciones a lo largo de este proyecto.

A cada uno de mis revisores por todo el tiempo dedicado a las discusiones en torno a mi trabajo de investigación.

A mis padres y a mis hermanos que con su apoyo y consejos he logrado culminar esta etapa de mi vida, siempre apoyándome tanto en lo académico como personal y dándome la motivación para superar cada meta.

Resumen

El presente trabajo tiene por objetivo principal estudiar la propagación de los grados de libertad electrónicos con base en el modelo de Dirac sobre una hoja de grafeno curvada con la geometría de una superficie de Bour B_n ; como la catenoide o helicoide (B_0), la superficie clásica de Enneper (B_1), B_2 , entre otros. Como consecuencia de la geometría polar de B_n , se encuentra que la geometría de la superficie hace que los fermiones de Dirac se muevan como si estuvieran sujetos a un potencial externo acoplado a un término de espín-órbita. El potencial inducido por la geometría se interpreta como una barrera de potencial, que es asintóticamente cero. Además, el comportamiento de los estados asintóticos de Dirac y de los estados de dispersión se estudia mediante el formalismo de Lippmann-Schwinger. Se encuentra que para las superficies B_0 y B_1 , el fenómeno de transmisión total se da para valores de energía suficientemente grandes, mientras que para las superficies B_n , con $n \geq 2$, se muestra que hay un punto de energía E_K donde ocurre el tunelamiento de Klein, mientras que para los valores de energía $E \gg E_K$ se encuentra que la conductancia está completamente suprimida. También obtenemos una estructura estable de una hoja de grafeno con la geometría de un catenoide a partir de la herramienta computacional que implementa la teoría del funcional de la densidad a través del programa llamado VASP dando así los indicios de la existencia de estos materiales hipotéticos.

Parte I.- Introducción, Motivaciones y Fundamentos

Resumen

En este primer segmento de la tesis, el objetivo es introducirnos en el trabajo de investigación. En esta parte no solo se presenta el tema y su contexto, sino que también se justifica su importancia al exponer las motivaciones del estudio y establecer los objetivos que guiarán su desarrollo. Además, se abordan las bases y conceptos esenciales para ampliar la comprensión del tema y respaldar el enfoque de investigación.

Capítulo 1

Introducción

1.1. Antecedentes

El grafeno [ver Fig. 1.1] fue sintetizado en el año 2004 por Andre Geim y Konstantin Novoselov, investigadores de la Universidad de Manchester.

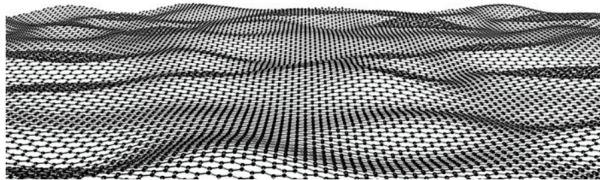


Figura 1.1 : Imagen de grafeno. Fuente [1].

La síntesis fue realizada de una manera muy sencilla con ayuda de una cinta adhesiva y grafito. Este trabajo les valió obtener el Premio Nobel de Física en el año 2010 [2]. Este hallazgo fue un parteaguas en la física del estado sólido debido a la bidimensionalidad del grafeno y a las propiedades mecánicas y electrónicas que posee que vuelven al grafeno un material tan atractivo, único y exótico [ver Fig. 1.2].

Entre las propiedades a destacar podemos mencionar las siguientes; en lo que respecta a sus propiedades térmicas, el grafeno posee una conductividad térmica extremadamente alta comparada con la de otros materiales tridimensionales. La conductividad térmica del grafeno oscila alrededor de 5×10^2 W/mK [3]. En cuanto a sus propiedades mecánicas, el grafeno puede ser deformado elásticamente hasta un 23% de su parámetro de red [4], siendo capaz de regresar a su posición inicial después de que la deformación deja de ser aplicada.

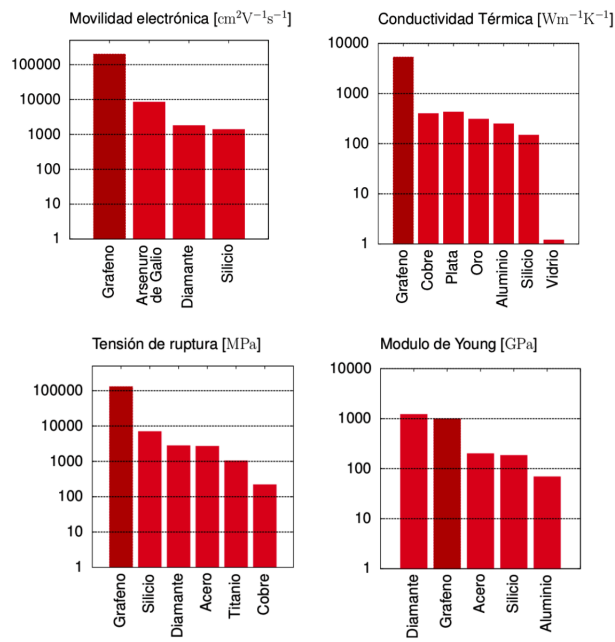


Figura 1.2: El grafeno y sus propiedades mecánicas, térmicas y eléctricas comparadas con otros materiales. Fuente [5].

Incluso es posible concebir al grafeno como materia prima de otros alótropos del carbono ya que puede plegarse para formar fullerenos [6, 7], enrollarse en nanotubos de carbono [8] y apilarse para formar grafito [ver Fig. 1.3].

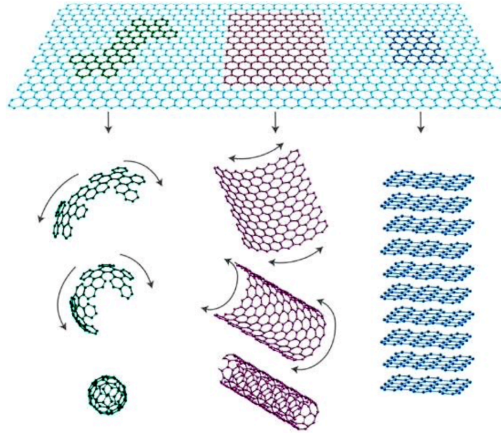


Figura 1.3: El grafeno es la materia prima de otros alótopos del carbono. Puede plegarse para formar fullerenos (0 D), enrollarse para formar nanotubos (1 D) o apilarse y formar grafito (3 D). Fuente [9].

El grafeno cuenta con una brecha energética de tamaño cero, es decir, el grafeno es un semimetal¹. Adicionalmente, la relación de dispersión del grafeno es lineal a bajas energías, en otras palabras, la banda de valencia y la banda de conducción se tocan en un punto formando un cono (Cono de Dirac) alrededor de ese punto, más aún, el punto en el que las bandas se tocan, coincide con el nivel de Fermi del grafeno. Esto implica que los electrones en grafeno se comportan como fermiones de Dirac sin masa, que en lugar de moverse a la velocidad de la luz se mueven a la velocidad de Fermi ($v_F \sim 10^6$ m/s). Este comportamiento fue demostrado experimentalmente por la observación de oscilaciones de la conductividad debido a un campo magnético externo (efecto de Shubnikov-de Haas) [10], y también se había predicho teóricamente cuando se demostró que la teoría del campo de Dirac

¹Un semimetal es un material en el cual las bandas de valencia y las bandas de conducción se superponen en una región muy pequeña, de tal manera que el nivel de Fermi cae en el punto medio de dicho traslape.

en dimensiones de espacio-tiempo 2+1 emerge del modelo de tight-binding² de Wallace en el régimen de baja energía (véanse [11] y [12]).

Es importante mencionar que, en realidad, una hoja de grafeno no muestra ni una perfecta horizontalidad ni una perfecta simetría hexagonal, es decir, no es totalmente plano, ya que cuenta con pequeñas corrugaciones. Desde el punto de vista estructural también podemos deformar la hoja de grafeno a partir de defectos topológicos, vacantes y/o dislocaciones, impurezas sin carbono e hibridaciones [ver Fig. 1.4].

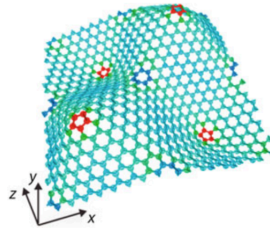


Figura 1.4: Una estructura rugosa de grafeno. Fue teóricamente diseñada a través de una distribución controlada de defectos topológicos. Fuente [13].

En consecuencia las corrugaciones y los defectos modifican las propiedades electrónicas en comparación al grafeno plano. De ahí que sea crucial tener un mejor entendimiento sobre la forma en la que éstos defectos modifican estas propiedades en el grafeno. Por ello, en años recientes, muchos trabajos de investigación se han enfocado en responder dicha pregunta usando la ecuación de Dirac como modelo natural para estudiar las propiedades electrónicas y uno de las conclusiones principales es la aparición de campos pseudomagnéticos y pseudoniveles de Landau en el grafeno a causa de dichos defectos [14–16]. Otras de las consecuencias a partir de este formalismo es

²Es un enfoque para calcular el transporte electrónico en sistemas bidimensionales usando como aproximación una base de funciones de onda basado en una combinación lineal de estas.

que se pudo comprender el efecto Hall cuántico [17], las predicciones de los fenómenos como el efecto túnel de Klein [18] y *zitterbewegung*³ [19].

Como se mencionó previamente se concibe al grafeno como materia prima para formar otras estructuras de carbono, sin embargo, una década antes de la llegada del innovador grafeno se planteaban estructuras hipotéticas de grafito con geometrías curvas [ver Fig. 1.5]; aquí asumían que las inserciones de defectos topológicos como los anillos de 5, 7 y 8 átomos de carbono eran permisibles (así como hexágonos) en hojas gráficas postulando una gran variedad de estructuras finitas e infinitas [20, 21]. En el planteamiento de estas estructuras es donde se acuñe el término de curvatura gaussiana⁴ positiva o negativa en la inserción de anillos pentagonales o heptagonales respectivamente.

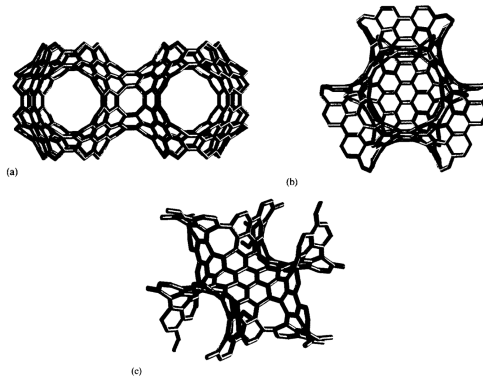


Figura 1.5: Posibles estructuras de grafito basadas en superficies mínimas periódicas curvadas por la introducción de heptágonos. (a) Superficie P; (b) Superficie D; (c) Superficie G. Fuente [21].

³Por su nombre en alemán.

⁴ver Capítulo 2.1.1

Para esta categoría de grafitos con curvaturas no positivas, en la actualidad se les conocen como Schwarzitas, en memoria del matemático H. A. Schwarz, quién desarrolló las primeras superficies mínimas periódicas. Los cálculos energéticos realizados en las Schwarzitas muestran que son más estables que C_{60} [22–24] alótropo de carbono sintetizado por primera vez en 1985 por Harold Kroto, Robert Curl y Richard Smalley, lo que les valió la concesión del Premio Nobel de Química en 1996.

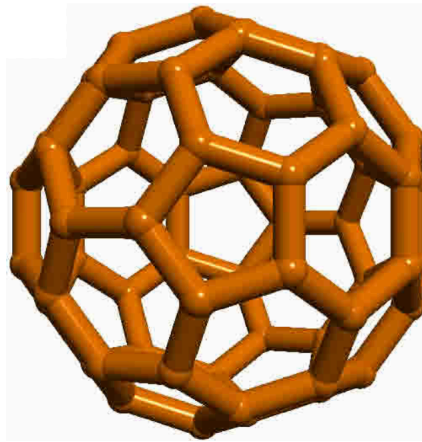


Figura 1.6 : Fullerenos C_{60} compuesto por 60 átomos de carbono. Fuente [25].

Aunque todavía no existe una síntesis experimental de las Schwarzitas, hoy en día existe una buena expectativa [25, 26] de que esto será así con el avance tecnológico [27, 28]. Como observamos, es importante estudiar las características geométricas de la superficie asociada con la estructura. El primer concepto clave es la curvatura. Por lo que, las inserciones de los defectos topológicos tienen un rol importante en la caracterización de los nanocarbonos. Aquellos cuya curvatura es positiva está el fullereno, con curvatura cero tenemos a varios referentes; grafeno, grafito y nanotubo, y con curvatura negativa tenemos a las Schwarzitas.

1.2. Planteamiento del problema

El primer cuestionamiento que nos realizamos en esta investigación es, si bien las primeras estructuras de carbono con curvatura negativa cuya estructura se asocia a superficies mínimas periódicas, ¿Por qué no se ha investigado una estructura de carbono asociado a una superficie más sencilla⁵ en comparación a las Schwarzitas? Matemáticamente hay un par candidatos que responden a este cuestionamiento de los cuales destacan la catenoide o helicoide que son superficies mínimas clásicas, sin embargo, estas superficies se pueden parametrizar dentro de una familia de superficies mínimas que se le conocen como superficies Bour⁶. A partir de esto, surge de manera natural las siguientes preguntas, suponiendo la existencia de una hoja de grafeno curva con la geometría de una superficie de Bour, ¿Serán una estructura estable? De ser así, ¿Qué fenómenos de transporte electrónico aparecerán?

1.2.1. Hipótesis

Con lo antes mencionado, se sabe que la estabilidad de las estructuras curvas de carbono viene del hecho de que en los anillos pentagonales o heptagonales hay muy poca tensión mecánica preservando así la naturaleza del grafeno, por lo que podemos esperar que nuestras estructuras hipotéticas planteadas también puedan serlos. Por otra parte, sabemos que los electrones en grafeno se comportan como fermiones de Dirac sin masa, de hecho no solo en grafeno, también se ha observado en nanotubos de carbono. Así la presencia de conos Dirac no se limita a nanoestructuras 1D o 2D, también se han observado recientemente en materiales 3D más complejos como las Schwarzitas [29]. Se cree que esto es una consecuencia directa del cono de Dirac presente en grafeno, por lo que también se espera que los portadores de

⁵Nos referimos a la complejidad a nivel estructural.

⁶ver Capítulo 2.2.3.

carga correspondientes a nuestras estructuras se comporten como fermiones Dirac sin masa, y uno de los fenómenos de transporte electrónico a observar es la de tunelamiento de Klein.

1.3. Objetivos

1.3.1. Objetivo general

Estudiar la propagación de los grados de libertad electrónicos con base en el modelo de Dirac sobre una hoja de grafeno curvada con la geometría de una superficie de Bour B_n

1.3.2. Objetivo específicos

- Obtener una estructura estable de una hoja de grafeno curvada asociada a esta geometría.
- Describir el transporte electrónico.
 - Calcular los coeficientes de reflexión y transmisión.
 - Calcular la conductancia.

1.4. Justificación

La importancia de llevar a cabo este trabajo de investigación radica en su contribución al avance del conocimiento en el campo de la materia condensada. En particular, la aplicación de la ecuación de Dirac en el espacio curvo proporciona un marco natural para estudiar las propiedades electrónicas de estructuras como la hoja de grafeno, especialmente cuando están sujetas a ondulaciones y defectos topológicos.

Las investigaciones actuales han demostrado la viabilidad experimental de sintetizar estructuras complejas de hojas de grafeno curvadas, como las Schwarzitas. Este escenario ofrece un terreno fértil para explorar las propiedades electrónicas de estas estructuras y comprender mejor su comportamiento.

El aporte fundamental de esta tesis radica en su enfoque teórico, donde se proponen nuevas estructuras y se profundiza en el análisis de sus propiedades electrónicas. Estos estudios son fundamentales para comprender las posibilidades y limitaciones de los materiales a nivel microscópico, lo que eventualmente podría conducir al diseño y desarrollo de materiales con propiedades específicas y aplicaciones innovadoras en diversas áreas tecnológicas. En resumen, esta investigación no solo amplía nuestra comprensión teórica de la materia condensada, sino que también sienta las bases para futuros avances en el desarrollo de materiales y tecnologías emergentes.

Capítulo 2

Fundamentos Teóricos

En este capítulo se abordarán los conceptos y teorías fundamentales que servirán como base para este trabajo de investigación que nos ayudarán a la mejor comprensión de capítulos posteriores.

2.1. Nociones básicas de geometría y topología

En esta sección introduciremos de una forma muy resumida conceptos básicos de geometría y topología, para una introducción detallada de estos tópicos ver [30].

2.1.1. El concepto de curvatura

El concepto que se mencionará constantemente en esta tesis es la curvatura, pero ¿Qué es la curvatura? Intuitivamente, la curvatura es la cantidad por la cual un objeto geométrico dentro de un espacio euclídeo se desvía de ser plano, o lineal, pero esto se define de diferentes maneras dependiendo del contexto. En general, existen dos tipos importantes de curvatura: curvatura extrínseca y curvatura intrínseca. La curvatura extrínseca mide cuánto se

curva un objeto geométrico contenido en un espacio en relación con este. Una circunferencia en el plano es el ejemplo perfecto, en cada punto se “curva” hacia el centro, y su curvatura es el recíproco, $1/r$, de su radio r . Circunferencias con radios pequeños se curvan más y entonces tienen mayor curvatura que circunferencias de mayor radio. De hecho, cuando el radio tiende a infinito la circunferencia se ve cada vez menos “curva” o “redonda” en relación con el plano que lo contiene. La curvatura intrínseca, por otro lado, tiene que ver con las propiedades geométricas del objeto mismo sin ninguna consideración del espacio en el que está contenido. Imaginemos una hormiga que vive en una circunferencia y que no puede ver nada fuera de su mundo unidimensional. Desde su punto de vista la circunferencia es “plana” en el sentido de que localmente las distancias se miden igual que en la línea recta (euclídea). La única diferencia es que si la hormiga camina lo bastante, va a regresar a su punto inicial. Así, desde el punto de vista de la hormiga, la circunferencia no es redonda.

La distinción entre curvatura intrínseca y extrínseca es más interesante en el caso de las superficies. Esta distinción fue estudiada por primera vez en forma detallada por Carl Friedrich Gauss hacia 1820. Como ejemplo, consideremos la superficie en el espacio tridimensional dada por la gráfica $z = f(x, y)$ de la función

$$f(x, y) = \frac{1}{2}(Ax^2 + Bxy + Cy^2), \quad (2.1)$$

donde A , B y C son reales. Para medir la geometría extrínseca de una

superficie en el espacio, consideramos la matriz de segundas derivadas de f^1

$$S = \begin{pmatrix} A & \frac{B}{2} \\ \frac{B}{2} & C \end{pmatrix}. \quad (2.2)$$

En el origen $(0, 0)$, que es un punto crítico de la función (es decir, las derivadas se anulan), la matriz S se denomina operador de forma y mide la concavidad o convexidad de la función en ese punto y en cada dirección. Son de un interés especial las cantidades $H = \frac{1}{2}(A + C)$, la mitad de la traza, llamada curvatura media; y $K = AC - \frac{B^2}{4}$, el determinante, llamada curvatura gaussiana de la superficie en ese punto.

Para dar otro ejemplo instructivo, podemos comprobar que la curvatura gaussiana de la esfera de radio R

$$\{(x, y, z) | x^2 + y^2 + z^2 = R^2\}, \quad (2.3)$$

es $K = 1/R^2$. Por lo tanto, es inversamente proporcional al cuadrado de su radio. El descubrimiento interesante de Gauss es que la curvatura es en realidad un invariante intrínseco, en el sentido de que mide la geometría intrínseca y no solamente la geometría del objeto respecto a como está contenido en el espacio tridimensional. De esta manera una superficie 2D incrustada en un espacio 3D exhibe dos curvaturas principales κ_1 y κ_2 . El producto de las dos curvaturas principales se denomina curvatura gaussiana

$$K = \kappa_1 \kappa_2, \quad (2.4)$$

¹Si tenemos una función de una variable, que podemos representar como una curva en el plano, la primera derivada nos da la pendiente del vector tangente en cada punto. La segunda derivada da la tasa de cambio de las pendientes. Para una superficie, es decir, para una función de dos variables, obtenemos una matriz para la segunda derivada porque debemos calcular las derivadas con respecto a dos direcciones.

y la curvatura promedio, conocida como curvatura media, se puede expresar como

$$H = \frac{1}{2}(\kappa_1 + \kappa_2). \quad (2.5)$$

Según el tipo de curvatura gaussiana K , existen tres tipos de geometrías en un espacio 3D [31]:

- (a) geometría euclidiana, donde $K = 0$;
- (b) geometría esférica o elipsoidal, donde $K > 0$,
- (c) geometría hiperbólica, donde $K < 0$ [ver Fig. 2.1].

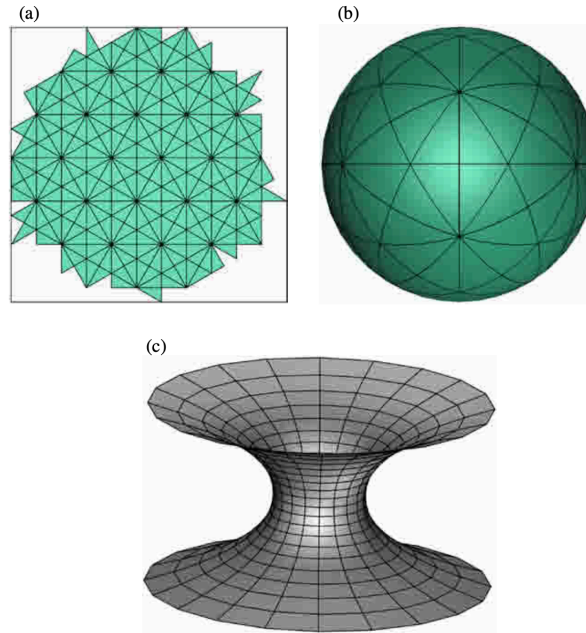


Figura 4.2 : (a) geometría euclidiana $K = 0$ (plano), (b) geometría esférica $K > 0$, (c) un catenoide es un ejemplo de geometría hiperbólica en la que todos los puntos tienen $K < 0$. Fuente [25].

Estas tres geometrías exhiben diferentes propiedades. Por ejemplo: en geometría euclidiana la suma de los ángulos interiores de un triángulo es exac-

tamente 180° , en geometrías esféricas esta suma es mayor de 180° y en geometrías hiperbólicas la suma de los ángulos interiores de un triángulo es menor de 180° . Por tanto, el plano es una superficie euclidiana, la esfera pertenece a la geometría esférica y una superficie catenoidal corresponde a la geometría hiperbólica.

2.1.2. Variedades de Riemann

El siguiente paso importante después de Gauss lo dio Riemann [32], quien introdujo dos nociones fundamentales de la geometría, la noción de variedad (de dimensión n) y la de métrica riemanniana (que expresó en términos de lo que él llamó elemento de línea), un objeto matemático que nos permite medir longitudes de curvas. La idea de variedad generaliza de forma natural la noción de superficie. Notemos que cualquier superficie (por ejemplo la esfera) tiene la propiedad de que localmente parece como una región del plano \mathbb{R}^2 . Es decir, un entorno pequeño de cada punto se ve como \mathbb{R}^2 , pero no así la superficie total. Más precisamente, si hacemos zoom en cualquier punto, entonces lo que vemos es esencialmente indistinguible de un entorno de \mathbb{R}^2 . Una variedad n -dimensional es el concepto que resulta de la generalización obvia de esta idea: una n -variedad \mathbb{M}^n es un objeto que localmente se asemeja a \mathbb{R}^n , el espacio euclídeo n -dimensional. La naturaleza “localmente euclídea” de las variedades nos permite generalizar algunas de las nociones naturales del espacio euclídeo, como las coordenadas: si restringimos nuestra atención a pedazos suficientemente pequeños de \mathbb{M} , nuestra posición está determinada por los valores de n coordenadas locales x_1, x_2, \dots, x_n . Con un poco de trabajo podemos generalizar el cálculo diferencial e integral a las variedades. De hecho, las derivadas son una herramienta clave para comprender la curvatura de las variedades. La métrica riemanniana se define

como

$$ds^2 = g_{\mu\nu} dx^\mu dx^\nu. \quad (2.6)$$

En general una métrica es una manera de medir la distancia entre dos puntos cualesquiera de un espacio dado. Así, una métrica riemanniana le da a una variedad una geometría, pero también recíprocamente, cualquier geometría expresada en una variedad corresponde a una métrica, aunque en una variedad puede haber más de una elección de métrica riemanniana. Una vez que una variedad ha sido equipada con una métrica, podemos investigar cualquier aspecto geométrico. A partir de esto comenzamos definiendo los símbolos de Christoffel que son objetos parecidos a tensores, estos se definen como

$$\Gamma_{\mu\nu}^\sigma = \frac{1}{2} g^{\sigma\gamma} (\partial_\nu g_{\gamma\mu} + \partial_\mu g_{\gamma\nu} - \partial_\gamma g_{\mu\nu}),^2 \quad (2.7)$$

y con ello podemos calcular el tensor de curvatura de Riemann

$$R_{\alpha\nu\beta}^\mu = \partial_\nu \Gamma_{\alpha\beta}^\mu - \partial_\beta \Gamma_{\alpha\nu}^\mu + \Gamma_{\alpha\beta}^\sigma \Gamma_{\sigma\nu}^\mu - \Gamma_{\alpha\nu}^\sigma \Gamma_{\sigma\beta}^\mu. \quad (2.8)$$

La contracción del tensor Riemann da el tensor de Ricci $R_{ab} = R_{acb}^c$, y el escalar de curvatura intrínseco es dado por la contracción con la métrica

$$R = g^{ab} R_{ab}. \quad (2.9)$$

2.2. Superficies mínimas

Desde el siglo pasado, el nombre superficies mínimas se ha aplicado a las superficies que satisfacen la condición

$$H = 0, \quad (2.10)$$

²También se les conoce como conexiones afines [33].

es decir, la curvatura media se desvanece. Esto será necesariamente satisfecho por las superficies que minimizan el área dentro de una configuración de límites dada. Esto fue demostrado implícitamente por Lagrange para superficies no paramétricas en 1760, y luego por Meusnier en 1776, que utilizó la expresión analítica para la curvatura media y determinó dos superficies mínimas, el catenoide y el helicoides [ver Fig. 2.2].

A continuación presentamos la representación de Weierstrass-Enneper (WE) para una superficie mínima [34]. Se trata de una representación matemática que se utilizará para modelar la geometría de las estructuras de carbono propuesta en este trabajo de investigación.

La representación matemática de una superficie mínima puede ser descrita en términos del mapeo $\mathbf{X} : \Omega \subset \mathbb{C} \rightarrow \mathbb{R}^3$ definido en un dominio simplemente conexo Ω a través de las funciones

$$\mathbf{X}(\omega) = \mathbf{X}_0 + \Re \int_{\omega_0}^{\omega} \Phi(\underline{\omega}) d\underline{\omega}, \quad (2.11)$$

definido por cada $\omega \in \Omega$, donde $d\underline{\omega}$ representa una medida apropiada de Ω y \Re representa la parte real. La función $\Phi(\omega)$ se puede escribir en términos de una función holomórfica $\mathcal{F}(\omega)$ como

$$\Phi(\omega) = ((1 - \omega^2) \mathcal{F}(\omega), i(1 + \omega^2) \mathcal{F}(\omega), 2\omega \mathcal{F}(\omega)). \quad (2.12)$$

A partir de la notación, las coordenadas locales u, v se pueden extraer de la parte real e imaginaria de $\omega = u + iv$, respectivamente. Una de las ventajas de esta representación es que se puede escribir el campo vectorial normal en la superficie mínima como [34]

$$\mathbf{N}(\omega) = \frac{1}{1 + |\omega|^2} (2\Re\omega, 2\Im\omega, |\omega|^2 - 1), \quad (2.13)$$

donde \Im representa la parte imaginaria. Además, el cuadrado del elemento de línea $ds^2 = g_{ab} d\xi^a d\xi^b$, donde los componentes del tensor métrico se definen

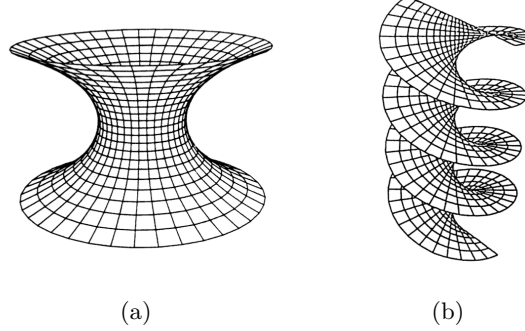


Figura 2.1 : a) El catenoide, una superficie mínima de rotación. b) Una parte del helicoide, una superficie mínima regulada. Fuente [34].

a través de $g_{ab} = \partial_a \mathbf{X} \cdot \partial_b \mathbf{X}$, con índices $a, b = u, v$ puede ser escrito como

$$ds^2 = \Lambda^2(\omega) |d\omega|^2, \quad (2.14)$$

donde $|d\omega|^2 = du^2 + dv^2$. El factor conforme $\Lambda^2(\omega)$ está dado por $\Lambda^2(\omega) = |\mathcal{F}(\omega)|^2 (1 + |\omega|^2)^2$. Por lo tanto, la representación de WE da coordenadas isotérmicas locales ³ que siempre existen en una variedad bidimensional. Además, se define el conjunto de puntos regulares de una superficie mínima por $\Omega' = \{\omega \in \Omega : \mathcal{F}(\omega) \neq 0\}$. Ahora, la curvatura gaussiana viene dada por

$$K(\omega) = -\frac{4}{|\mathcal{F}(\omega)|^2 (1 + |\omega|^2)^4} \quad \text{donde } \omega \in \Omega'. \quad (2.15)$$

A continuación discutiremos brevemente algunas de las superficies mínimas que trataremos a largo de esta tesis.

2.2.1. Catenoide y Helicoide

La Fig. 2.3 muestra una parte del catenoide. Esta superficie mínima debe su nombre al hecho de que se puede obtener girando una determinada catenaria

³En geometría diferencial, las coordenadas isotérmicas en una variedad riemanniana son coordenadas locales donde la métrica es conforme a la métrica euclidiana.

alrededor de algún eje. Si elegimos el eje z como eje de rotación, todas las catenoides se generan al rotar las catenarias

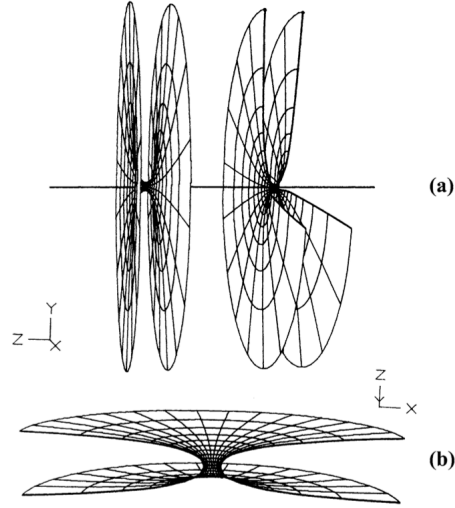


Figura 2.2 : a) Una visión global de la catenoide. b) Estas vistas de la catenoide correspondiente a la parte $|u| \leq 2\pi$, $0 \leq v \leq \pi$. Fuente [34].

$$x = \alpha \cosh \left(\frac{z - z_0}{\alpha} \right) \quad \text{con } z \in \mathbb{R}, \quad (2.16)$$

donde z_0 y α son constantes arbitrarias, $\alpha \neq 0$. Es uno de los resultados clásicos del cálculo de variaciones que toda superficie mínima rotacionalmente simétrica no plana es congruente con una parte de una catenoide. Claramente, cada catenoide es una superficie mínima doblemente conexa que puede ser parametrizada por

$$\begin{aligned} x(u, v) &= \alpha \cosh u \cos v, \\ y(u, v) &= -\alpha \cosh u \sin v, \\ z(u, v) &= \alpha u, \end{aligned} \quad (2.17)$$

con $-\infty < u < \infty$, $0 \leq v < 2\pi$, si escogemos $z_0 = 0$.

Observemos que (2.17) está definido para todo $\omega = u + iv \in \mathbb{C}$. Por lo tanto

el mapeo $\mathbf{X} : \mathbb{C} \rightarrow \mathbb{R}^3$, $\mathbf{X}(\omega) := (x(\omega), y(\omega), z(\omega))$, representa la superficie del catenoide generada por el meridiano (2.16). El mapeo $\mathbf{X} : \mathbb{C} \rightarrow \mathbb{R}^3$ es armónico y conforme. De hecho, por medio de las fórmulas

$$\begin{aligned}\cosh(u + iv) &= \cosh u \cos v + i \sinh u \sin v, \\ \sinh(u + iv) &= \sinh u \cos v + i \cosh u \sin v,\end{aligned}\tag{2.18}$$

podemos concluir que

$$\mathbf{X}(\omega) = \Re[\mathbf{f}(\omega)],\tag{2.19}$$

donde $f : \mathbb{C} \rightarrow \mathbb{C}^3$ denota una curva isotrópica dado por

$$\mathbf{f}(\omega) = (\alpha \cosh \omega, i\alpha \sinh \omega, \alpha\omega).\tag{2.20}$$

La función de Weierstrass $\mathcal{F}(\omega)$ correspondiente al catenoide es

$$\mathcal{F}(\omega) = -\frac{\alpha}{2\omega^2}, \quad \omega \in \mathbb{C}/\{0\}.\tag{2.21}$$

A partir de la ecuación (2.11), o precisamente por

$$\begin{aligned}x &= \alpha + \Re \int_1^\omega (1 - \underline{\omega}^2) \mathcal{F}(\underline{\omega}) d\underline{\omega}, \\ y &= \Re \int_1^\omega i(1 + \underline{\omega}^2) \mathcal{F}(\underline{\omega}) d\underline{\omega}, \\ z &= \Re \int_1^\omega 2\underline{\omega} \mathcal{F}(\underline{\omega}) d\underline{\omega},\end{aligned}\tag{2.22}$$

sustituyendo (2.21) en la ecuación anterior obtenemos

$$\begin{aligned}x &= \Re \left[\frac{\alpha}{2} \left(\frac{1}{\omega} + \omega \right) \right], \\ y &= \Re \left[\frac{i\alpha}{2} \left(\frac{1}{\omega} - \omega \right) \right], \\ z &= -\Re[\alpha \log \omega].\end{aligned}\tag{2.23}$$

Renombrando a la variable $\omega \rightarrow e^{-\omega}$ y recordando que $\omega = u + iv$, se obtiene la parametrización del catenoide

$$\mathbf{X}(u, v) = (\alpha \cosh u \cos v, -\alpha \cosh u \sin v, \alpha u), \quad (2.24)$$

observemos que el resultado anterior coincide con la ecuación (2.17).

De (2.20), leemos que la superficie adjunta

$$\mathbf{X}^*(\omega) := \Im[\mathbf{f}(\omega)], \quad (2.25)$$

del catenoide (2.17) está dado por

$$\begin{aligned} x^*(u, v) &= \alpha \sinh u \sin v, \\ y^*(u, v) &= \alpha \sinh u \cos v, \\ z^*(u, v) &= \alpha v, \end{aligned} \quad (2.26)$$

o representado como

$$\mathbf{X}^* = \alpha \mathbf{Y}(v) + \sinh u \mathbf{Z}(v), \quad (2.27)$$

donde

$$\mathbf{Y}(v) = (0, 0, v), \quad \mathbf{Z}(v) = (\sin v, \cos v, 0).$$

Así, para cada $v \in \mathbb{R}$, la curva $\mathbf{X}^*(\cdot, v)$ es una línea recta que se encuentra con el eje z perpendicularmente. Si fijamos $u \neq 0$, entonces $\mathbf{X}^*(u, \cdot)$ describe una hélice con paso $2\pi|\alpha|$. Esta hélice es zurda para $\alpha > 0$ y derecha para $\alpha < 0$. Vemos que \mathbf{X}^* se genera por un movimiento en forma de tornillo de alguna línea recta que se encuentra con el eje z perpendicularmente, por lo tanto \mathbf{X}^* es llamado helicoides o superficie tornillo [ver Fig. 2.2-b].

2.2.2. Superficie de Enneper

La superficie mínima $\mathbf{X}(\omega)$, $\omega \in \mathbb{C}$, dado por la representación de Weierstrass (2.11), (2.12) con

$$\mathcal{F}(\omega) = 1, \quad (2.28)$$

es la superficie de Enneper

$$\mathbf{X}(\omega) = \Re \left(\int_0^\omega (1 - \underline{\omega}^2) \mathcal{F}(\underline{\omega}) d\underline{\omega}, \int_0^\omega i (1 + \underline{\omega}^2) \mathcal{F}(\underline{\omega}) d\underline{\omega}, \int_0^\omega 2\underline{\omega} \mathcal{F}(\underline{\omega}) d\underline{\omega} \right), \quad (2.29)$$

esto es,

$$\mathbf{X}(\omega) = \Re \left(\omega - \frac{\omega^3}{3}, i\omega + \frac{i\omega^3}{3}, \omega^2 \right). \quad (2.30)$$

Así los componentes de la superficie de Enneper están dados por

$$\begin{aligned} x &= u - \frac{1}{3}u^3 + uv^2, \\ y &= -v - u^2v + \frac{1}{3}v^3, \\ z &= u^2 - v^2. \end{aligned} \quad (2.31)$$

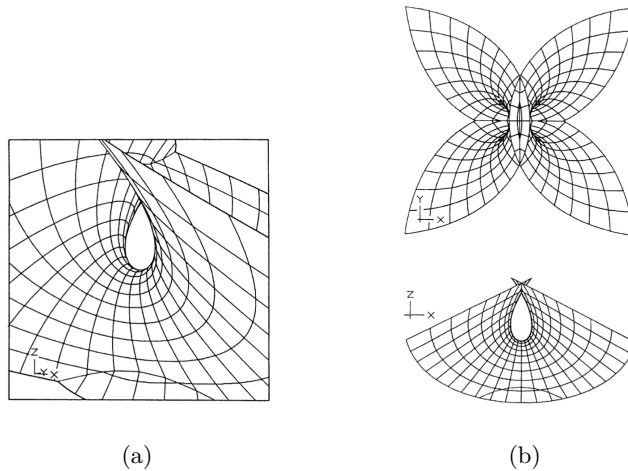


Figura 2.3 : Estas vistas del subconjunto de la superficie de Enneper correspondiente a $|u| \leq 2$, $|v| \leq 2$ revelan el comportamiento de la superficie cerca del origen. Los planos y ejes de simetría de la superficie se pueden ver en las dos proyecciones sobre los planos de coordenadas. Fuente [34].

2.2.3. Superficies de Bour

Las superficies de Bour están definidos mediante

$$\mathcal{F}(\omega) = c\omega^{n-2} \text{ con } \omega \in \mathbb{C}/\{0\}, \quad (2.32)$$

donde $n \in \mathbb{R}$ y $c \in \mathbb{C}$, $c \neq 0$. Denotaremos estas superficies, como superficies B , o B_n si se desea enfatizar el valor de n ; esta notación es sugerida por el hecho de que las superficies fueron determinadas por primera vez por E. Bour [35]. Si $n \neq 0$ nosotros podemos sin restricción elegir $c = 1$ en $\mathcal{F}(\omega)$. Se puede demostrar que n y $-n$ dan la misma superficie, por lo que podemos suponer $n \geq 0$. Las superficies especiales de particular interés son $n = 0$, $c = 1$, el catenoide; $n = 0$, $c = i$, el helicoido derecho; $n = 2$, superficie de Enneper. Esta clase de superficies mínimas contiene claramente los ejemplos considerados anteriormente. Excluyendo los casos anteriores, las ecuaciones de B_n son

$$\begin{aligned} x &= \frac{1}{2} \left(\frac{u^{n-1}}{n-1} - \frac{u^{n+1}}{n+1} \right) + \frac{1}{2} \left(\frac{v^{n-1}}{n-1} - \frac{v^{n+1}}{n+1} \right), \\ y &= \frac{i}{2} \left(\frac{u^{n-1}}{n-1} + \frac{u^{n+1}}{n+1} \right) - \frac{i}{2} \left(\frac{v^{n-1}}{n-1} + \frac{v^{n+1}}{n+1} \right), \\ z &= \frac{u^n + v^n}{n}. \end{aligned} \quad (2.33)$$

Se usa con frecuencia las variables reales, r y θ , donde $u = re^{i\theta}$ y $v = re^{-i\theta}$.

Con éstas variables las ecuaciones son

$$\begin{aligned} x &= \frac{r^{m-1}}{m-1} \cos[(m-1)\theta] - \frac{r^{m+1}}{m+1} \cos[(m+1)\theta], \\ y &= -\frac{r^{m-1}}{m-1} \sin[(m-1)\theta] - \frac{r^{m+1}}{m+1} \sin[(m+1)\theta], \\ z &= \frac{2r^m}{m} \cos(m\theta). \end{aligned} \quad (2.34)$$

2.3. Teoría de Dirac en espacio curvo

En esta sección se sigue el tratamiento de [36] para introducir el modelo más simple para describir los grados de libertad electrónicos en materiales curvos de carbono con curvatura gaussiana negativa; para ello, iniciamos con la ecuación de Dirac

$$i\underline{\gamma}^\alpha \nabla_\alpha \Psi = 0, \quad (2.35)$$

definido sobre un espacio-tiempo $2 + 1$ curvo \mathcal{M} , donde $\underline{\gamma}^\alpha(x) = \gamma^A e^\alpha_A(x)$. Los γ^A son las matrices de Dirac que satisfacen el algebra de Clifford

$$\{\gamma^A, \gamma^B\} = 2\eta^{AB} \mathbb{1}_{2 \times 2}, \quad (2.36)$$

donde η^{AB} es la métrica de Minkowski. $\{e^\alpha_A(x)\}$ es el conjunto de vierbeins que nos relaciona un conjunto de coordenadas localmente inerciales en un punto $\mathbf{X} \in \mathcal{M}$. Los índices latinos en mayúsculas indican las coordenadas del espacio plano de Minkowski mientras que los índices griegos indican las coordenadas locales en el espacio curvo.

En la ecuación de Dirac $\nabla_\alpha = \partial_\alpha + \Omega_\alpha$ es la derivada covariante para la representación espinorial del grupo de Lorentz $SO(2, 1)$, donde $\Omega_\alpha = \frac{1}{8} \omega_\alpha^{AB} [\gamma_A, \gamma_B]$ es la conexión de espín y ω_α^{AB} son los elementos de una 1-forma que satisface las ecuaciones de Maurer-Cartan [30]. Tanto Ω_α y $e^\alpha_A(x)$ tienen información del contenido geométrico de la ecuación de Dirac. El tensor métrico en un espacio-tiempo general puede ser escrito en términos de los vierbeins, esto es, $g_{\alpha\beta} = e_\alpha^A(x) e_\beta^B(x) \eta_{AB}$. Por simplicidad, se considera un espacio-tiempo estacionario ⁴ con la parte espacial curvada solamente $ds^2 = -v_F^2 dt^2 + g_{ij} dx^i dx^j$ con $i, j = 1, 2$; donde v_F es la velocidad de Fermi.

⁴En un espacio-tiempo estacionario, las componentes del tensor métrico, $g_{\mu\nu}$, pueden ser elegidos de tal manera que todos sean independientes de la coordenada temporal.

A partir de esta métrica no es difícil mostrar que los vierbeins son $e^0_0 = 1$, $e^i_0 = e^0_a = 0$ y $e^i_a \neq 0$, tal que $g_{ij} = e^a_i e^b_j \delta_{ab}$. Además que $\omega_{j0}^0 = \omega_{0b}^a = \omega_{j0}^a = 0$ y $\omega_{jb}^a \neq 0$, con índices espaciales a, b, i, j y k . Por lo tanto, la derivada covariante se reduce a

$$\begin{aligned}\nabla_0 &= \partial_0, \\ \nabla_j &= \partial_j + \frac{1}{8}\omega_j^{ab}[\gamma_a, \gamma_b].\end{aligned}\tag{2.37}$$

Ahora, separemos los índices temporales de los espaciales en la ecuación de Dirac (2.35), esto lleva a un tipo de ecuación de Schrödinger

$$i\hbar\partial_0\Psi = \mathcal{H}_K\Psi,\tag{2.38}$$

donde $\mathcal{H}_K = -i\hbar v_F \gamma_0 \gamma^j(x) \nabla_j$. Podemos hacer notar que la forma tensorial y dependiente del espacio de la velocidad de Fermi $v_a^{eff,j}(x) = v_F e^j_a(x)$ es obtenida también utilizando $\underline{\gamma}^j(x) = \gamma^a e^j_a(x)$. Teniendo esto en cuenta podemos escribir el Hamiltoniano para la hoja curva de grafeno como una teoría cuántica de campos

$$\hat{\mathbf{H}} = \int d^2x \sqrt{g} \Psi^\dagger \begin{pmatrix} \mathcal{H}_K & 0 \\ 0 & \mathcal{H}_{K'} \end{pmatrix} \Psi,\tag{2.39}$$

donde $\mathcal{H}_{K'} = (\mathcal{H}_K)^T$ y el superíndice T indica la matriz transpuesta. Las letras K y K' se refieren a los dos puntos independientes de Dirac. Una representación particular de las matrices de Dirac es $\gamma^0 = -i\sigma_3$, $\gamma^a \gamma^0 = \sigma^a$, donde σ_3 y σ^a , con $a = 1, 2$, son las matrices de Pauli estándar. En esta representación, para grafeno plano $\mathcal{H}_K = -i\hbar v_F \sigma \cdot \partial$, es decir, el límite de baja energía del modelo de tight-binding de Wallace [37].

2.4. Teoría del Funcional de la Densidad

La teoría del funcional de la densidad (DFT) es un método de modelado mecánico cuántico utilizado en física y química para investigar la estructura electrónica de los sistemas de muchos cuerpos, en particular los átomos, las moléculas y las fases condensadas. Una solución analítica de la ecuación de muchos electrones de Schrödinger no está disponible, y una solución numérica, aunque perfectamente posible en teoría, es efectivamente imposible en la práctica para más de un puñado de electrones debido a la velocidad finita y la memoria de las computadoras. En esta sección introduciremos cualitativamente a DFT como un medio de eludir la solución de la ecuación de Schrödinger de muchos electrones, ya que las propiedades de un sistema de muchos electrones se pueden determinar mediante el uso de funciones de la densidad electrónica. Para una introducción detallada a la teoría del funcional de la densidad ver las referencias [38–43].

2.4.1. Ecuación de Schrödinger

El objetivo final de la mayoría de los enfoques químicos cuánticos y física del estado sólido es la solución aproximada de la ecuación de Schrödinger no relativista independiente del tiempo

$$\hat{H}\Psi_i(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N, \mathbf{R}_1, \dots, \mathbf{R}_M) = E_i\Psi_i(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N, \mathbf{R}_1, \dots, \mathbf{R}_M), \quad (2.40)$$

aquí \hat{H} es un operador diferencial que representa la energía total. \hat{H} es el hamiltoniano para un sistema que consiste en M núcleos y N electrones en ausencia de campos magnéticos o eléctricos.

$$\hat{H} = \hat{H}_{elec} + \hat{H}_{nuc}. \quad (2.41)$$

La ecuación (2.41) nos describe el desacoplamiento del movimiento electrónico con el movimiento nuclear, donde \hat{H}_{elec} y \hat{H}_{nuc} se definen [43]

$$\hat{H}_{elec} = -\frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \nabla_i^2 - \sum_{i=1}^N \sum_{A=1}^M \frac{Z_A}{r_{iA}} + \sum_{i=1}^N \sum_{j>i}^N \frac{1}{r_{ij}}, \quad (2.42)$$

$$\hat{H}_{nuc} = -\frac{1}{2} \sum_{A=1}^M \frac{1}{M_A} \nabla_A^2 + \sum_{A=1}^M \sum_{B>A}^M \frac{Z_A Z_B}{R_{AB}}. \quad (2.43)$$

En la ecuación (2.42) el primer término representa la energía cinética de los electrones, el segundo término representa la interacción atractiva electrón-núcleo, y el tercer término representa la interacción repulsiva electrón-electrón. En la ecuación (2.43) el primer término representa la energía cinética de los núcleos, y el segundo término representa la interacción repulsiva núcleo-núcleo.

2.4.2. Aproximación Born-Oppenheimer

Debido a sus masas, los núcleos se mueven mucho más lentamente que los electrones, por lo que podemos considerar a los núcleos fijos y los electrones en constante movimiento, en consecuencia, la energía cinética nuclear es cero y su energía potencial es simplemente una constante. Por lo tanto, la ecuación (2.42) se reduce a

$$\hat{H}_{elec} = -\frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \nabla_i^2 - \sum_{i=1}^N \sum_{A=1}^M \frac{Z_A}{r_{iA}} + \sum_{i=1}^N \sum_{j>i}^N \frac{1}{r_{ij}} = \hat{T} + \hat{V}_{Ne} + \hat{V}_{ee}. \quad (2.44)$$

La solución de la ecuación de Schrödinger con H_{elec} es la función de onda electrónica Ψ_{elec} y la energía electrónica E_{elec}

$$\hat{H}_{elec} \Psi_{elec} = E_{elec} \Psi_{elec}. \quad (2.45)$$

La energía total E_{tot} se define

$$E_{tot} = E_{elec} + E_{nuc}, \quad (2.46)$$

donde E_{nuc} es el término de repulsión nuclear constante

$$E_{nuc} = \sum_{A=1}^M \sum_{B>A}^M \frac{Z_A Z_B}{R_{AB}}. \quad (2.47)$$

2.4.3. Principio variacional

Cuando un sistema está en el estado Ψ , el valor esperado de la energía viene dado por

$$E[\Psi] = \frac{\langle \Psi | \hat{H} | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle}, \quad (2.48)$$

donde $\langle \Psi | \hat{H} | \Psi \rangle = \int \Psi^* \hat{H} \Psi d\mathbf{x}$.

El principio variacional establece que la energía calculada a partir de una función de prueba Ψ es el límite superior a la verdadera energía de estado fundamental E_0 . La minimización completa del funcional $E[\Psi]$ con respecto a todas las funciones de onda de los N-electrones permitidas dará el verdadero estado de base Ψ_0 y la energía $E[\Psi_0] = E_0$; esto es

$$E_0 = \min_{\Psi \rightarrow N} E[\Psi] = \min_{\Psi \rightarrow N} \langle \Psi | \hat{T} + \hat{V}_{Ne} + \hat{V}_{ee} | \Psi \rangle, \quad (2.49)$$

donde $\Psi \rightarrow N$ indica que Ψ es una función de onda de N-electrones permitida. Si bien tal búsqueda sobre todas las funciones elegibles obviamente no es posible, podemos aplicar el principio variacional también a subconjuntos de todas las funciones posibles. Uno suele elegir estos subconjuntos tales que la minimización en la ecuación (2.49) se puede hacer en algún esquema algebraico. El resultado será la mejor aproximación a la función de onda exacta que se puede obtener de este subconjunto particular. Es importante darse cuenta de que al restringir la búsqueda a un subconjunto, la función de onda exacta en sí no puede ser identificada (a menos que la función de onda exacta se incluya en el subconjunto, lo cual es bastante improbable).

Un ejemplo típico es la aproximación de Hartree-Fock que se expone a continuación, donde el subconjunto consiste en todos los productos antisimétricos (determinantes de Slater) compuestos de orbitales de N spin.

2.4.4. La aproximación de Hartree-Fock

Supongamos que Ψ_0 (la función de onda de estado fundamental) se aproxima como un producto antisimétrico de los N orbitales de espín ortonormales $\psi_i(\mathbf{x})$, cada uno un producto de un orbital espacial $\phi_k(\mathbf{r})$ y una función de espín $\sigma(s) = \alpha(s)$, el determinante de Slater

$$\Psi_0 \approx \Psi_{HF} = \frac{1}{N!} \begin{vmatrix} \psi_1(\mathbf{x}_1) & \psi_2(\mathbf{x}_1) & \cdots & \psi_N(\mathbf{x}_1) \\ \psi_1(\mathbf{x}_2) & \psi_2(\mathbf{x}_2) & \cdots & \psi_N(\mathbf{x}_2) \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ \psi_1(\mathbf{x}_N) & \psi_2(\mathbf{x}_N) & \cdots & \psi_N(\mathbf{x}_N) \end{vmatrix}. \quad (2.50)$$

La aproximación de Hartree-Fock es el método por el cual se encuentran los orbitales ortogonales ψ_i que minimizan la energía para esta forma determinante de Ψ_0

$$E_{HF} = \min_{\Psi_{HF} \rightarrow N} E[\Psi_{HF}]. \quad (2.51)$$

El valor esperado del operador hamiltoniano con Ψ_{HF} en dado por

$$E_{HF} = \langle \Psi_{HF} | \hat{H} | \Psi_{HF} \rangle = \sum_{i=1}^N H_i + \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^N (J_{ij} - K_{ij}), \quad (2.52)$$

$$H_i \equiv \int \psi_i^*(\mathbf{x}) \left[-\frac{1}{2} \nabla^2 - V_{ext}(\mathbf{x}) \right] \psi_i(\mathbf{x}) d\mathbf{x}, \quad (2.53)$$

define la contribución debida a la energía cinética y la atracción electrón-núcleo y

$$J_{ij} = \int \int \psi_i(\mathbf{x}_1) \psi_j^*(\mathbf{x}_1) \frac{1}{r_{12}} \psi_i^*(\mathbf{x}_2) \psi_j(\mathbf{x}_2) d\mathbf{x}_1 d\mathbf{x}_2, \quad (2.54)$$

$$K_{ij} = \int \int \psi_i^*(\mathbf{x}_1) \psi_j(\mathbf{x}_1) \frac{1}{r_{12}} \psi_i(\mathbf{x}_2) \psi_j^*(\mathbf{x}_2) d\mathbf{x}_1 d\mathbf{x}_2, \quad (2.55)$$

las integrales son todas reales. las J_{ij} se llaman integrales Coulomb, los K_{ij} se llaman integrales de intercambio. La libertad variacional en la expresión de la energía (ecuación (2.52)) está en la elección de los orbitales. La minimización de la energía funcional con las condiciones de normalización $\int \psi_i(\mathbf{x}) \psi_j(\mathbf{x}) d\mathbf{x} = \delta_{ij}$ conduce a las ecuaciones diferenciales de Hartree-Fock

$$\hat{f}\psi_i = \epsilon_i \psi_i, \quad i = 1, 2, 3, \dots, N. \quad (2.56)$$

Estas N ecuaciones tienen la apariencia de ecuaciones de valor propio, donde los multiplicadores de Lagrange ϵ_i son los valores propios del operador \hat{f} . El operador de Fock \hat{f} es un operador de un electrón efectivo definido como

$$\hat{f} = -\frac{1}{2}\nabla_i^2 - \sum_A^M \frac{Z_A}{r_{iA}} + V_{HF}(i). \quad (2.57)$$

Los dos primeros términos son la energía cinética y la energía potencial debida a la atracción electrón-núcleo. $V_{HF}(i)$ es el potencial de Hartree-Fock. Dicho potencial físicamente representa el campo promedio repulsivo en el cual está sumergido el i -ésimo electrón, dicho campo es originado por el resto de los electrones.

$$V_{HF}(\mathbf{x}_1) = \sum_j^N \left(\hat{J}_j(\mathbf{x}_1) - \hat{K}_j(\mathbf{x}_1) \right), \quad (2.58)$$

$$\hat{J}_j(\mathbf{x}_1) = \int |\psi_j(\mathbf{x}_2)|^2 \frac{1}{r_{12}} d\mathbf{x}_2. \quad (2.59)$$

El operador de Coulomb \hat{J} representa el potencial que un electrón en la posición \mathbf{x}_1 experimenta debido a la distribución de carga promedio de otro electrón en el orbital espín ψ_j . El segundo término en la ecuación (2.58) es

la contribución de intercambio de HF. El operador HF no tiene interpretación clásica, su interpretación es naturaleza cuántica, la cual proviene del operador espín

$$\hat{K}_j(\mathbf{x}_1)\psi_i(\mathbf{x}_1) = \int \psi_j^*(\mathbf{x}_2) \frac{1}{r_{12}} \psi_i(\mathbf{x}_2) \psi_j(\mathbf{x}_1) d\mathbf{x}_2. \quad (2.60)$$

El potencial de HF no es local y depende de los orbitales de espín. Por lo tanto, las ecuaciones de HF deben resolverse de forma autoconsistente. El teorema de Koopmans⁵ [44] proporciona una interpretación física acerca de las energías de cada orbital electrónico ϵ_i que conforman la nube multielectrónica de (2.57). En otras palabras, el teorema de Koopmans representa la energía necesaria para poder arrancar un electrón de la nube multielectrónica.

⁵Establece que en la teoría de Hartree-Fock de capa cerrada, la primera energía de ionización de un sistema molecular es igual al negativo de la energía del orbital, del orbital molecular ocupado más alto (HOMO, del inglés Highest Occupied Molecular Orbital).

Capítulo 3

Grafeno: una revisión a sus propiedades electrónicas

En este capítulo se revisará el comportamiento electrónico del grafeno, sin ser dopado ni deformado. La revisión está enfocada a partir del programa VASP [ver Apéndice A], software que implementa la teoría del funcional de la densidad [ver Sección 2.4].

3.1. Estructura cristalina

En el grafeno, los átomos de carbono forman un arreglo bidimensional en forma de red de panal, llamado *honeycomb lattice* en la literatura inglesa. Esta estructura cristalina hexagonal puede ser caracterizada por la superposición de dos redes de Bravais triangulares [ver Apéndice B] y una base de dos átomos [45]. Los vectores base pueden ser definidos como

$$\mathbf{a}_1 = \frac{a}{2} (\sqrt{3}, 3), \quad \mathbf{a}_2 = \frac{a}{2} (-\sqrt{3}, 3), \quad (3.1)$$

donde a es la distancia C-C cuyo valor aceptado es $a = 1.42 \text{ \AA}$ [37, 46].

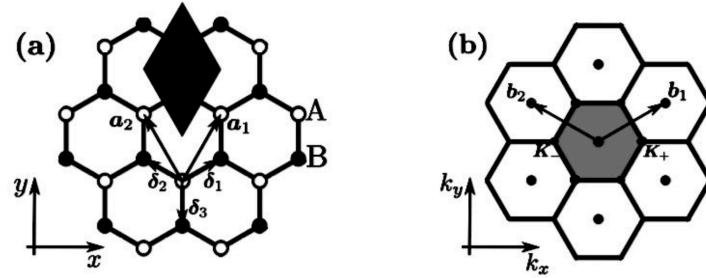


Figura 3.1 : a) Estructura cristalina del grafeno, cuyos vectores base son denotados por \mathbf{a}_1 y \mathbf{a}_2 . Los vectores δ_i conectan cada átomo de la subred A (círculos blancos) con sus tres primeros vecinos de la subred B (círculos negros). b) Red recíproca del grafeno de vectores base \mathbf{b}_1 y \mathbf{b}_2 . El hexágono gris representa la primera zona de Brillouin. Fuente [47].

Otra forma de describir la red del grafeno es como una red triangular de tipo A (círculos blancos) interpenetrada por una red triangular de tipo B (círculos negros) [ver Fig. 3.1 (a)]. Puede observarse que cada átomo de tipo A está rodeado de tres átomos de tipo B, y viceversa. Los tres vectores que conectan un átomo de tipo A con sus primeros tres vecinos son [46, 48, 49]

$$\delta_1 = \frac{a}{2} (\sqrt{3}, 1), \quad \delta_2 = \frac{a}{2} (-\sqrt{3}, 1), \quad \delta_3 = a (0, 1). \quad (3.2)$$

Los vectores base $\mathbf{b}_1, \mathbf{b}_2$ de la red recíproca del grafeno [ver Fig. 3.1 (b)] pueden ser determinados de la condición $\mathbf{a}_i \cdot \mathbf{b}_j = 2\pi\delta_{ij}$, con δ_{ij} la delta de Kronecker; de donde se obtienen

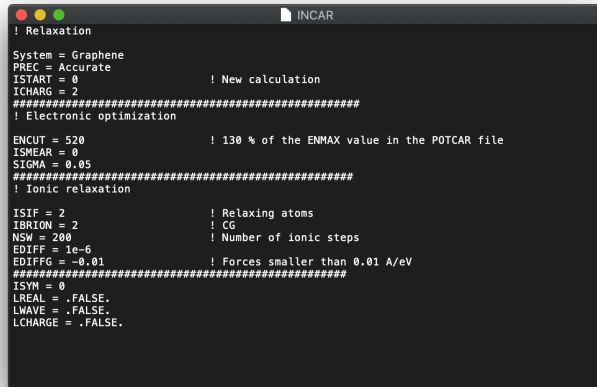
$$\mathbf{b}_1 = \frac{2\pi}{3a} (\sqrt{3}, 1), \quad \mathbf{b}_2 = \frac{2\pi}{3a} (-\sqrt{3}, 1). \quad (3.3)$$

Observemos que la red recíproca, la cual también es una red hexagonal pero está rotada 90° respecto a la red directa. La primera zona de Brillouin es construida como la celda de Weigner- Seitz de la red recíproca. De las seis esquinas de la zona de Brillouin solamente dos no son equivalentes, como

puede ser el par $\mathbf{K}_{\pm} = \left(\pm \frac{4\pi}{3\sqrt{3}a}, 0\right)$ [37]. El resto de las esquinas pueden ser obtenidas a partir de \mathbf{K}_+ o \mathbf{K}_- más un vector de la red recíproca.

3.2. Optimización geométrica con VASP

Para realizar la optimización geométrica de la estructura cristalina del grafeno en VASP, se necesita configurar los 4 archivos de entrada; INCAR, POSCAR, POTCAR y KPOINT.



```

! Relaxation
System = Graphene
PREC = Accurate
ISTART = 0 ! New calculation
ICHARG = 2
#####
! Electronic optimization
ENCGT = 520 ! 130 % of the ENMAX value in the POTCAR file
ISMEAR = 0
SIGMA = 0.05
#####
! Ionic relaxation
ISIF = 2 ! Relaxing atoms
IBRION = 2 ! CG
NSW = 200 ! Number of ionic steps
EDIFF = 1e-6
EDIFFG = -0.01 ! Forces smaller than 0.01 A/eV
#####
ISYM = 0
LREAL = .FALSE.
LWAVE = .FALSE.
LCHARGE = .FALSE.

```

Figura 3.2 : Parámetros del archivo INCAR para la optimización geométrica de la estructura cristalina del grafeno.

En el archivo INCAR especificamos que se realizará una optimización electrónica y relajación iónica de la estructura [ver Fig. 3.2]. Para más detalles acerca de los parámetros utilizados en las etiquetas consulte [50]. Para el archivo POSCAR colocaremos los datos de la estructura cristalina¹, es decir, los vectores red que se dispone en las líneas tercera a la quinta y la

¹La estructura cristalina hexagonal del grafeno puede ser caracterizada por la superposición de dos redes de Bravais triangulares y una base de dos átomos.

base atómica que se coloca en las líneas nueve y diez, en conjunto definen la celda unitaria del sistema [ver Fig. 3.3]. En cuanto al archivo POTCAR recordemos es una lista de pseudopotenciales para cada átomo que conforma el sistema, en nuestro caso el átomo corresponde al carbono C que es suministrado por el paquete VASP.

```

Graphene
1.00000000
1.230000000 -2.130422493 0.000000000
1.230000000 2.130422493 0.000000000
0.000000000 0.000000000 20.000000000
Z
C
Cartesian
0.000000000 0.000000000 0.000000000
1.230000000 0.710140831 0.000000000

```

Figura 3.3 : Archivo POSCAR de la estructura cristalina del grafeno.

En el archivo KPOINTS especificaremos los puntos que VASP utilizará para muestrear la primera zona de Brillouin en el espacio recíproco. Aquí utilizaremos una generación automática de k-mesh con el método Γ -centered asignando el número de subdivisiones N_1 , N_2 y N_3 como 36, 36 y 1 respectivamente [ver Fig. 3.4].

```

Auto ! Comment line
0 ! 0 -> determine number of k points automatically
Gamma ! Generate a Gamma centered mesh
36 36 1 ! Subdivisions N_1, N_2 and N_3 along the reciprocal lattice vectors
0. 0. 0. ! Optional shift of the mesh (s_1, s_2, s_3)

```

Figura 3.4 : Archivo KPOINT de la estructura cristalina del grafeno.

Es importante mencionar que para realizar los cálculos necesitamos contar con un equipo de supercómputo el cual tenga cargado el programa y todas

sus librerías, así como la licencia para poder usarla. En este caso se gestionó una cuenta de usuario en LARCAD ² perteneciente a la Facultad de Ciencias en Física y Matemáticas de la Universidad Autónoma de Chiapas. Para poder conectarnos a LARCAD necesitamos ejecutar un protocolo de conexión remota desde cualquier equipo de cómputo desde una terminal, que cuente con un sistema operativo UNIX. Es importante que al entrar creamos un carpeta donde se guarden todos los archivos de salidas después de finalizar los cálculos en VASP.

Una vez realizado estos puntos y una vez finalizado el cálculo, el archivo de salida que nos interesa es el CONTCAR que contiene la geometría de red y posiciones iónicas después de la optimización [ver Fig. 3.5].

```

Graphene
1.0000000000000000
1.2300000000000000 -2.1304224930000002 0.0000000000000000
1.2300000000000000 2.1304224930000002 0.0000000000000000
0.0000000000000000 0.0000000000000000 20.0000000000000000
C
2
Direct
0.0000000000000000 0.0000000000000000 0.0000000000000000
0.3333333333333357 0.6666666666666643 0.0000000000000000
0.00000000E+00 0.00000000E+00 0.00000000E+00
0.00000000E+00 0.00000000E+00 0.00000000E+00

```

Figura 3.5 : Archivo CONTCAR: contiene datos optimizados de la estructura cristalina del grafeno.

Observemos que el archivo CONTCAR y POSCAR son muy similares, la diferencia radica en que la base atómica está en coordenadas directas y no en cartesianas [ver Fig. 3.5 y 3.3]. También es importante recalcar que los datos entre ambos archivos no difieren mucho entre sí, esto significa que inicialmente dimos una configuración cercana al equilibrio mecánico.

²Laboratorio Regional de Cómputo de Alto Desempeño.

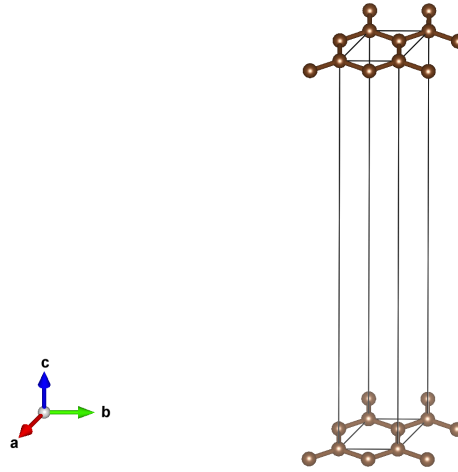


Figura 3.6 : Celda unitaria optimizada de la estructura cristalina del grafeno visualizada en el programa VESTA.

Con ayuda del programa VESTA [51] podemos visualizar la celda unitaria optimizada de nuestra estructura cristalina del grafeno [ver Fig. 3.6].

3.3. Densidad de estados (DOS)

Para calcular la densidad de estados³ del sistema, se necesita realizar previamente el cálculo de autoconsistencia (Self-Consistence calculation) también conocido como el método de Hartree-Fock [ver Sección 2.4.4]. Este método se utiliza para determinar la energía de un sistema de muchos cuerpos en un estado estacionario. Para comenzar este cálculo creamos una nueva carpeta en nuestra cuenta en LARCAD y colocamos nuevamente los 4 archivos de entrada.

En el archivo INCAR modificamos ligeramente algunos parámetros con respecto al archivo INCAR anterior [ver Fig. 3.2], por ejemplo; pedimos que

³DOS por sus siglas en inglés.


```

! SC - Calculation
System = Graphene
PREC = Accurate
ISTART = 0          ! New calculation
ICHARG = 2
#####
! Electronic optimization
ENCLUT = 520        ! 130 % of the ENMAX value in the POTCAR file
ISMEAR = 0
SIGMA = 0.05
#####
! Ionic relaxation
! ITSF = 2          ! Relaxing atoms
! IBRION = -1       ! No update
! NSW = 0           ! Number of ionic steps
EDIFF = 1e-6
EDIFFG = -0.01     ! Forces smaller than 0.01 A/eV
#####
ISYM = 0
LREAL = .FALSE.
LWAVE = .TRUE.
LCHARGE = .TRUE.

```

Figura 3.7 : Archivo INCAR para el cálculo SC.

no haya una actualización para la relajación iónica y que se escriban las densidades de carga⁴ [ver Fig. 3.7]. Para el archivo POSCAR, simplemente tomamos nuestro archivo CONTCAR del cálculo anterior [ver Fig. 3.5] y lo nombramos POSCAR, en lo que respecta a los archivos POTCAR y KPOINTS son los mismos que se utilizaron en el cálculo previo. Una vez terminado el cálculo de autoconsistencia, el archivo de nuestro interés es CHGCAR que contiene la densidad de carga electrónica en la configuración nuclear estabilizada [ver Fig. 3.8].

En este punto ya es posible calcular la densidad de estados del sistema, nuevamente creamos una carpeta en nuestro usuario y copiamos exactamente los archivos: POSCAR, POTCAR, KPOINTS y CHGCAR. En el archivo INCAR especificamos que se haga lectura de la densidad de carga (archivo CHGCAR) y también indicamos el número de puntos de densidad de estados que se quiere evaluar [ver Fig. 3.9].

⁴Archivos CHGCAR y CHG

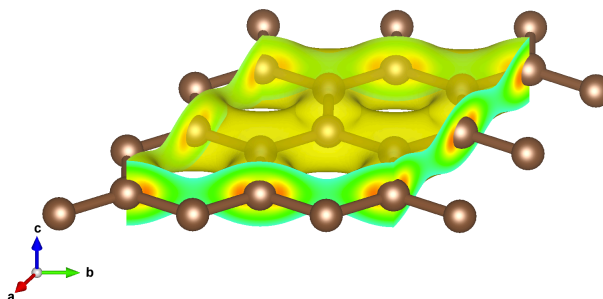


Figura 3.8 : Densidad de carga electrónica del grafeno visualizada en VESTA.

```

INCAR
! DOS calculation
System = Graphene
PREC = Accurate
ISTART = 1          ! Charge densities read from CHGCAR
ICHARG = 11
#####
! Electronic optimization
ENCUT = 520        ! 130 % of the ENMAX value in the POTCAR file
ISMEAR = -5        ! Tetrahedron method, suggested for DOS calculations
SIGMA = 0.05
#####
# DOS calculations
LORBIT = 11        ! Output DOSCAR and PROCAR
NEDOS = 4000       ! Number of points of DOS
IEMIN = -6.0       ! Specifies the boundary of energy range
IEMAX = 2.0
#####
! Ionic relaxation
!ISTIF = 2         ! Relaxing atoms
IBRION = -1        ! No update
NSW = 0            ! Number of ionic steps
EDIFF = 1e-6
EDIFFG = -0.01    ! Forces smaller than 0.01 A/eV
#####
ISYM = 0
LREAL = .FALSE.
LWAVE = .TRUE.
LCHARGE = .TRUE.

```

Figura 3.9 : Archivo INCAR para la densidad de estado del grafeno.

Al término del cálculo analizamos el archivo de salida DOSCAR, este archivo recordemos contiene información acerca de las energías de amarre de los electrones a los núcleos, la integral de la DOS y del número de estados por unidad de energía de la nube electrónica del sistema. A partir de P4VASP⁵

⁵Es una poderosa herramienta de visualización 3D de código abierto para el paquete de software de química computacional y dinámica molecular VASP.

graficaremos la densidad de estados electrónicos del grafeno [ver Fig. 3.10].

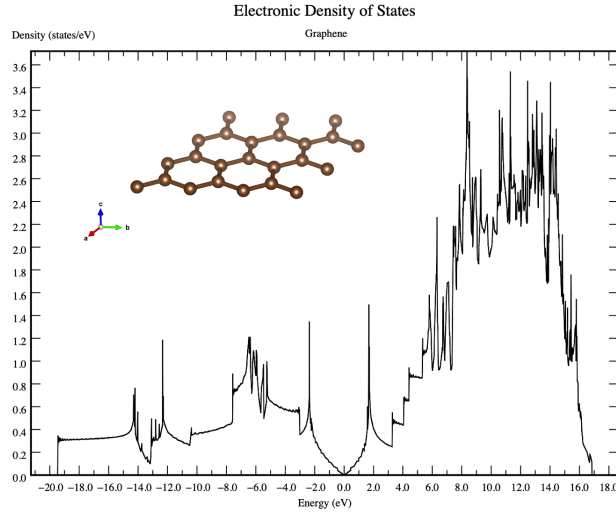


Figura 3.10 : Densidad de estados electrónicos del grafeno.

Observemos que a nivel de Fermi obtenemos la relación $\rho(E) \propto |E|$ tal como lo reportan K. S. Novoselov et al [37].

3.4. Estructura de bandas

Como punto final en el estudio de las propiedades electrónicas del grafeno estudiaremos la estructura de bandas. En estas instancias se tiene todos los ingredientes para cálculo en VASP, en una nueva carpeta en nuestro usuario colocamos los archivos; INCAR, POSCAR, POTCAR y CHGCAR, estos corresponden del cálculo anterior (DOS). El archivo que se modificará es el KPOINTS, aquí colocaremos el k-path adecuado con apoyo de VASPKIT⁶

⁶VASPKIT es un programa de línea de comandos que tiene como objetivo proporcionar una interfaz potente y fácil de usar para realizar análisis de alto rendimiento de una variedad de propiedades de material a partir de los datos en bruto producidos por el código VASP.

[52] para la estructura de bandas del grafeno [ver Fig. 3.11].

```

KPOINTS
k-points along high symmetry lines for hexagonal str.
26
Line
reciprocal
0.000 0.000 0.000 | G
0.333 0.666 0.000 | K
0.500 0.000 0.000 | M
0.500 0.000 0.000 | M
0.000 0.000 0.000 | K
0.000 0.000 0.000 | K

```

Figura 3.11 : Archivo KPOINTS de la estructura de bandas del grafeno.

Al final del cálculo con apoyo de P4VASP obtenemos la estructura de bandas electrónicas del grafeno [ver Fig. 3.12].

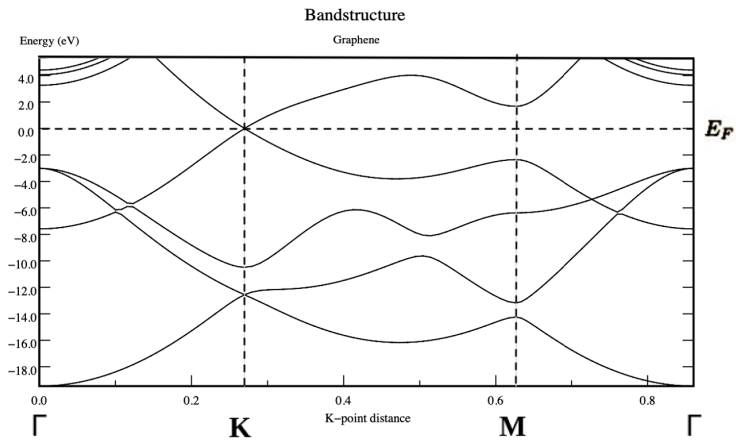


Figura 3.12 : Estructura de bandas del grafeno.

La teoría del funcional de la densidad simplifica los cálculos dejando a un lado el uso de la función de onda en la determinación del movimiento de electrones y átomos en una estructura cristalina. En su lugar, calcula las propiedades electrónicas a partir de la densidad tridimensional de las nubes

electrónicas del sistema, y a partir del uso de VASP fue posible reproducir los resultados reportados de las propiedades electrónicas del grafeno [37, 53], de esta manera se cimientan las bases para el estudio de un material de grafeno curvo que se abordarán en el siguiente capítulo.

Parte II.- Resultados

Resumen

En este segundo segmento de la tesis, el objetivo es presentar los resultados detallados de la investigación en donde se analizará y se discutirá su relevancia en relación con los objetivos planteados al inicio de esta tesis. Además, se abordarán las interpretaciones y conclusiones, así como posibles implicaciones y recomendaciones para futuras investigaciones.

Capítulo 4

Grafeno Catenoidal

Como sabemos, idealmente una hoja de grafeno es un cristal 2D perfecto en el que los átomos de carbono se ordenan perfectamente en hexágonos. Pero en realidad, una lámina de grafeno no muestra ni una perfecta horizontalidad ni una perfecta simetría hexagonal. De hecho, inevitablemente contiene un número considerable de defectos. Desde el punto de vista estructural, los defectos en una hoja de grafeno se clasifican en cuatro grupos:

- (1) Defectos topológicos;
- (2) Presencia de enlaces químicos sp^3 debido a la hibridación;
- (3) Vacante y/o dislocación;
- (4) Impureza sin carbono.

La clase de defectos topológicos es un punto importante de este capítulo. Un defecto topológico se produce al introducir anillos no hexagonales (por ejemplo, pentágonos o heptágonos) en la hoja de grafeno perfecta con simetría hexagonal. Veremos más adelante que la presencia de defectos topológicos puede proporcionar una alteración significativa en la geometría de los nanocarbonos. Aquí, el término topología significa la conectividad local

de los átomos de carbono a través de enlaces covalentes, aunque tiene un significado más abstracto como jerga matemática [54]. Al ser insertado en una lámina de grafeno, un defecto topológico rompe localmente el orden estructural de la red hexagonal, alterando la conectividad de los átomos de carbono en una región limitada. Veremos que la presencia de defectos topológicos puede causar una alteración significativa en la geometría de las láminas de nanocarbono originalmente planas.

Se debe hacer hincapié en el hecho de que la alteración inducida por defectos en la geometría puede permitir una nueva clase de materiales de nanocarbono de forma anómala dotados de curvatura superficial y/o torsión. Los ejemplos incluyen, entre otros, polímeros de fullereno en forma de maní [55], nanoespiras de carbono en forma de hélice [56] y Schwarzita de carbono en forma de giroide [21]. Muchas propiedades intrigantes de los tres nanocarbonos de forma anómala se han revelado en la última década. En este contexto, el presente capítulo tiene como objetivo obtener un material de nanocarbono con estructura catenoidal, y en particular determinaremos la densidad de carga y estados con ayuda de VASP.

4.1. Defectos en Nanocarbonos sp^2

Los defectos topológicos juegan un papel crucial en la adaptación de las estructuras de equilibrio de las láminas de grafeno [21, 25]. Esto se debe a que la inserción de defectos topológicos en una hoja de grafeno provoca un cambio en la conectividad local de los átomos de carbono, lo que da como resultado un cambio global en la geometría de la hoja de la estructura plana a la curva, como se explica a continuación. La Fig. 4.1 proporciona un diagrama esquemático de la generación de la curvatura de la superficie mediante la inserción de defectos topológicos [57, 58]. Supongamos que tenemos

una lámina de grafeno monoatómica con simetría hexagonal perfecta, como se muestra en el panel central de la Fig. 4.1.

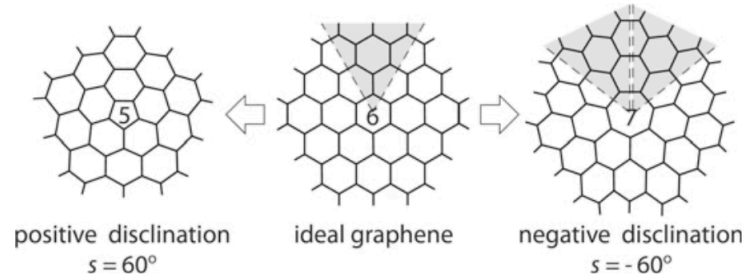


Figura 4.1 : Diagrama de generación de curvatura superficial por inserción de defecto topológico. Una porción de una hoja de grafeno inicialmente plana (centro) se dota de una curvatura de superficie positiva (izquierda) o negativa (derecha) cuando se elimina o agrega una cuña $\pi/3$ (área sombreada) de la hoja original, respectivamente. Fuente [58].

A continuación, quitamos una cuña de $\pi/3$ de la hoja original y tiramos de los dos nuevos bordes para conectarlos entre sí. La estructura resultante se muestra en el panel izquierdo de la Fig. 4.1. Se debe prestar especial atención a que la conectividad atómica local se altere solo en los anillos centrales de carbono, desde el hexágono hasta el pentágono, mientras que otros anillos hexagonales que rodean el anillo central no hexagonal permanecen sin cambios. Este diagrama muestra que la inserción artificial de un anillo de pentágono en la lámina hexagonal perfecta produce una transformación de la capa plana a una capa de grafito curvada positivamente.

Una situación contrastante se ilustra en el panel derecho de la Fig. 4.1. En esa situación, una cuña de $\pi/3$ sombreada en el panel central se reemplaza a la fuerza por dos cuñas de $\pi/3$ ya unidas. Como consecuencia, la lámina originalmente plana (panel central) se transforma en una lámina de grafito en forma de silla de montar que tiene un anillo heptagonal en el centro

(panel derecho). De manera similar al caso anterior, la configuración atómica local permanece sin cambios a excepción del anillo central no hexagonal. Hemos sabido que el cambio artificial en la conectividad atómica local en el centro de una lámina plana de grafeno da como resultado un grafeno curvado positiva o negativamente. Entonces, ¿qué sucede si el hexágono central se reemplaza por anillos más grandes (octágono, nonágono o más) o anillos más pequeños (cuadrado y triángulo)? En principio, se puede construir una hoja severamente curvada con curvatura superficial positiva o negativa a través de tal alteración de la conectividad local; sin embargo, la mayoría de ellos resultaron ser mecánicamente inestables y, por lo tanto, será difícil sintetizarlos en la realidad [59].

4.2. Estructura catenoidal

A continuación construiremos una nanoestructura catenoidal, es decir, una estructura con geometría hiperbólica cuya curvatura gaussiana $K < 0$. Como base de nuestra estructura consideraremos los primeros 16 átomos de un nanotubo armchair de carbono de pared simple (SWNT) que se generará mediante el software VMD, este es un programa de visualización molecular para mostrar, animar y analizar grandes sistemas biomoleculares utilizando gráficos en 3D y secuencias de comandos integradas [60] [ver Fig. 4.2]. Una vez realizado esto exportamos las coordenadas a un archivo .xyz y posteriormente lo abrimos en el programa Avogadro, este programa es un editor y visualizador de moléculas avanzado diseñado para uso multiplataforma en química computacional, modelado molecular, bioinformática, ciencia de materiales y áreas relacionadas [61]. Con ayuda de este editor se colocó átomo por átomo a la base inicial dado por VMD, y para inducir la curvatura negativa se insertaron 8 anillos heptagonales; dos al frente, dos atrás y dos en ambos costados de la estructura [ver Fig. 4.3]. La nanoestructura catenoidal

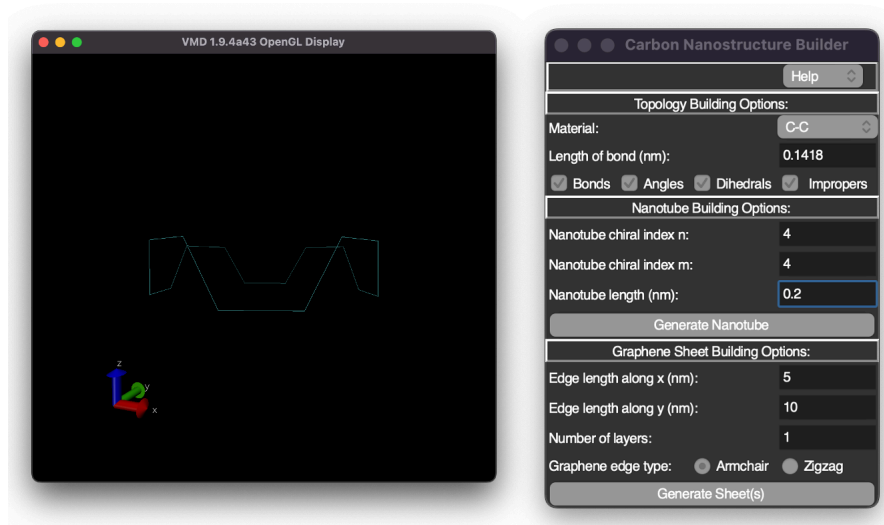


Figura 4.2 : Generador de nanotubo en VMD.

tiene un total de 104 átomos de carbono y el cuello un diámetro de 5.77 \AA . Una vez obtenido la estructura exportamos los datos a VESTA para crear la celda unitaria de trabajo que servirá para la optimización de la geometría en VASP como se detalla en la siguiente sección.

4.3. Optimización geométrica con VASP

Para realizar la optimización geométrica de la nanoestructura catenoidal en VASP, se necesita configurar los 4 archivos de entrada; INCAR, POSCAR, POTCAR y KPOINT [ver Sección A]. En el archivo INCAR especificamos que se realizará una optimización electrónica y relajación iónica de la estructura [ver Fig. 4.4]. Para más detalles acerca de los parámetros utilizados en las etiquetas consulte [50]. Para el archivo POSCAR colocaremos los datos de la estructura, es decir, las dimensiones de la celda unitaria como la posición atómica de cada carbono [ver Fig. 4.5].

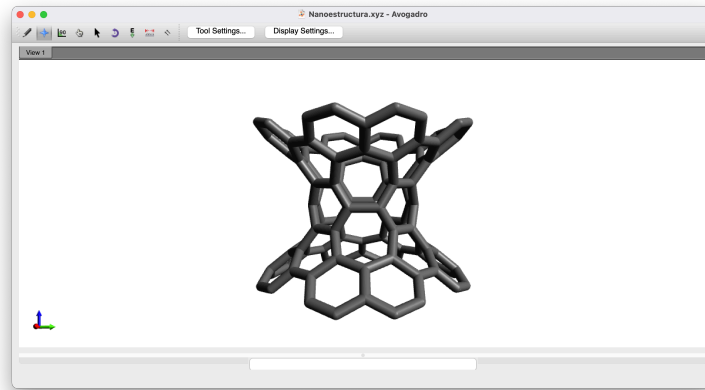


Figura 4.3 : Nanoestructura catenoidal obtenida con Avogadro.

```
! Relaxation
System = Catenoid
PREC = Normal
ISTART = 0
ICHARG = 2
#####
! Electronic optimization
ENCUT = 520          ! 130 % of the ENMAX value in the POTCAR file
ISMEAR = 0
SIGMA = 0.05
#####
! Ionic relaxation
ISIF = 2             ! Relaxing atoms
IBRION = 2           ! CG
NSW = 600           ! Number of ionic steps
EDIFF = 1e-6
EDIFFG = -0.01      ! Forces smaller than 0.01 A/eV
#####
ISYM = 0
LREAL = .TRUE.
LWAVE = .FALSE.
LOCHARGE = .FALSE.
```

Figura 4.4 : Parámetros del archivo INCAR para la optimización geométrica de la nanoestructura catenoidal.

En cuanto al archivo POTCAR recordemos es una lista de pseudopotenciales para cada átomo que conforma el sistema, en nuestro caso el átomo corresponde al carbono C que es suministrado por el paquete VASP, el archivo a usar es exactamente el que se usó con los cálculos de optimización del grafeno.

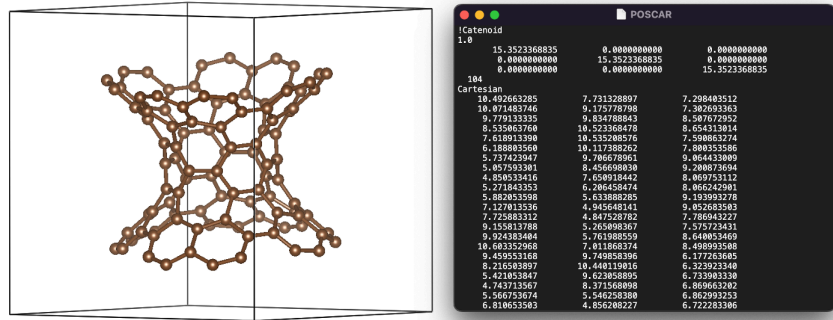


Figura 4.5 : En la parte izquierda se muestra la celda unitaria de trabajo y la parte derecha el archivo POSCAR de la nanoestructura catenoidal.

En el archivo KPOINTS especificaremos los puntos que VASP utilizará para muestrear la primera zona de Brillouin en el espacio recíproco. Aquí utilizaremos una generación automática de k-mesh con el método Γ -centered asignando el número de subdivisiones N_1 , N_2 y N_3 como 1, 1 y 1 respectivamente [ver Fig. 4.6].

The KPOINTS file content is as follows:

```

KPOINTS
Auto
0
Gamma
1 1 1
0. 0. 0.

```

Figura 4.6 : Archivo KPOINT de la nanoestructura catenoidal.

Estos archivos de entrada se colocan en una carpeta en nuestra cuenta LAR-CAD y una vez finalizado el cálculo en VASP, el archivo de salida que nos interesa es el CONTCAR que contiene la geometría de red y posiciones iónicas después de la optimización [ver Fig. 4.7].

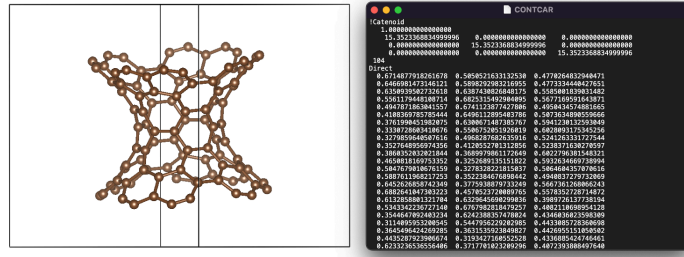


Figura 4.7 : En la parte izquierda se muestra la celda unitaria de trabajo optimizada y la parte derecha el archivo CONTCAR de la nanoestructura catenoidal.

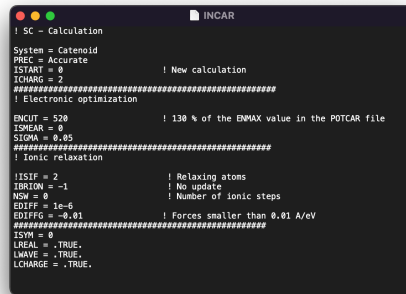
Observemos que el archivo CONTCAR y POSCAR son muy similares, la diferencia radica en que las posiciones atómicas están en coordenadas directas¹ y no en cartesianas [ver parte derecha Fig. 4.7 y 4.5]. También es importante recalcar que las estructuras de ambos archivos no difieren mucho entre sí, esto significa que inicialmente dimos una configuración cercana al equilibrio mecánico [ver parte izquierda Fig. 4.7 y 4.5].

4.4. Densidad de estados (DOS)

Para calcular la densidad de estados del sistema, primero realizaremos el cálculo de autoconsistencia también conocido como el método de Hartree-Fock [ver Sección 2.4.4]. Este método se utiliza para determinar la energía de un sistema de muchos cuerpos en un estado estacionario. Para comenzar este cálculo creamos una nueva carpeta en nuestra cuenta en LARCAD y colocamos nuevamente los 4 archivos de entrada.

En el archivo INCAR modificamos ligeramente algunos parámetros con respecto al archivo INCAR anterior [ver Fig. 4.4], por ejemplo; pedimos que

¹Es un sistema de coordenadas en el que los vectores base utilizados para describir el espacio son los vectores de red de una estructura cristalina periódica.



```

! SC - Calculation
System = Catenoid
PREC = Accurate
ISTART = 0
ICHARG = 2
#####
! Electronic optimization
#####
DNCUT = 520
ISMEAR = 0
SIGMA = 0.05
#####
! Ionic relaxation
#####
! IISF = 2
IBRION = -1
NSW = 0
EDIFF = 1e-6
EDIFFG = -0.01
ISYM = 0
LREAL = .TRUE.
LWAVE = .TRUE.
LCHARGE = .TRUE.

```

Figura 4.8 : Archivo INCAR para el cálculo SC.

no haya una actualización para la relajación iónica y que se escriban las densidades de carga² [ver Fig. 4.8]. Para el archivo POSCAR, simplemente tomamos nuestro archivo CONTCAR del cálculo anterior [ver Fig. 4.7] y lo nombramos POSCAR, en lo que respecta a los archivos POTCAR y KPOINTS son los mismos que se utilizaron en el cálculo previo. Una vez terminado el cálculo de autoconsistencia, el archivo de nuestro interés es CHGCAR que contiene la densidad de carga electrónica en la configuración nuclear estabilizada [ver Fig. 4.9].

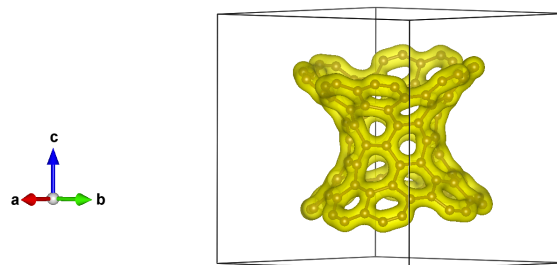
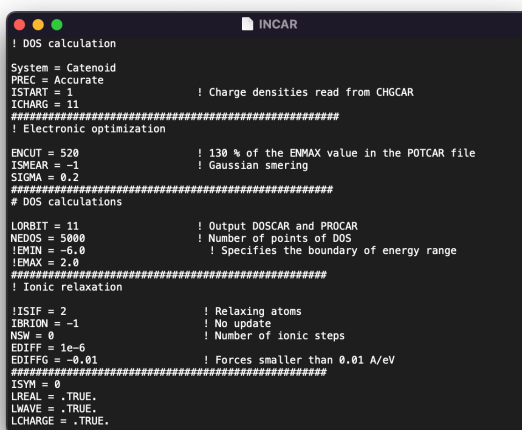


Figura 4.9 : Densidad de carga electrónica de la nanoestructura catenoidal visualizada en VESTA.

²Archivos CHGCAR y CHG

En este punto ya es posible calcular la densidad de estados del sistema, nuevamente creamos una carpeta en nuestro usuario y copiamos exactamente los archivos: POSCAR, POTCAR, KPOINTS y CHGCAR. En el archivo INCAR especificamos que se haga lectura de la densidad de carga (archivo CHGCAR) y también indicamos el número de puntos de densidad de estados que se quiere evaluar [ver Fig. 4.10].

Al término del cálculo analizamos el archivo de salida DOSCAR, este archivo recordemos contiene información acerca de las energías de amarre de los electrones a los núcleos, la integral de la DOS y del número de estados por unidad de energía de la nube electrónica del sistema. A partir de P4VASP³ graficaremos la densidad de estados electrónicos del grafeno [ver Fig. 4.11].



```
! DOS calculation
System = Catenoid
PREC = Accurate
ISTART = 1                ! Charge densities read from CHGCAR
ICHARG = 11
#####
! Electronic optimization
ENCUT = 520              ! 130 % of the ENMAX value in the POTCAR file
ISMEAR = -1             ! Gaussian smearing
SIGMA = 0.2
#####
# DOS calculations
LORBIT = 11             ! Output DOSCAR and PROCAR
NEDOS = 5000           ! Number of points of DOS
LEMIN = -6.0           ! Specifies the boundary of energy range
LEMAX = 2.0
#####
! Ionic relaxation
! ISTART = 0           ! Relaxing atoms
IBRION = -1           ! No update
NSW = 0              ! Number of ionic steps
EDIFF = 1e-6
EDIFFG = -0.01       ! Forces smaller than 0.01 A/eV
#####
ISYM = 0
LREAL = .TRUE.
LWAVE = .TRUE.
LCHARGE = .TRUE.
```

Figura 4.10 : Archivo INCAR para la DOS del grafeno catenoidal.

³Es una poderosa herramienta de visualización 3D de código abierto para el paquete de software de química computacional y dinámica molecular VASP.

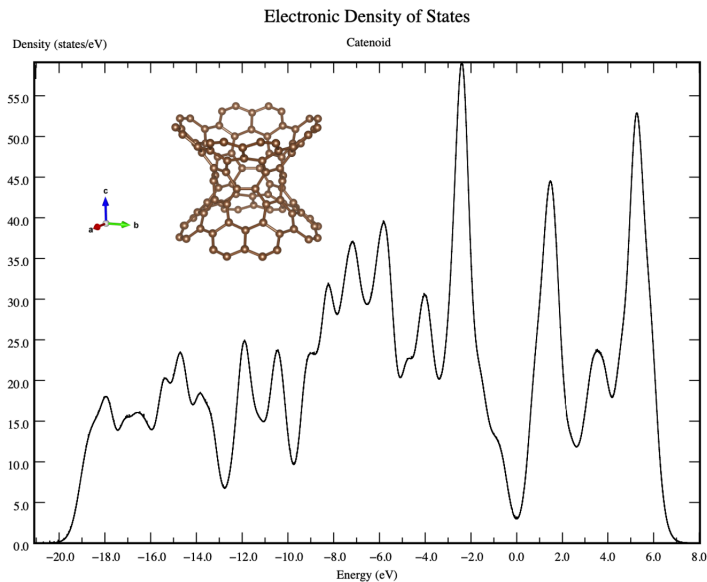


Figura 4.11 : DOS del grafeno catenoidal.

En este capítulo se ha mostrado que nuestra estructura hipotética de grafeno curvo con geometría de una superficie catenoidal es una estructura estable. Además hemos ido más allá dando los primeros cálculos de la densidad de carga y densidad de estados, sin embargo, esto es apenas el comienzo de nuevas investigaciones; cabe mencionar que VASP tiene sus limitaciones para estructuras moleculares como es nuestro caso por ende el primer paso sería realizar nuevamente la optimización de la estructura con ayuda de otras herramientas como Quantum Espresso o Gaussian [62,63] y comparar los resultados, posteriormente a partir de éstas herramientas estudiar sus propiedades electrónicas, mecánica, termodinámicas, etc.

Con esto se da las bases de una estructura que a primeros principios es estable y damos pase al siguiente capítulo con otra perspectiva teórica para estudiar los fenómenos de transporte electrónico de este nuevo material.

Capítulo 5

Estados de Dirac en materiales curvos de carbono

En este capítulo, presentamos el modelo de Dirac en una geometría de espacio-tiempo con la estructura global $\mathbb{M} = \mathbb{R} \times \Sigma$, donde Σ es una superficie mínima. Posteriormente, Σ se especifica como un miembro concreto de la familia de superficies mínimas de Bour. Estas superficies se introducen ya que analizaremos la propagación electrónica sobre materiales asociados al espacio-tiempo $\mathbb{R} \times \Sigma$.

5.1. Preliminares geométricos

En esta sección se introducen preliminares geométricos adecuados para establecer el análisis de grados de libertad electrónicos para materiales curvos de Dirac realizados en este trabajo de investigación. En particular, se introduce el formalismo para la geometría de un espacio-tiempo $2 + 1$, lo que nos permite escribir la ecuación de Dirac sobre un espacio-tiempo curvo asociado al material curvo de Dirac.

5.1.1. Coordenadas naturales

Consideremos un espacio-tiempo estacionario donde la parte espacial corresponde a la representación de WE de las superficies mínimas con curvatura gaussiana negativa descrita por la siguiente métrica

$$ds^2 = -v_F^2 dt^2 + \Lambda^2(\omega) |d\omega|^2, \quad (5.1)$$

donde $\Lambda^2(\omega) = |\mathcal{F}(\omega)|^2 (1 + |\omega|^2)^2$ con $\omega = u + iv$. En general se sabe que $ds^2 = g_{\mu\nu} dx^\mu dx^\nu$, de esta manera se concluye que la métrica en su forma matricial se escribe como

$$g_{\mu\nu} = \begin{pmatrix} -v_F^2 & 0 & 0 \\ 0 & \Lambda^2(u, v) & 0 \\ 0 & 0 & \Lambda^2(u, v) \end{pmatrix}, \quad (5.2)$$

por otra parte, el tensor métrico en un espacio-tiempo general puede ser escrito en términos de los vierbeins, esto es

$$g_{\mu\nu} = \eta_{ab} e_\mu^a(x) e_\nu^b(x), \quad (5.3)$$

aquí η_{ab} es la métrica de Minkowski. De la ecuación (5.2) observamos que los elementos g_{tt} , g_{uu} y g_{vv} son los únicos elementos no cero, por lo tanto a partir de esto y de la ecuación (5.3) deducimos que

$$e_t^0 = v_F, \quad e_u^1 = \Lambda(u, v), \quad e_v^2 = \Lambda(u, v), \quad (5.4)$$

y las demás combinaciones son cero. Un punto importante a mencionar es que los índices griegos suben y bajan con la métrica espacio-temporal mientras que los índices latinos con la métrica de Minkowski, es decir

$$e^{\mu a} = e_\nu^a g^{\nu\mu}, \quad e_{\mu a} = e_\mu^b \eta_{ba}, \quad (5.5)$$

con esto tenemos el registro completo de los vierbeins

$$\begin{aligned} e_t^0 &= v_F & e^{t0} &= -v_F^{-1} & e_{t0} &= -v_F, \\ e_u^1 &= \Lambda(u, v) & e^{u1} &= \Lambda^{-1}(u, v) & e_{u1} &= \Lambda(u, v), \\ e_v^2 &= \Lambda(u, v) & e^{v2} &= \Lambda^{-1}(u, v) & e_{v2} &= \Lambda(u, v). \end{aligned} \quad (5.6)$$

A continuación calcularemos la conexión afín $\Gamma_{\mu\nu}^\sigma$

$$\Gamma_{\mu\nu}^\sigma = \frac{1}{2} g^{\sigma\gamma} (\partial_\nu g_{\gamma\mu} + \partial_\mu g_{\gamma\nu} - \partial_\gamma g_{\mu\nu}), \quad (5.7)$$

analizando por casos podemos comprobar que los elementos no cero son

$$\begin{aligned} \Gamma^u_{uu} &= \frac{1}{2} g^{uu} \partial_u g_{uu} & \Gamma^v_{uu} &= -\frac{1}{2} g^{vv} \partial_v g_{uu}, \\ \Gamma^u_{uv} &= \frac{1}{2} g^{uu} \partial_u g_{uv} & \Gamma^v_{uv} &= \frac{1}{2} g^{vv} \partial_u g_{vv}, \\ \Gamma^u_{vv} &= -\frac{1}{2} g^{uu} \partial_u g_{vv} & \Gamma^v_{vv} &= \frac{1}{2} g^{vv} \partial_v g_{vv}, \end{aligned} \quad (5.8)$$

sustituyendo (5.3), (5.6) en (5.8) se obtiene

$$\begin{aligned} \Gamma^u_{uu} &= \frac{\Lambda_u(u, v)}{\Lambda(u, v)} & \Gamma^v_{uu} &= -\frac{\Lambda_v(u, v)}{\Lambda(u, v)}, \\ \Gamma^u_{uv} &= \frac{\Lambda_v(u, v)}{\Lambda(u, v)} & \Gamma^v_{uv} &= \frac{\Lambda_u(u, v)}{\Lambda(u, v)}, \quad (5.9) \\ \Gamma^u_{vv} &= -\frac{\Lambda_u(u, v)}{\Lambda(u, v)} & \Gamma^v_{vv} &= \frac{\Lambda_v(u, v)}{\Lambda(u, v)}. \end{aligned}$$

Una vez calculado la conexión afín, procedemos a calcular los coeficientes de conexión espín ω_α^{AB}

$$\omega_\alpha^{AB} = e_\nu^A \Gamma^\nu_{\mu\alpha} e^{\mu B} - e^{\nu B} \partial_\alpha e_\nu^A, \quad (5.10)$$

notemos que el término $\omega_t^{AB} = 0$ para cualquier combinación de AB . Consideremos el caso $\alpha = u$, así

$$\begin{aligned} \omega_u^{AB} &= e_u^A \Gamma^u_{uu} e^{uB} + e_u^A \Gamma^u_{vu} e^{vB} + e_v^A \Gamma^v_{uu} e^{uB} \\ &\quad + e_v^A \Gamma^v_{vu} e^{vB} - e^{uB} \partial_u e_u^A - e^{vB} \partial_u e_v^A, \end{aligned} \quad (5.11)$$

¹Se cumple además que $\Gamma_{\mu\nu}^\sigma = \Gamma_{\nu\mu}^\sigma$

²Aquí $\Lambda_u(u, v) = \partial_u \Lambda(u, v)$, $\Lambda_v(u, v) = \partial_v \Lambda(u, v)$

de la ecuación (5.11) podemos observar que los términos no cero ocurren cuando $AB \rightarrow \{11, 12, 21, 22\}$, por lo tanto

$$\begin{aligned}\omega_u^{11} &= e_u^1 \Gamma_{uu}^u e^{u1} - e^{u1} \partial_u e_u^1 & \omega_u^{12} &= e_u^1 \Gamma_{vu}^u e^{v2}, \\ \omega_u^{21} &= e_v^2 \Gamma_{uu}^v e^{u1} & \omega_u^{22} &= e_v^2 \Gamma_{vu}^v e^{v2} - e^{v2} \partial_u e_v^2,\end{aligned}\quad (5.12)$$

sustituyendo (5.6), (5.9) en (5.12), finalmente se obtiene

$$\begin{aligned}\omega_u^{11} &= 0 & \omega_u^{12} &= \frac{\Lambda_v(u, v)}{\Lambda(u, v)}, \\ \omega_u^{21} &= -\frac{\Lambda_v(u, v)}{\Lambda(u, v)} & \omega_u^{22} &= 0,\end{aligned}\quad (5.13)$$

Como último caso nos queda analizar $\alpha = v$

$$\begin{aligned}\omega_v^{AB} &= e_u^A \Gamma_{uv}^u e^{uB} + e_u^A \Gamma_{vv}^u e^{vB} + e_v^A \Gamma_{uv}^v e^{uB} \\ &+ e_v^A \Gamma_{vv}^v e^{vB} - e^{uB} \partial_v e_u^A - e^{vB} \partial_v e_v^A,\end{aligned}\quad (5.14)$$

de forma similar que el caso anterior, los elementos no cero ocurre cuando $AB \rightarrow \{11, 12, 21, 22\}$, en consecuencia

$$\begin{aligned}\omega_v^{11} &= e_u^1 \Gamma_{uv}^u e^{u1} - e^{u1} \partial_v e_u^1 & \omega_v^{12} &= e_u^1 \Gamma_{vv}^u e^{v2}, \\ \omega_v^{21} &= e_v^2 \Gamma_{uv}^v e^{u1} & \omega_v^{22} &= e_v^2 \Gamma_{vv}^v e^{v2} - e^{v2} \partial_v e_v^2,\end{aligned}\quad (5.15)$$

sustituyendo (5.6), (5.9) en (5.15), por lo tanto

$$\begin{aligned}\omega_v^{11} &= 0 & \omega_v^{12} &= -\frac{\Lambda_u(u, v)}{\Lambda(u, v)}, \\ \omega_v^{21} &= \frac{\Lambda_u(u, v)}{\Lambda(u, v)} & \omega_v^{22} &= 0.\end{aligned}\quad (5.16)$$

A continuación calcularemos la conexión espín

$$\Omega_\alpha = \frac{1}{8} \omega_\alpha^{AB} [\gamma_A, \gamma_B].^3 \quad (5.17)$$

Los γ_A son las matrices de Dirac que satisfacen el álgebra de Clifford [ver (2.36)], se definen

$$\gamma^0 = -i\sigma_3, \quad \gamma^1 = \sigma_2, \quad \gamma^2 = -\sigma_1, \quad (5.18)$$

³Donde $[\gamma_A, \gamma_B] = \gamma_A \gamma_B - \gamma_B \gamma_A$ es la relación de conmutación canónica

donde σ_a con $a = 1, 2, 3$ son las matrices de Pauli y además $\gamma_A = \eta_{AB}\gamma^B$. A partir de la observación de $\omega_t^{AB} = 0$ para cualquier combinación de AB , concluimos que $\Omega_t = 0$ y los términos no cero son Ω_u y Ω_v . Comenzando el análisis de Ω_u , sustituimos (5.13) y (5.18) en la ecuación (5.17)

$$\begin{aligned}\Omega_u &= \frac{1}{8}\omega_u^{12}[\gamma_1, \gamma_2] + \frac{1}{8}\omega_u^{21}[\gamma_2, \gamma_1], \\ &= \frac{i}{2}\Lambda^{-1}(u, v)\Lambda_v(u, v)\sigma_3,\end{aligned}\tag{5.19}$$

de forma análoga calculamos Ω_v , se sustituye (5.16) y (5.18) en la ecuación (5.17), por lo tanto

$$\begin{aligned}\Omega_v &= \frac{1}{8}\omega_v^{12}[\gamma_1, \gamma_2] + \frac{1}{8}\omega_v^{21}[\gamma_2, \gamma_1], \\ &= -\frac{i}{2}\Lambda^{-1}(u, v)\Lambda_u(u, v)\sigma_3,\end{aligned}\tag{5.20}$$

Observemos que los vierbeins, la conexión afín y la conexión espín, es decir, todo el contenido geométrico está en términos del factor conforme $\Lambda(u, v)$ y sus derivadas parciales.

5.1.2. Coordenadas polares

Considerando el elemento de línea (5.1) y realizando el cambio de variable $u = r \cos \theta$ y $v = r \sin \theta$, obtenemos la métrica en coordenadas polares

$$ds^2 = -v_F^2 dt^2 + \Lambda^2(r, \theta) (dr^2 + r^2 d\theta^2),\tag{5.21}$$

en su forma matricial se escribe como

$$g_{\mu\nu} = \begin{pmatrix} -v_F^2 & 0 & 0 \\ 0 & \Lambda^2(r, \theta) & 0 \\ 0 & 0 & r^2 \Lambda^2(r, \theta) \end{pmatrix}.\tag{5.22}$$

De la ecuación (5.22) observamos que los elementos g_{tt} , g_{rr} y $g_{\theta\theta}$ son los únicos elementos no cero, por lo tanto a partir de esto y de la ecuación (5.3)

deducimos que

$$\begin{aligned}
e_t^0 &= v_F & e^{t0} &= -v_F^{-1} & e_{t0} &= -v_F, \\
e_r^1 &= \Lambda(r, \theta) & e^{r1} &= \Lambda^{-1}(r, \theta) & e_{r1} &= \Lambda(r, \theta), \\
e_{\theta^2} &= r\Lambda(r, \theta) & e^{\theta2} &= r^{-1}\Lambda^{-1}(r, \theta) & e_{\theta2} &= r\Lambda(r, \theta).
\end{aligned} \tag{5.23}$$

A continuación calcularemos la conexión afín $\Gamma_{\mu\nu}^\sigma$, analizando por casos podemos comprobar que los elementos no cero son

$$\begin{aligned}
\Gamma^r_{rr} &= \frac{1}{2}g^{rr}\partial_r g_{rr} & \Gamma^\theta_{rr} &= -\frac{1}{2}g^{\theta\theta}\partial_\theta g_{rr}, \\
\Gamma^r_{r\theta} &= \frac{1}{2}g^{rr}\partial_\theta g_{rr} & \Gamma^\theta_{r\theta} &= \frac{1}{2}g^{\theta\theta}\partial_r g_{\theta\theta}, \\
\Gamma^r_{\theta\theta} &= -\frac{1}{2}g^{rr}\partial_r g_{\theta\theta} & \Gamma^\theta_{\theta\theta} &= \frac{1}{2}g^{\theta\theta}\partial_\theta g_{\theta\theta},
\end{aligned} \tag{5.24}$$

sustituyendo (5.3), (5.23) en (5.24) se obtiene

$$\begin{aligned}
\Gamma^r_{rr} &= \frac{\Lambda_r(r, \theta)}{\Lambda(r, \theta)} & \Gamma^\theta_{rr} &= -\frac{\Lambda_\theta(r, \theta)}{r^2\Lambda(r, \theta)}, \\
\Gamma^r_{r\theta} &= \frac{\Lambda_\theta(r, \theta)}{\Lambda(r, \theta)} & \Gamma^\theta_{r\theta} &= \frac{1}{r} + \frac{\Lambda_r(r, \theta)}{\Lambda(r, \theta)}, \\
\Gamma^r_{\theta\theta} &= -r - \frac{r^2\Lambda_r(r, \theta)}{\Lambda(r, \theta)} & \Gamma^\theta_{\theta\theta} &= \frac{\Lambda_\theta(r, \theta)}{\Lambda(r, \theta)}.
\end{aligned} \tag{5.25}$$

Una vez calculado la conexión afín, procedemos a calcular los coeficientes de conexión espín ω_α^{AB} . De forma análoga a la sección anterior notemos que el término $\omega_t^{AB} = 0$ para cualquier combinación de AB y los términos no cero para ω_r^{AB} y ω_θ^{AB} son los siguientes

$$\begin{aligned}
\omega_r^{12} &= \frac{\Lambda_\theta(r, \theta)}{r\Lambda(r, \theta)} & \omega_r^{21} &= -\frac{\Lambda_\theta(r, \theta)}{r\Lambda(r, \theta)}, \\
\omega_\theta^{12} &= -1 - r\frac{\Lambda_r(r, \theta)}{\Lambda(r, \theta)} & \omega_\theta^{21} &= 1 + r\frac{\Lambda_r(r, \theta)}{\Lambda(r, \theta)},
\end{aligned} \tag{5.26}$$

y por consiguiente los términos de la conexión espín

$$\begin{aligned}
\Omega_t &= 0, \\
\Omega_r &= \frac{i}{2}\frac{\Lambda_\theta(r, \theta)}{r\Lambda(r, \theta)}\sigma_3, \\
\Omega_\theta &= -\frac{i}{2}\left(1 + r\frac{\Lambda_r(r, \theta)}{\Lambda(r, \theta)}\right)\sigma_3.
\end{aligned} \tag{5.27}$$

5.2. Ecuación de Dirac en la representación de WE

En la sección 5.1.1 calculamos el contenido geométrico necesario para obtener la ecuación de Dirac correspondiente a la representación de WE. Comenzamos a partir de la ecuación

$$i\underline{\gamma}^\alpha \nabla_\alpha \Psi = 0, \quad (5.28)$$

aquí $\underline{\gamma}^\alpha(x) = \gamma^A e^\alpha_A(x)$ y $\nabla_\alpha = \partial_\alpha + \Omega_\alpha$, expandiendo los índices contraídos

$$\begin{aligned} (\gamma^0 e^t_0 \partial_t + \gamma^1 e^u_1 \{\partial_u + \Omega_u\} + \gamma^2 e^v_2 \{\partial_v + \Omega_v\}) \Psi &= 0, \quad (5.29) \\ (\gamma^0 \gamma^0 e^t_0 \partial_t + \gamma^0 \gamma^1 e^u_1 \{\partial_u + \Omega_u\} + \gamma^0 \gamma^2 e^v_2 \{\partial_v + \Omega_v\}) \Psi &= 0, \end{aligned}$$

podemos verificar a partir de la ecuación (2.36) y (5.18) que $\gamma^0 \gamma^1 = -\sigma_1$, $\gamma^0 \gamma^2 = -\sigma_2$ y $\gamma^0 \gamma^0 = -\mathbb{1}_{2 \times 2}$, además sustituimos (5.6), (5.19) y (5.20) en la ecuación (5.29)

$$\begin{aligned} \left(-v_F^{-1} \partial_t - \sigma_1 \Lambda^{-1}(u, v) \{\partial_u + \frac{i}{2} \Lambda^{-1}(u, v) \Lambda_v(u, v) \sigma_3\} \right. \\ \left. - \sigma_2 \Lambda^{-1}(u, v) \{\partial_v - \frac{i}{2} \Lambda^{-1}(u, v) \Lambda_u(u, v) \sigma_3\} \right) \Psi = 0, \quad (5.30) \end{aligned}$$

por otra parte se tiene que

$$\sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad (5.31)$$

de esta manera $i\sigma_1\sigma_3 = \sigma_2$ y $i\sigma_2\sigma_3 = -\sigma_1$. Por lo tanto, sustituyendo las relaciones anteriores

$$\begin{aligned} \left(-v_F^{-1} \partial_t - \sigma_1 \Lambda^{-1}(u, v) \partial_u - \frac{1}{2} \Lambda^{-2}(u, v) \Lambda_v(u, v) \sigma_2 \right. \\ \left. - \sigma_2 \Lambda^{-1}(u, v) \partial_v - \frac{1}{2} \Lambda^{-2}(u, v) \Lambda_u(u, v) \sigma_1 \right) \Psi = 0, \quad (5.32) \end{aligned}$$

denotando el espinor de Dirac $2 + 1$ por Ψ y haciendo la transformación $\Psi = \Lambda^{-1/2} \Phi$, podemos demostrar que la ecuación (5.32) se reescribe como

$$i\hbar \partial_t \Phi = -i \frac{\hbar v_F}{\Lambda} (\sigma_1 \partial_u \Phi + \sigma_2 \partial_v \Phi). \quad (5.33)$$

Claramente, en el caso más simple cuando $\Lambda = 1$ las ecuaciones anteriores corresponden a la ecuación de Dirac en el espacio-tiempo de Minkowski. La ecuación de Dirac en estas coordenadas u, v es particularmente útil en el caso en que el factor conforme Λ depende de uno de las coordenadas. Por ejemplo, el catenoide, donde Λ depende solo de la variable u . Observemos que, la ecuación (5.33) es válida para cualquier espacio conformemente plano.

5.2.1. Superficie catenoidal

De acuerdo con la sección 2.2.1, la función de Weierstrass $\mathcal{F}(\omega)$ correspondiente al catenoide es

$$\mathcal{F}(\omega) = -\frac{\alpha}{2\omega^2} \quad \text{con } \omega \in \mathbb{C}/\{0\}, \quad (5.34)$$

y que la parametrización de la superficie está dado por

$$\mathbf{X}(u, v) = (\alpha \cosh u \cos v, -\alpha \cosh u \sin v, \alpha u). \quad (5.35)$$

Así, uno puede probar que el elemento de línea se escribe como

$$ds^2 = -v_F^2 dt^2 + \alpha^2 \cosh^2 u (du^2 + dv^2), \quad (5.36)$$

ahora comparando la expresión anterior con la ecuación (5.1) concluimos que el factor conforme es

$$\Lambda^2(u) = \alpha^2 \cosh^2 u. \quad (5.37)$$

A partir de (5.37) podemos obtener expresiones explícitas para los elementos geométricos planteados en la sección 5.1.1; los vierbeins (5.4)

$$e_t^0 = v_F, \quad e_u^1 = \alpha \cosh u, \quad e_v^2 = \alpha \cosh u, \quad (5.38)$$

la conexión afín (5.13) y (5.16)

$$\omega_u^{AB} = 0, \quad \omega_v^{AB} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -\tanh u \\ 0 & \tanh u & 0 \end{pmatrix}, \quad (5.39)$$

y por consiguiente los términos de la conexión espín

$$\begin{aligned}\Omega_t &= 0, \\ \Omega_u &= 0, \\ \Omega_v &= -\frac{i}{2} \tanh u \sigma_3.\end{aligned}\tag{5.40}$$

Observemos que la expresión (5.33) resulta particularmente útil para esta superficie ya que el factor conforme (5.37) solo depende de una de las dos coordenadas naturales. Además, es conveniente definir los siguientes cambios de variables $x = \alpha \sinh u$ y $v \rightarrow \varphi$ donde $x \in (-\infty, \infty)$ y $\varphi \in [0, 2\pi)$, por lo que no es difícil demostrar que $\alpha \cosh u \partial_u = \partial_x$. De hecho, la ecuación de Dirac se reduce a

$$i\hbar\partial_t\Phi = v_F\sigma_1\hat{p}_x\Phi + v_F\sigma_2V(x)\hat{\ell}_\theta\Phi,\tag{5.41}$$

donde $\hat{p}_x = -i\hbar\partial_x$ y $\hat{\ell}_\varphi = -i\hbar\partial_\varphi$ son los operadores de momento lineal y angular respectivamente; y el potencial efectivo esperado encontrado arriba $V(x) = 1/\sqrt{x^2 + \alpha^2}$. La conexión entre las coordenadas naturales y las coordenadas polares se pueden lograr usando el cambio de variable $r = e^u$ e identificando $\varphi \rightarrow \theta$.

5.3. Ecuación de Dirac en la representación polar

De forma análoga a la sección 5.2, encontraremos ahora la ecuación de Dirac en la representación polar. Para ellos usamos los resultados obtenidos del contenido geométrico calculado en 5.1.2, así comenzando con la ecuación (2.35) y expandiendo los índices nos queda

$$\begin{aligned}\left(\gamma^0 e^t \partial_t + \gamma^1 e^r \{\partial_r + \Omega_r\} + \gamma^2 e^\theta \{\partial_\theta + \Omega_\theta\}\right) \Psi &= 0, \\ \left(\gamma^0 \gamma^0 e^t \partial_t + \gamma^0 \gamma^1 e^r \{\partial_r + \Omega_r\} + \gamma^0 \gamma^2 e^\theta \{\partial_\theta + \Omega_\theta\}\right) \Psi &= 0,\end{aligned}\tag{5.42}$$

sustituyendo (5.23), (5.26) y (5.27), además que $\gamma^0\gamma^1 = -\sigma_1$, $\gamma^0\gamma^2 = -\sigma_2$ y $\gamma^0\gamma^0 = -\mathbb{1}_{2 \times 2}$, de esta manera la ecuación anterior se escribe como

$$\left(-v_F^{-1}\partial_t - \sigma_1\Lambda^{-1}\left\{ \partial_r + \frac{i}{2}\frac{\Lambda_\theta}{r\Lambda}\sigma_3 \right\} - \sigma_2(r\Lambda)^{-1}\left\{ \partial_\theta - \frac{i}{2}\left(1 + r\frac{\Lambda_r}{\Lambda}\right)\sigma_3 \right\} \right) \Psi = 0, \quad (5.43)$$

recordemos también que $i\sigma_1\sigma_3 = \sigma_2$ y $i\sigma_2\sigma_3 = -\sigma_1$, finalmente sustituyendo nos queda

$$\left(-v_F^{-1}\partial_t - \sigma_1\Lambda^{-1}\partial_r - \frac{1}{2}r^{-1}\Lambda^{-2}\Lambda_\theta\sigma_2 - \sigma_2r^{-1}\Lambda^{-1}\partial_\theta - \frac{1}{2}(r^{-1}\Lambda^{-1} + \Lambda^{-2}\Lambda_r)\sigma_1 \right) \Psi = 0, \quad (5.44)$$

denotando el espinor de Dirac $2 + 1$ por Ψ y haciendo la transformación $\Psi = r^{-1/2}\Lambda^{-1/2}\Phi$, podemos demostrar que la ecuación (5.44) se reescribe

$$i\hbar\partial_t\Phi = -i\frac{\hbar v_F}{\Lambda}\left(\sigma_1\partial_r\Phi + \frac{1}{r}\sigma_2\partial_\theta\Phi \right). \quad (5.45)$$

La ecuación de Dirac en estas coordenadas (r, θ) será particularmente útil en el caso en que el factor conforme Λ dependa de una de las coordenadas. Por ejemplo, para la familia de superficies mínimas de Bour, donde Λ depende solo de la variable r .

5.3.1. Superficies mínimas B_n

A continuación, nos centramos en una subfamilia de superficies mínimas conocida como superficie mínima de Bour o superficie B_n . De acuerdo con la sección 2.2.3, la función de Weierstrass $\mathcal{F}(\omega)$ se define

$$\mathcal{F}(\omega) = c\omega^{n-2} \text{ con } \omega \in \mathbb{C}/\{0\}, \quad (5.46)$$

donde $n \in \mathbb{R}$ y $c \in \mathbb{C}$, $c \neq 0$. Observemos que en el caso de las superficies de Bour el factor conforme depende solo de la norma $|\omega|$

$$\begin{aligned}\Lambda(\omega) &= |\mathcal{F}(\omega)| (1 + |\omega|^2), \\ &= |c| |\omega|^{n-2} (1 + |\omega|^2),\end{aligned}\tag{5.47}$$

así, observemos que es conveniente usar coordenadas polares (r, θ) , es decir, elegimos a $r = |\omega|$ y $\theta = \arctan(v/u)$. El factor conforme viene dado por

$$\Lambda(r) = |c| r^{n-2} (1 + r^2),\tag{5.48}$$

donde recordemos que $c \in \mathbb{C}$ y $n \geq 0$ son parámetros que dan una superficie de Bour específica. Ahora la curvatura gaussiana de estas superficies viene dada por

$$K(r) = -\frac{4}{|c|^2 r^{2(n-2)} (1 + r^2)^4}.\tag{5.49}$$

Por inspección, se puede ver que la curvatura gaussiana es finita para $r \in \mathbb{R}$ para los casos $n = 0, 1, 2$ [ver Fig. 5.1], mientras para $n > 2$ todas las superficies B_n tienen una curvatura singular en $r = 0$. Además, dado que la curvatura gaussiana tiene unidades de longitud al cuadrado inverso, entonces $|c|$ da una unidad de longitud natural para las superficies de Bour. Notemos que el catenoide y el helicoide tienen la misma curvatura gaussiana ya que estas superficies son isométricas entre sí. Es importante mencionar que, denotando $dA = \sqrt{g} dr d\theta$ el elemento de área, la curvatura total de cada superficie Σ tiene el mismo valor, esto es, $\int_{\Sigma} dA K = -4\pi$; sin embargo, esto no significa que tengan la misma topología, ya que, en cambio, la superficie de Enneper es simple conexa, pero el catenoide no lo es [64].

A continuación, se determina la geometría del potencial inducido para la superficies de Bour. Nuestro punto de partida es la ecuación de Dirac en

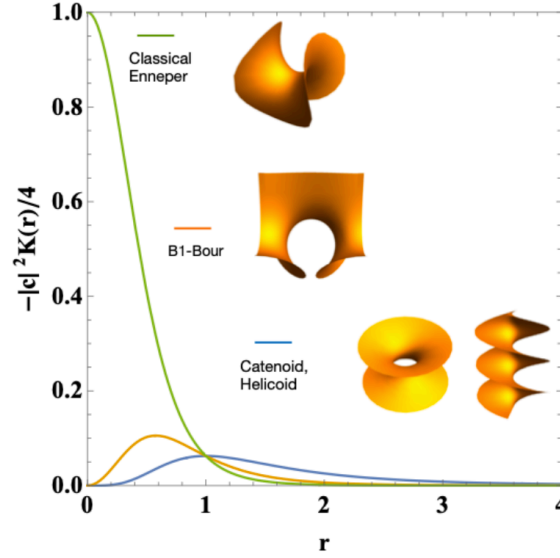


Figura 5.1 : Negativo de la curvatura gaussiana (5.49) vs a la coordenada radial r para los casos $n = 0, 1, 2$. La figura también muestra ejemplos de superficies mínimas de Bour de arriba hacia abajo: superficie de Enneper, superficie B_1 , Catenoide y Helicoide, respectivamente. Todas las superficies insertadas tienen un valor finito de curvatura.

coordenadas polares (5.45), donde el factor conforme $\Lambda(r)$ viene dado simplemente por (5.48). Dado que el factor conforme depende solo de una de las coordenadas, se puede hacer un cambio adicional de variable, usando la transformación

$$x_n(r) = \int \Lambda(r) dr = |c| \left[\frac{r^{n-1}}{n-1} + \frac{r^{n+1}}{n+1} \right], \quad (5.50)$$

para $n \neq 1$, mientras que para $n = 1$ el cambio de variable apropiado es

$$x_1(r) = |c| \left(\log r + \frac{1}{2} r^2 \right). \quad (5.51)$$

Se puede verificar que estas transformaciones son mapeos inyectivos, por lo que se puede garantizar la existencia de su función inversa correspondiente

$r = r(x)$, donde x se definiría en un dominio apropiado \mathcal{D}_x . Usando esta variable, la ecuación de Dirac (5.45) se puede simplificar a

$$i\hbar\partial_t\Phi = v_F\sigma_1\hat{p}_x\Phi + v_F\sigma_2V(x)\hat{\ell}_\theta\Phi, \quad (5.52)$$

donde $\hat{p}_x = -i\hbar\partial_x$ es el operador momento lineal y $\hat{\ell}_\theta = -i\hbar\partial_\theta$ es el operador momento angular. Notemos que, el segundo término de esta ecuación puede interpretarse como un potencial efectivo; aunque este término proviene completamente de la geometría intrínseca de la superficie, por lo tanto, este potencial es un potencial inducido por la geometría. El potencial efectivo está dado por

$$V(x) = \frac{1}{r(x)\Lambda(r(x))}. \quad (5.53)$$

Este potencial generaliza el potencial efectivo encontrado en [65] para el helicoide. Notemos que para aquellos casos con $n \geq 2$, como la superficie de Enneper, el dominio de la variable x es \mathbb{R}^+ [ver ecuación (5.50)]. Por lo tanto, es útil definir una extensión al dominio definiendo

$$U(x) = \begin{cases} V(x) & \text{si } x \geq 0 \\ V(-x) & \text{si } x < 0 \end{cases} \quad (5.54)$$

como una extensión para $x \in \mathbb{R}$. Esta construcción hace que el potencial sea simétrico y la ecuación de Dirac para esta extensión resulta ser

$$i\hbar\partial_t\Phi = v_F\sigma_1\hat{p}_x\Phi + v_F\sigma_2U(x)\hat{\ell}_\theta\Phi, \quad (5.55)$$

lo que claramente se reduce a (5.52) para $x \geq 0$.

Ahora, deducimos las principales características del potencial efectivo $V(x)$. Usando el factor conforme (5.48) y el cambio de variable $x(r)$ se puede demostrar que cerca de $x \simeq 0$ para el catenoide (o helicoide) con $n = 0$, el potencial es $V(x) \simeq c$, donde c es una constante positiva; para la superficie

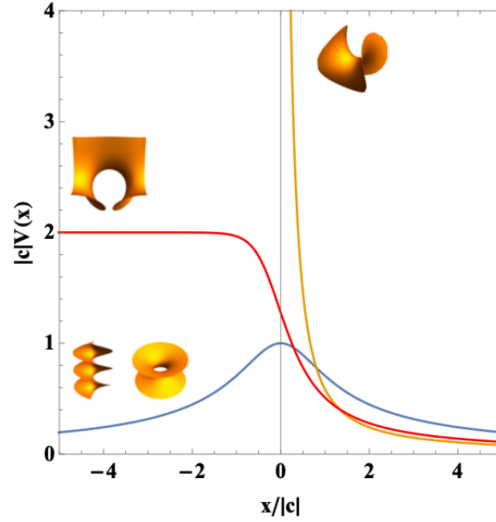


Figura 5.2 : Potencial efectivo $V(x)$ (5.53) vs coordenada x (5.50) para la superficie de Enneper ($n = 2$), B_1 ($n = 1$), y catenoide (helicoides) ($n = 0$).

B_1 con $n = 1$, el potencial es lineal $V(x) \simeq mx + b$, con una pendiente m negativa y la ordenada b positiva; y para cualquier superficie de Bour con $n > 1$, el potencial efectivo se comporta como $V(x) = c/((n - 1)x)$, para alguna constante positiva c . Por lo tanto, el potencial $V(x)$ funciona como un potencial de dispersión. Además, se puede verificar que el potencial efectivo $V(x)$, se desvanece para $x \rightarrow \infty$ para toda $n \geq 0$. En la Fig. 5.2 se dibuja el potencial geométrico inducido para los tres primeros casos $n = 0, 1, 2$.

Notemos que por ejemplo en el caso del catenoide (o helicoides) $n = 0$ y $|c| = \alpha/2$, se tiene que el factor conforme (5.48) es

$$\Lambda(r) = \frac{\alpha}{2} r^{-2} (1 + r^2). \quad (5.56)$$

A partir de (5.56) calculamos los elementos geométricos planteados en la

sección 5.1.2; los vierbeins (5.23)

$$e_t^0 = v_F, \quad e_r^1 = \frac{\alpha}{2} r^{-2} (1 + r^2), \quad e_\theta^2 = \frac{\alpha}{2} r^{-1} (1 + r^2), \quad (5.57)$$

la conexión afín (5.26)

$$\omega_r^{AB} = 0, \quad \omega_\theta^{AB} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1-r^2}{1+r^2} \\ 0 & \frac{r^2-1}{1+r^2} & 0 \end{pmatrix}, \quad (5.58)$$

y por consiguiente los términos de la conexión espín (5.27)

$$\begin{aligned} \Omega_t &= 0, \\ \Omega_r &= 0, \\ \Omega_\theta &= \frac{i}{2} \left(\frac{1-r^2}{1+r^2} \right) \sigma_3. \end{aligned} \quad (5.59)$$

El cambio de variable (5.50) es $x = \frac{\alpha}{2} (r - r^{-1})$, donde $x \in \mathbb{R}$. Usando la expresión del factor conforme (5.56) y del potencial efectivo generalizado (5.53) es sencillo demostrar que

$$V(x) = \frac{1}{\sqrt{x^2 + \alpha^2}}, \quad (5.60)$$

que satisface las características cualitativas deducidas anteriormente. Esto es justamente el resultado obtenido en la sección 5.2.1.

En el caso de la superficie B_1 , $n = 1$ y $c = 1$ se tiene que el factor conforme (5.48) es

$$\Lambda(r) = r^{-1} (1 + r^2). \quad (5.61)$$

A partir de (5.61) calculamos los elementos geométricos planteados en la sección 5.1.2; los vierbeins (5.23)

$$e_t^0 = v_F, \quad e_r^1 = r^{-1} (1 + r^2), \quad e_\theta^2 = (1 + r^2), \quad (5.62)$$

la conexión afín (5.26)

$$\omega_r^{AB} = 0, \quad \omega_\theta^{AB} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -\frac{2r^2}{1+r^2} \\ 0 & \frac{2r^2}{1+r^2} & 0 \end{pmatrix}, \quad (5.63)$$

y por consiguiente los términos de la conexión espín (5.27)

$$\begin{aligned} \Omega_t &= 0, \\ \Omega_r &= 0, \\ \Omega_\theta &= -i \left(\frac{r^2}{1+r^2} \right) \sigma_3. \end{aligned} \quad (5.64)$$

El cambio de variable (5.50) es $x = \log r + \frac{1}{2}r^2$, donde el dominio es todo \mathbb{R} . Uno puede expresar r en términos de x usando el valor principal de la función W de Lambert $r^2 = W(e^{2x})$. Usando la expresión del factor conforme (5.61) y del potencial efectivo generalizado (5.53) es sencillo demostrar que

$$V(x) = \frac{1}{1 + W(e^{2x})}, \quad (5.65)$$

que satisface las características cualitativas deducidas anteriormente.

Por último, para el caso de la superficie de Enneper, $n = 2$ y $c = 1$, se tiene que el factor conforme (5.48) se expresa

$$\Lambda(r) = 1 + r^2. \quad (5.66)$$

A partir de (5.66) calculamos los elementos geométricos planteados en la sección 5.1.2; los vierbeins (5.23)

$$e_t^0 = v_F, \quad e_r^1 = 1 + r^2, \quad e_\theta^2 = r + r^3, \quad (5.67)$$

la conexión afín (5.26)

$$\omega_r^{AB} = 0, \quad \omega_\theta^{AB} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{2}{1+r^2} - 3 \\ 0 & 3 - \frac{2}{1+r^2} & 0 \end{pmatrix}, \quad (5.68)$$

y por consiguiente los términos de la conexión espín (5.27)

$$\begin{aligned}\Omega_t &= 0, \\ \Omega_r &= 0, \\ \Omega_\theta &= -\frac{i}{2} \left(3 - \frac{2}{1+r^2} \right) \sigma_3.\end{aligned}\tag{5.69}$$

El cambio de variable (5.50) es

$$x = r + \frac{r^3}{3}.\tag{5.70}$$

Observemos que contrario a los casos previos en este caso el dominio es en \mathbb{R}^+ . Usando la expresión del factor conforme (5.66) y del potencial efectivo generalizado (5.53) podemos mostrar que

$$V(x) = \frac{1}{r(x) + r^3(x)},\tag{5.71}$$

por lo tanto se necesita encontrar la raíz positiva del polinomio de tercer orden. El potencial efectivo en términos de x viene dado explícitamente por

$$V(x) = \frac{1}{3x + 2^{\frac{2}{3}} \left(R_-^{\frac{1}{3}}(x) - R_+^{\frac{1}{3}}(x) \right)},\tag{5.72}$$

donde $R_\pm(x) = \sqrt{9x^2 + 4} \pm 3x$. Observemos que la expansión en serie de $R_\pm^{\frac{1}{3}}$ alrededor de $x \simeq 0$ es $R_\pm^{\frac{1}{3}} \simeq 2^{\frac{1}{3}} \pm 2^{-\frac{1}{3}}x$. Así, el potencial efectivo cerca de $x = 0$ se comporta de manera similar a un potencial de tipo coulombico $V(x) \simeq \frac{1}{x}$, mientras que es claro que para valores grandes de x , eso es para $x \rightarrow \infty$ el potencial $V(x)$ desaparece como se mostró cualitativamente.

5.4. Estados asintóticos de Dirac sobre las superficies de Bour

El análisis anterior nos permite justificar que para los estados asintóticos se puede despreciar el segundo término de (5.52). Por lo tanto, la ecuación de

Dirac se reduce

$$i\hbar\partial_t\Phi = v_F\sigma_1\hat{p}_x\Phi. \quad (5.73)$$

Para las soluciones de esta ecuación proponemos la solución espinor como

$$\Phi(x, \theta, t) = e^{ikx - i\frac{Et}{\hbar}} f(\theta)v, \quad (5.74)$$

donde la función $f(\theta)$ es una función arbitraria periódica no cero en el ángulo azimutal θ , y v es un vector que adquiere el carácter de pseudoespín del espinor. Al imponer la ecuación unidimensional de Dirac, la dispersión la relación resulta ser $E = \pm\hbar v_F|k|$, y v satisface la ecuación $\hat{h}v = \pm\frac{1}{2}v$, por \pm se refiere a un estado de Dirac positivo o negativo, donde

$$\hat{h} = \frac{1}{2}\sigma_1\frac{k}{|k|}, \quad (5.75)$$

Es el análogo unidimensional del operador de helicidad. Para un valor de energía positivo, los estados de pseudo-espín vienen dados por v_\uparrow (v_\downarrow) con helicidad positiva (negativa) $k > 0$ ($k < 0$). Para valores de energía negativa los estados de pseudo-espín se intercambian entre sí $v_\uparrow \rightarrow v_\downarrow$, donde los estados normalizados $\{v_\uparrow, v_\downarrow\}$ están dados por

$$v_\uparrow = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} \quad \text{y} \quad v_\downarrow = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}. \quad (5.76)$$

Para valores de energía positivos uno tiene las siguientes dos soluciones independientes

$$\begin{aligned} \Phi_{+,+}(x, \theta, t) &= e^{ikx - i\frac{|E|t}{\hbar}} f(\theta)v_\uparrow, \\ \Phi_{+,-}(x, \theta, t) &= e^{ikx - i\frac{|E|t}{\hbar}} f(\theta)v_\downarrow, \end{aligned} \quad (5.77)$$

para helicidad positiva o negativa, $k > 0$ y $k < 0$ respectivamente. De manera similar, para valores negativos de energía se tiene

$$\begin{aligned} \Phi_{-,+}(x, \theta, t) &= e^{ikx + i\frac{|E|t}{\hbar}} f(\theta)v_\downarrow, \\ \Phi_{-,-}(x, \theta, t) &= e^{ikx + i\frac{|E|t}{\hbar}} f(\theta)v_\uparrow, \end{aligned} \quad (5.78)$$

5.4. ESTADOS ASINTÓTICOS DE DIRAC SOBRE LAS SUPERFICIES DE BOUR83

para helicidad positiva o negativa, $k > 0$ y $k < 0$ respectivamente. Estos cuatro estados (5.77) y (5.78) se pueden unir de la siguiente manera

$$\Phi_{\mu,\sigma}(x, \theta, t) = e^{i\sigma|k|x - i\mu\frac{|E|t}{\hbar}} f(\theta) v_{\mu\cdot\sigma}, \quad (5.79)$$

donde hemos introducido una regla mnemotécnica para $\mu \cdot \sigma$ como

$$\mu \cdot \sigma = \begin{cases} + \cdot + = \uparrow \\ - \cdot + = \downarrow \\ + \cdot - = \downarrow \\ - \cdot - = \uparrow \end{cases} \quad (5.80)$$

donde $\mu = \text{sgn}(E)$. Finalmente, recordemos que la transformación realizada $\Psi = r^{-1/2} \Lambda^{-1/2} \Phi$ en la sección 5.3, por lo tanto el estado asintótico de Dirac disperso lejos del centro viene dado por

$$\Psi_{\mu,\sigma}(x, \theta, t) = \sqrt{V(x)} e^{i\sigma|k|x - i\mu\frac{|E|t}{\hbar}} f(\theta) v_{\mu\cdot\sigma}, \quad (5.81)$$

el cual se desvanece para $x \rightarrow \infty$. Además, como consecuencia de la periodicidad de la función $f(\theta) = f(\theta + 2\pi)$ se puede escribir la siguiente

$$\text{representación en serie } f(\theta) = \sum_{m \in \mathbb{Z}} f_m e^{im\theta}.$$

Capítulo 6

Dispersión análoga en las superficies de Bour

A continuación, presentamos la ecuación de Lippmann-Schwinger [66, 67] para estudiar cómo se propagan los estados a lo largo de las superficies de Bour. En particular, nos interesa describir la forma en que los estados iniciales se dispersan debido al potencial efectivo $V(x)$.

6.1. Ecuación de Lippmann-Schwinger

Consideremos el Hamiltoniano $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}$ dividido entre un Hamiltoniano libre \hat{H}_0 y un potencial perturbativo \hat{V} . Ahora la ecuación de Lippmann-Schwinger está dado por

$$|\Phi\rangle = |\Phi_{\text{in}}\rangle + \frac{1}{E - \hat{H}_0 + i\epsilon} \hat{V} |\Phi\rangle, \quad (6.1)$$

donde $|\Phi_{\text{in}}\rangle$ es el estado inicial, y $|\Phi\rangle$ es el estado de dispersión. Tenga en cuenta que en general estamos considerando que \hat{H}_0 y \hat{V} son operadores

diferenciales matriciales que actúan sobre los espinores. Así los estados $\{|\Phi\rangle\}$ adquieren componentes espinoriales.

La aproximación de Born se obtiene sustituyendo $|\Phi_{\text{in}}\rangle$ en lugar de $|\Phi\rangle$ en el segundo término de la ecuación (6.1). Para ir más allá a la aproximación de orden superior, introducimos el operador de transición T definido usando la ecuación $\hat{T}|\Phi_{\text{in}}\rangle = \hat{V}\{|\Phi\rangle\}$. De hecho, multiplicando la ecuación (6.1) por \hat{V} se llega a la conocida ecuación de operador recursivo autoconsistente para el operador de transición \hat{T}

$$\hat{T} = \hat{V} + \hat{V} \frac{1}{E - \hat{H}_0 + i\epsilon} \hat{T}. \quad (6.2)$$

Se puede obtener una solución en serie para \hat{T} usando la ecuación (6.2) a través de un procedimiento iterativo

$$\hat{T} = \hat{V} + \hat{V} \frac{1}{E - \hat{H}_0 + i\epsilon} \hat{V} + \hat{V} \frac{1}{E - \hat{H}_0 + i\epsilon} \hat{V} \frac{1}{E - \hat{H}_0 + i\epsilon} \hat{V} + \dots, \quad (6.3)$$

donde la primera aproximación $\hat{T} \simeq \hat{V}$ corresponde a la llamada aproximación de Born. Para determinar los estados de dispersión, uno puede seguir dos procedimientos comunes que son proyectar $\{|\Phi\rangle\}$ a lo largo de estados espaciales $\{|\mathbf{x}\rangle\}$ o estados de momento $\{|\mathbf{p}\rangle\}$. Para la proyección a lo largo de los estados espaciales se obtiene la función de onda espinorial $\Phi(\mathbf{x}) = \langle \mathbf{x} | \Phi \rangle$, donde $\mathbf{x} = (x_1, x_2)$ son ciertas coordenadas asociadas a una parte local en la superficie. Por lo tanto, usando el operador de transición, la ecuación (6.1) se puede reescribir como

$$\Phi(\mathbf{x}) = \Phi_{\text{in}}(\mathbf{x}) + \int_{\mathcal{D}} d^2 \mathbf{x}' \mathbb{G}(\mathbf{x}, \mathbf{x}') \langle \mathbf{x}' | \hat{T} | \Phi_{\text{in}} \rangle, \quad (6.4)$$

donde la función $\mathbb{G}(\mathbf{x}, \mathbf{x}')$ satisface la ecuación de Green definida por

$$(E - \hat{H}_0) \mathbb{G}(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = \mathbb{1} \delta(\mathbf{x}, \mathbf{x}'). \quad (6.5)$$

Ahora, cuando proyectamos los estados dispersados a lo largo de los estados de momento, se obtiene la función de onda espinorial en el espacio de momento que escribimos con la misma notación $\Phi(\mathbf{p}) = \langle \mathbf{p} | \Phi \rangle$. Suponiendo que \hat{H}_0 es un operador que depende exclusivamente del operador de cantidad de movimiento, la ecuación (6.1) se puede escribir como

$$\Phi(\mathbf{p}) = \Phi_{\text{in}}(\mathbf{p}) + \frac{1}{E - \hat{H}_0 + i\epsilon} \langle \mathbf{p} | \hat{T} | \Phi_{\text{in}} \rangle, \quad (6.6)$$

donde $H_0(\mathbf{p})$ es la matriz hamiltoniana libre evaluada en el momento \mathbf{p} .

A continuación estudiamos los estados electrónicos en las superficies de Bour a partir de la ecuación (5.55). Observemos que, el segundo término de esta ecuación puede considerarse como una barrera potencial. Esta “energía potencial” es crucial en el comportamiento de los estados de las partículas de Dirac en la superficie de Bour. Ahora, para implementar la ecuación de Lippmann-Schwinger (6.1) identificamos el hamiltoniano libre $\hat{H}_0 = v_F \sigma_1 \hat{p}_x$ y el hamiltoniano perturbado por $\hat{V} = v_F \sigma_2 U(x) \hat{\ell}_\theta$ de la ecuación (5.55). A continuación, llevamos a cabo las aproximaciones Born y Born de orden superior para determinar los estados de dispersión en la superficie curva.

6.1.1. Aproximación de Born

Ahora, para determinar los estados de dispersión $\Psi(\mathbf{x})$, se considera los estados iniciales $\Phi_{\text{in}}(x)$ lejos del centro de dispersión, que en nuestro caso corresponde a $x \simeq 0$. En particular, los estados que se consideran aquí son $\Phi_{\text{in}}(x) = \Phi_{\mu,\sigma}(x, \theta, t)$ encontrado en la sección 5.4. Ya que el hamiltoniano libre \hat{H}_0 es independiente de θ , así la función de Green adquiere la expresión $\mathbb{G}(\mathbf{x}, \mathbf{x}'; E) = \mathbb{G}(x - x'; E) \delta(\theta - \theta')$, donde $\mathbf{x} = (x, \theta)$. Ahora, la ecuación (6.4) se escribe como

$$\Phi(x, \theta) = \Phi_{\pm}(x, \theta) + v_F \int_{-\infty}^{\infty} dx' \mathbb{G}(x - x'; E) U(x') \sigma_2 \hat{\ell}_\theta \Phi(x', \theta), \quad (6.7)$$

donde $\mathbb{G}(x - x'; E)$ es la función de Green para el operador unidimensional $E - v_F \sigma_1 \hat{p}_x$, esto es, una función que satisface

$$(E - v_F \sigma_1 \hat{p}_x) \mathbb{G}(x - x'; E) = \delta(x - x'). \quad (6.8)$$

Siguiendo el procedimiento estándar (ver Apéndice C) no es difícil demostrar que la solución a la ecuación (6.8) está dado por

$$\mathbb{G}(x - x'; E) = \frac{1}{2i\hbar v_F} \left[\text{sgn}(E) + \text{sgn}(x - x') \sigma_1 \right] e^{i \frac{|E|}{\hbar v_F} |x - x'|}, \quad (6.9)$$

donde recordemos que $E = \pm \hbar v_F |k|$. A continuación, como consecuencia de la geometría polar de la superficie, los estados $\Phi(x, \theta)$ son periódicas en la variable angular θ , así se puede escribir en la próxima expansión

$$\Phi(x, \theta) = \sum_{m \in \mathbb{Z}} \Phi_m(x) e^{im\theta}. \quad (6.10)$$

Ahora, usando la relación ortonormal de la base $\{e^{im\theta}\}$ uno tiene la siguiente ecuación integral para $\Phi_m^{(\mu)}(x)$, esto es

$$\Phi_m^{(\mu)}(x) = e^{i\sigma|k|x} f_m v_{\mu\sigma} + \hbar v_F m \int_{-\infty}^{\infty} dx' \mathbb{G}(x - x'; E) U(x') \sigma_2 \Phi_m^{(\mu)}(x'), \quad (6.11)$$

donde recordemos que $\mu = \text{sgn}(E)$. En la aproximación de Born, basta con hacer la sustitución $\Phi_m^{(\mu)}(x')$ por $e^{i\sigma p x'} f_m v_{\mu\sigma}$ en el segundo término de la ecuación (6.11), donde hemos definido la magnitud del momento $|k| = p$. Se elige una onda inicial con $\sigma = -$, es decir, una onda izquierda con $k < 0$ que vaya al centro de dispersión. Sustituyendo (6.9) en (6.11) y después de un cálculo sencillo, los estados están dados por

$$\Phi_m^{(\mu)}(x) \simeq f_m \left[e^{-ipx} v_{-\mu} + m \tilde{U}(2p) e^{ipx} v_{\mu} \right], \quad (6.12)$$

donde hemos encontrado que los estados de energía negativa con pseudoespín arriba \uparrow propagándose a lo largo del centro de dispersión reflejándose en

un pseudo-espín abajo \downarrow . La amplitud de la reflexión viene dada por $m\tilde{U}(2p)$, donde \tilde{U} es la transformada de Fourier del potencial efectivo $U(x)$. Para tener una mejor comprensión de este fenómeno de dispersión se procede a realizar una aproximación de Born de orden superior en la siguiente sección.

6.1.2. Aproximación Born de orden superior

Para la aproximación de Born de orden superior, encontramos útil la representación del momento para los estados. El punto de partida es la ecuación para los estados de dispersión (6.6) donde el término $\langle \mathbf{p} | \hat{T} | \Phi_{\text{in}} \rangle$ se determina aproximadamente usando la aproximación en serie de la ecuación recursiva para el operador de transición (6.3), esto es

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{p} | \hat{T} | \Phi_{\text{in}} \rangle &= \langle \mathbf{p} | \hat{V} | \Phi_{\text{in}} \rangle + \langle \mathbf{p} | \hat{V} \hat{G} \hat{V} | \Phi_{\text{in}} \rangle \\ &+ \cdots + \langle \mathbf{p} | \hat{V} \hat{G} \hat{V} \cdots \hat{V} \hat{G} \hat{V} | \Phi_{\text{in}} \rangle + \cdots, \end{aligned} \quad (6.13)$$

donde hemos definido el operador $\hat{G} := 1/(E - \hat{H}_0 + i\epsilon)$. Ahora, para cada término \hat{G} de la expresión anterior, se introducen las siguientes relaciones de completitud en el espacio de momentos; $\mathbb{1} = \sum_{\mathbf{q}} |\mathbf{q}\rangle \langle \mathbf{q}|$ donde $\sum_{\mathbf{q}} = \frac{1}{2\pi} \sum_m \int \frac{dq}{2\pi}$ y $|\mathbf{q}\rangle := |q, m\rangle$. Estas relaciones de completitud se colocan antes y después del operador \hat{G} . Así, se tiene el primer término $\tau_1(p) := \langle \mathbf{p} | \hat{V} | \Phi_{\text{in}} \rangle$ y el $(n+1)$ -ésimo término, con $n \geq 1$, se escribe de la siguiente manera

$$\begin{aligned} \tau_{n+1}(p) &:= \sum_{\mathbf{q}^{(1)}, \dots, \mathbf{q}^{(2n)}} \langle \mathbf{p} | \hat{V} | \mathbf{q}^{(1)} \rangle \langle \mathbf{q}^{(1)} | \hat{G} | \mathbf{q}^{(2)} \rangle \\ &\times \langle \mathbf{q}^{(2)} | \hat{V} \cdots \hat{V} | \mathbf{q}^{(2n-1)} \rangle \langle \mathbf{q}^{(2n-1)} | \hat{G} | \mathbf{q}^{(2n)} \rangle \\ &\times \langle \mathbf{q}^{(2n)} | \hat{V} | \Phi_{\text{in}} \rangle. \end{aligned} \quad (6.14)$$

Ahora, uno puede reducir la mitad de las integrales ya que para cada término $\langle \mathbf{q}^{(i)} | \hat{G} | \mathbf{q}^{(j)} \rangle = \mathbb{G}(\mathbf{q}^j) \delta_{\mathbf{q}^i \mathbf{q}^j}$, donde $\mathbb{G}(\mathbf{q}^j) = 1/(E - H_0(\mathbf{q}) + i\epsilon)$. De esta

manera podemos reescribir (6.14) como sigue

$$\begin{aligned} \tau_{n+1}(p) := & \sum_{\mathbf{q}^{(1)}, \dots, \mathbf{q}^{(2n)}} \langle \mathbf{p} | \hat{V} | \mathbf{q}^{(1)} \rangle \left(\prod_{\ell=1}^{n-1} \mathbb{G}(\mathbf{q}^{(\ell)}) \langle \mathbf{q}^{(\ell)} | \hat{V} | \mathbf{q}^{(\ell+1)} \rangle \right) \\ & \times \mathbb{G}(\mathbf{q}^{(n)}) \langle \mathbf{q}^{(n)} | \hat{V} | \Phi_{\text{in}} \rangle, \end{aligned} \quad (6.15)$$

donde el estado $|\mathbf{q}^\ell\rangle = |q^\ell, m^\ell\rangle$ para $\ell = 1, 2, \dots, n$. Para simplificar la última expresión es necesario encontrar las siguientes dos expresiones genéricas; $\langle \mathbf{p} | \hat{V} | \mathbf{q} \rangle$ y $\langle \mathbf{p} | \hat{V} | \Phi_{\text{in}} \rangle$. Los estados de momento vienen expresados por $|\mathbf{p}\rangle = |p, m\rangle$ y de manera similar $|\mathbf{q}\rangle = |q, m'\rangle$. Así, para la primera expresión genérica se puede escribir como $\langle \mathbf{p} | \hat{V} | \mathbf{q} \rangle = (2\pi)\hbar v_F \sigma_2 m \delta_{m, m'} \langle p | \hat{U}(x) | q \rangle$ donde hemos actuado el operador de momento angular $\hat{\ell}_\theta |m\rangle = \hbar m |m\rangle$ y se introdujo la relación ortogonal $\langle m | m' \rangle = 2\pi \delta_{m, m'}$. Ahora, introducimos la relación de completéz $\mathbb{1} = \int dx |x\rangle \langle x|$ y usamos el hecho que $\langle x | p \rangle = e^{ipx}$, por lo tanto

$$\langle \mathbf{p} | \hat{V} | \mathbf{q} \rangle = (2\pi)\hbar v_F \sigma_2 m \delta_{m, m'} \tilde{U}(p - q), \quad (6.16)$$

siendo $\tilde{U}(q) := \int dx e^{-iqx} U(x)$ la transformada de Fourier del potencial. Ahora, para el otro término genérico, se introduce una relación de completéz en el espacio de momentos tal que $\langle \mathbf{p} | \hat{V} | \Phi_{\text{in}} \rangle = \sum_{\mathbf{q}} \langle \mathbf{p} | \hat{V} | \mathbf{q} \rangle \langle \mathbf{q} | \Phi_{\text{in}} \rangle$. Ahora es necesario calcular el término $\Phi_{\text{in}}(\mathbf{q}) = \langle \mathbf{q} | \Phi_{\text{in}} \rangle$ que es la transformada de Fourier de la onda inicial $e^{i\sigma|k|x} f_m v_{\mu, \sigma}$, es decir, $\Phi_{\text{in}}(\mathbf{q}) = 2\pi \delta(q - \sigma|k|) f_m v_{\mu, \sigma}$, así uno tiene

$$\langle \mathbf{p} | \hat{V} | \Phi_{\text{in}} \rangle = \hbar v_F \sigma_2 v_{\mu, \sigma} f_m m \tilde{U}(p - \sigma|k|). \quad (6.17)$$

Observe que la última ecuación corresponde al primer término de la serie (6.13), esto es,

$$\tau_1(p) = \hbar v_F f_m (i\mu m) \tilde{U}(p + |k|) v_\mu, \quad (6.18)$$

donde hemos puesto $\sigma = -1$ ya que tenemos una onda izquierda inicial, y usado la identidad $\sigma_2 v_{-\mu} = i\mu v_\mu$. Ahora, sustituimos los términos (6.16) y (6.17) en (6.15), colocando $\sigma = -1$, y siguiendo el cálculo desarrollado en el apéndice D uno es capaz de encontrar

$$\tau_{n+1} = \hbar v_F f_m (i\mu m)^n m \tilde{U}(p - |k|) \tilde{U}(2|k|) \left| \tilde{U}(2|k|) \right|^{n-1} v_{-\mu}, \quad (6.19)$$

para n impar, mientras que

$$\tau_{n+1} = \hbar v_F f_m (i\mu m)^{n+1} \tilde{U}(p + |k|) \left| \tilde{U}(2|k|) \right|^n v_\mu, \quad (6.20)$$

para n par, donde $|\cdot|$ es la norma compleja. De esta manera reescribimos (6.13) como

$$\langle \mathbf{p} | \hat{T} | \Phi_{\text{in}} \rangle = \sum_{n=0}^{\infty} \tau_{n+1}(p). \quad (6.21)$$

Este valor esperado debe introducirse en la ecuación (6.6). Luego, se necesita calcular la transformada de Fourier para encontrar una expresión de la onda de Dirac

$$\Phi_m^{(\mu)}(x) = e^{-i|k|x} f_m v_{-\mu} + \sum_{n=0}^{\infty} C_{n+1}(x), \quad (6.22)$$

donde todavía hay que calcular la transformada inversa de Fourier

$$C_{n+1}(x) = \int \frac{dp}{2\pi} e^{ipx} \mathbb{G}(p) \tau_{n+1}(p).^1 \quad (6.23)$$

Así el resultado para $C_{n+1}(x)$ es el siguiente, para enteros impares $n = 2j+1$

$$C_{2j+2}(x) = (-1)^{j+1} \left(m^2 \left| \tilde{U}(2|k|) \right|^2 \right)^{j+1} f_m e^{-i|k|x} v_{-\mu}, \quad (6.24)$$

¹Consulte el apéndice D para obtener detalles específicos sobre los cálculos de estas integrales.

mientras que para enteros pares $n = 2j$

$$C_{2j+1}(x) = (-1)^{j+1} m \tilde{U}(2|k|) \left(m^2 \left| \tilde{U}(2|k|) \right|^2 \right)^j f_m e^{i|k|x} v_\mu, \quad (6.25)$$

para $j \in \mathbb{N} \cup \{0\}$. Ahora bien, luego de sustituir (6.24) y (6.25) en (6.22) se nota cada uno de los factores que aparecen frente a $e^{-i|k|x}$ y $e^{i|k|x}$ se pueden representar como una serie geométrica que se puede resumir como

$$\sum_{\ell=0}^{\infty} (-1)^\ell a^\ell(m, k) = \frac{1}{1 + a(m, k)}, \quad (6.26)$$

mientras $a(m, k) < 1$, donde $a(m, k) = m^2 \left| \tilde{U}(2|k|) \right|^2$. Esta es la expresión final de la onda de Dirac

$$\Phi_m^{(\mu)}(x) = f_m \left[\mathcal{F}(m, k) e^{-i|k|x} v_{-\mu} + \mathcal{G}(m, k) e^{i|k|x} v_\mu \right], \quad (6.27)$$

donde los coeficientes $\mathcal{F}(m, k)$ y $\mathcal{G}(m, k)$ vienen dados por

$$\mathcal{F}(m, k) = \frac{1}{1 + m^2 \left| \tilde{U}(2|k|) \right|^2}, \quad (6.28)$$

$$\mathcal{G}(m, k) = m \tilde{U}(2|k|) \mathcal{F}(m, k). \quad (6.29)$$

La aproximación de Born (6.12) se recupera cuando $\mathcal{F}(m, k) \approx 1$. Se espera que esto se logre para valores grandes de momentos $|k|$. Dado que se puede preparar una onda de Dirac inicial con valores de m y k tales que $a(m, k) \geq 1$, aquí consideramos una continuación analítica de la serie geométrica para tomar en cuenta los valores de m y k bajo la última condición. Esta continuación analítica significa que los factores $\mathcal{F}(m, k)$ y $\mathcal{G}(m, k)$ tienen la misma función para valores de (m, k) en una región donde $a(m, k) \geq 1$.

6.2. Transmisión de onda de Dirac

Esta sección utiliza la corriente de Noether J_μ de la ecuación de Dirac como la densidad de corriente de probabilidad. Esta cantidad se introduce para estudiar la forma en que la onda de Dirac inicial se propaga a lo largo de la superficie. En particular, usando la corriente J_μ podemos determinar los coeficientes de transmisión y reflexión. Esta cantidad conservada viene dada por [68]

$$J^\mu = \bar{\Psi} \underline{\gamma}^\mu \Psi, \quad (6.30)$$

donde $\bar{\Psi} = \Psi^\dagger \gamma^0$. Además, recordemos que $\underline{\gamma}^\mu$ se dan en términos de los vierbeins y las matrices de Dirac γ^A introducido en la sección 2.3. También, recordemos que $\Psi(x) = r^{-1/2} \Lambda^{-1/2} \Phi(x)$, donde Λ es el factor conforme. La componente cero de la corriente, $J^0(x)$, nos permite determinar la función de densidad de probabilidad, mientras que las componentes espaciales de la corriente nos permiten determinar cómo se propaga la onda de Dirac a través de la geometría del espacio, es decir, utilizando las componentes espaciales se puede definir el coeficiente de reflexión como

$$\mathcal{R} = \left| \frac{J_{\text{ref}}^a n_a}{J_{\text{inc}}^b n_b} \right|, \quad (6.31)$$

y el coeficiente de transmisión por su complemento

$$\mathcal{T} = 1 - \mathcal{R}, \quad (6.32)$$

donde \mathbf{n} es un vector tangente en la superficie que es normal a la curva γ situada en la superficie. En particular, para la superficie de Bour, elegimos que γ sea una curva r -constante, este \mathbf{n} es un vector tangente a lo largo de la dirección θ . Consulte la Fig. 6.1 para ver las curvas de nivel con r -constante y θ -constante en las superficies catenoide, B_1 y Enneper.

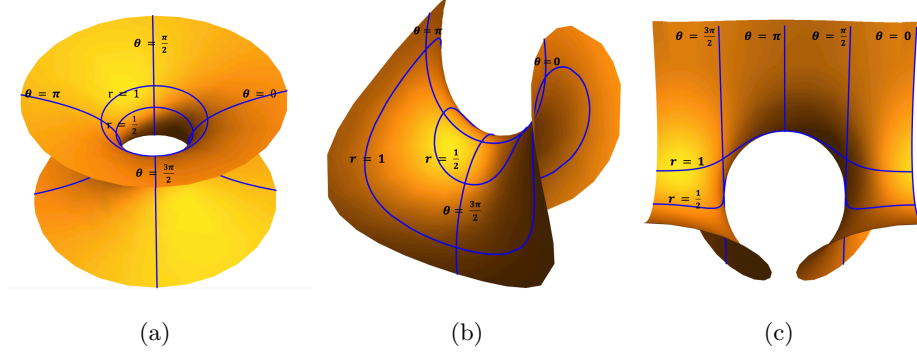


Figura 6.1 : a) Catenoide, b) superficie de Enneper y c) B_1 , dibujadas con las parametrizaciones (E.1), (E.3) y (E.4). Cada una de las superficies incluye ejemplos de curvas de nivel con r y θ -constante.

A continuación, nos enfocamos en determinar las expresiones generales para la densidad de probabilidad J^0 , el coeficiente de transmisión \mathcal{T} , el coeficiente de reflexión \mathcal{R} y la conductancia \mathcal{G} para las superficies de Bour, donde se hace especial énfasis en la superficie catenoide/helicoide, B_1 y Enneper.

6.2.1. Función de densidad de probabilidad J^0

Como primer punto obtendremos los factores de normalización \mathcal{N}_0 , para la onda libre (5.81), y \mathcal{N} , para la onda dispersa (6.27). Para este propósito, consideremos una gran parte del área de la superficie, e impongamos la condición $\int_{\mathcal{D}} dA J^0 = 1$, donde $dA = r\Lambda(r)drd\theta$ es el elemento de área en la superficie. Esta condición garantiza que un fermión de Dirac está seguramente en algún punto, $(r, \theta) \in \mathcal{D} = [0, L] \times [0, 2\pi]$, del dominio \mathcal{D} .

Ahora, la componente cero de la corriente de Noether es la función de densidad de probabilidad dada para nuestra geometría espacio-temporal parti-

cular [ver (5.21)] por

$$J^0(r) = v_F^{-1} \Psi_m^\dagger^{(\mu)} \Psi_m^{(\mu)}. \quad (6.33)$$

Así para la onda inicial libre (5.81) se tiene la densidad

$$J^0(r) = \frac{\mathcal{N}_0^2 |f_m|^2}{v_F r \Lambda}, \quad (6.34)$$

por lo tanto el factor de normalización se obtiene fácilmente como

$$\mathcal{N}_0 = \left(\frac{v_F}{2\pi L} \right)^{1/2} \frac{1}{|f_m|}, \quad (6.35)$$

mientras que la onda dispersada

$$J^0(r) = \frac{\mathcal{N}^2 |f_m|^2}{v_F r \Lambda} \mathcal{F}(m, k), \quad (6.36)$$

el factor de normalización está dado por

$$\mathcal{N} = \frac{\mathcal{N}_0}{\sqrt{\mathcal{F}(m, k)}}. \quad (6.37)$$

Así, la función de densidad de probabilidad se da para ambas ondas por la expresión

$$J^0(r) = \frac{1}{2\pi L r \Lambda(r)}, \quad (6.38)$$

lo que significa que es más probable encontrar partículas de Dirac cerca del centro de dispersión en la superficie de Bour. Cabe mencionar que el punto de dispersión ($x \simeq 0$) corresponde al punto donde la curvatura alcanza su valor máximo (ver Fig 5.1).

6.2.2. Transmitancia y conductancia

Ahora, queremos determinar los coeficientes de reflexión y transmisión. Elegimos γ para que sea la curva r -constante en una superficie de Bour, por

lo que el vector normal a γ es tangente a una curva θ -constante. Observemos que $J^\theta = -\frac{1}{r^2\Lambda^2}\Phi_m^\dagger^{(\mu)}\sigma_1\Phi_m^{(\mu)}$ después usar $\underline{\gamma}^\theta = \gamma^2 e^\theta_1$, donde los vierbeins en este caso es $e^\theta_1 = 1/\Lambda$, recordemos igual que $\sigma_1 v_\mu = \mu v_\mu$ y $v^\dagger_\mu v_\mu = 1$, calculamos la corriente de incidencia J^θ_{inc} usando la onda inicial $\mathcal{N}_0 e^{-i|k|x} f_m v_{-\mu}$

$$J^\theta_{\text{inc}} = \frac{v_F \mu}{2\pi L r^2 \Lambda^2}, \quad (6.39)$$

y calculamos J^θ_{ref} usando la onda reflejada $\mathcal{N} f_m \mathcal{G}(m, k) e^{i|k|x} v_\mu$, obteniendo

$$J^\theta_{\text{ref}} = -\frac{v_F \mu}{2\pi L r^2 \Lambda^2} \frac{|\mathcal{G}(m, k)|^2}{\mathcal{F}(m, k)}. \quad (6.40)$$

Ahora, usando (6.31), no es difícil mostrar que

$$\begin{aligned} \mathcal{R} &= m^2 \tilde{U}^2(2|k|) \mathcal{F}(m, k), \\ \mathcal{T} &= \mathcal{F}(m, k), \end{aligned} \quad (6.41)$$

donde $\mathcal{F}(m, k)$ está dado por (6.28). Ambos coeficientes \mathcal{R} y \mathcal{T} se dan en términos de la transformada de Fourier $\tilde{U}(p) = \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{ipx} U(x)$, por lo tanto, es conveniente hacer más simplificaciones. Dado que el potencial es proporcional a $1/|c|$ es conveniente realizar el siguiente cambio de variable $\tilde{x} = x/|c|$, así vamos a definir la función

$$\mathcal{U}(\xi) = \int_{-\infty}^{\infty} d\tilde{x} e^{i\xi\tilde{x}} |c| U(|c|\tilde{x}). \quad (6.42)$$

Ahora, en lugar de usar el número de onda k usamos la relación de dispersión de energía $E = \pm \hbar v_F |k|$. Además, observe que el material Bour introduce una escala natural de energía dada por $E_0 = \hbar v_F / |c|$ en términos de la longitud característica $|c|$, asociada a cada superficie de Bour. Por lo tanto, los coeficientes de reflexión y transmisión en términos de la energía E se dan para cualquier superficie de Bour dentro de la presente aproximación como

$$\mathcal{R}(E) = \frac{m^2 |\mathcal{U}(2E_*)|^2}{1 + m^2 |\mathcal{U}(2E_*)|^2}, \quad (6.43)$$

$$\mathcal{T}(E) = \frac{1}{1 + m^2 |\mathcal{U}(2E_*)|^2}, \quad (6.44)$$

donde $E_* = |E|/E_0$ es un parámetro adimensional. La conductancia se puede calcular usando la expresión

$$G(E) = \frac{e^2}{\pi\hbar} \mathcal{T}(E). \quad (6.45)$$

Observe que cada material de Bour con longitud característica $|c|$ introduce una escala natural de energía $E_0 = \hbar v_F/|c|$; para superficies con $|c| \sim 1$ nm la energía de escala característica es $E_0 \sim 8.27$ eV. Tenga en cuenta que para grandes valores de energía, es decir, $|E| \gg E_0$, el resultado anterior (6.43) y (6.44) se reduce a la aproximación de Born ya que en esta región de parámetros se tiene

$$\mathcal{R}(E) \simeq m^2 |\mathcal{U}(2E_*)|^2, \quad (6.46)$$

$$\mathcal{T}(E) \simeq 1 - m^2 |\mathcal{U}(2E_*)|^2, \quad (6.47)$$

que es el resultado de la aproximación de Born.

Ahora, todavía necesitamos calcular la transformada de Fourier del potencial efectivo. Notemos que, para cualquier superficie de Bour, es útil volver a la coordenada radial original en lugar de x ya que $dx = \Lambda(r)dr$ y el potencial efectivo $V(r) = 1/(r\Lambda)$, así la transformada de Fourier es

$$\mathcal{U}(\xi) = \int_0^\infty \frac{dr}{r} \exp\left[-i\xi \frac{x_n(r)}{|c|}\right], \quad (6.48)$$

donde para cada superficie de Bour etiquetada con n , $x_n(r)$ es el cambio de variable introducido anteriormente (ver 5.3.1).

Transmisión en el catenoide/helicoidal.

En este caso uno tiene $x_0(r) = |c|(r - r^{-1})$. Aquí, conviene hacer el cambio de variable $y = \log r \in \mathbb{R}$, así el argumento de la exponencial en (6.48)

resulta ser la función impar $\sinh(y)$, lo que significa que la transformada de Fourier se simplifica a $\mathcal{U}(\xi) = \int_{-\infty}^{\infty} dy \cos[2\xi \sinh(y)]$. Esta integral se puede expresar en términos de una función de Bessel modificada [69]

$$\mathcal{U}(\xi) = 2K_0(2\xi). \quad (6.49)$$

En la Fig. (6.2), se muestra el coeficiente de reflexión y transmisión para una onda de propagación a través de la catenoide, donde se ha utilizado (6.49). Además, se puede ver que el valor de $E_* = E_x$, donde la transmisión y la reflexión tienen el mismo valor, se traslada a la derecha a medida que aumenta el valor de m . El valor de intercepción de la energía es E_x , donde se cumple la ecuación trascendental

$$K_0(4E_x) = \frac{1}{2m}. \quad (6.50)$$

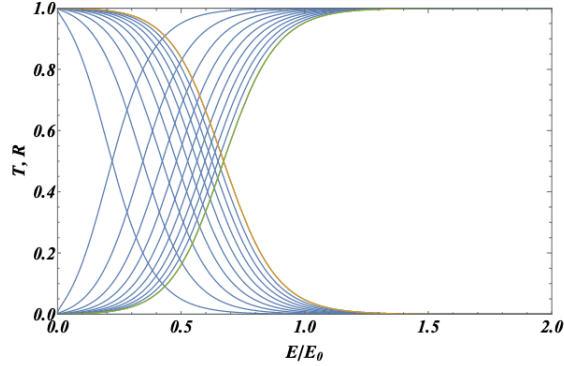


Figura 6.2 : Familia de coeficientes de transmisión y reflexión ((6.43) y (6.44)) versus energía reducida $E_* = E/E_0$ usando la transformada de Fourier (6.49) correspondiente a la geometría catenoidal/helicoidal. El conjunto de curvas se obtuvo para casos con $m = 1, \dots, 10$. Las curvas naranja y verde son guías para identificar el caso $m = 10$.

También cabe mencionar, que en la intercepción el valor del coeficiente de transmisión (o el coeficiente de reflexión) es independiente de m y está dado por $\mathcal{T}(E_x) = 1/2$, como se puede apreciar en la Fig. (6.2).

Transmisión en B_1 -Bour

En este caso se tiene $x_1(r) = |c| (\log r + \frac{1}{2}r^2)$. Aquí, sustituyamos $i\xi \rightarrow z$, donde z es un valor complejo con $\Re z < 0$. Adicionalmente, es conveniente hacer el cambio de variable $y = r^2 \in \mathbb{R}^+$, así la integral (6.48) resulta ser $\mathcal{U}(\xi) = 2 \int_0^\infty \frac{dy}{y} y^{-\frac{z}{2}} e^{-\frac{z}{2}y}$, que se puede relacionar con una función Gamma [69] como

$$\mathcal{U}(\xi) = \lim_{z \rightarrow i\xi} 2 \left(\frac{z}{2}\right)^{\frac{z}{2}} \Gamma\left(-\frac{z}{2}\right). \quad (6.51)$$

Como necesitamos la norma compleja de $\mathcal{U}(\xi)$, usamos la identidad $|\Gamma(iy)|^2 = \pi/(y \sinh(\pi y))$ para $y \in \mathbb{R}$ [69], queda por calcular la norma compleja del factor en (6.51), mediante un cálculo elemental directo se tiene $\left(\frac{z}{2}\right)^{\frac{z}{2}} = e^{i\frac{\xi}{2} \log \frac{\xi}{2}} e^{-\frac{\xi\pi}{4}}$. Por lo tanto

$$|\mathcal{U}(\xi)|^2 = \frac{4}{\xi (e^{\pi\xi} - 1)}. \quad (6.52)$$

En la Fig. (6.3), se muestra el coeficiente de reflexión y transmisión para una onda que se propaga a través de la superficie B_1 -Bour, donde se ha utilizado (6.52). La estructura de estas curvas es muy similar al caso anterior. La principal diferencia corresponde a que la transmisión total se da a un valor mayor de E_* . Además, la forma en que las curvas se mueven hacia la izquierda se dan de acuerdo con la ecuación trascendental

$$E_x (e^{2\pi E_x} - 1) = 2m^2. \quad (6.53)$$

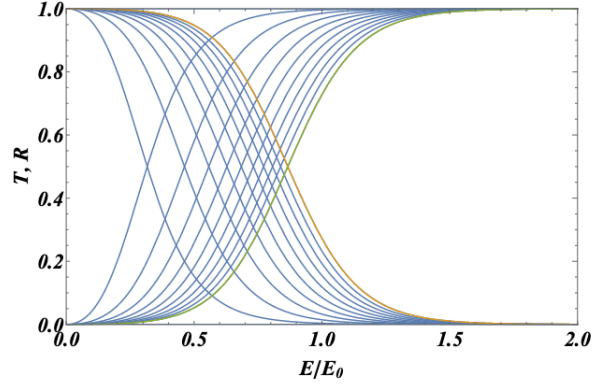


Figura 6.3 : Familia de coeficientes de transmisión y reflexión ((6.43) y (6.44)) versus energía reducida $E_* = E/E_0$ usando la transformada de Fourier (6.51) correspondiente a la geometría B_1 -Bour. El conjunto de curvas se obtuvo para casos con $m = 1, \dots, 10$. Las curvas naranja y verde son guías para identificar el caso $m = 10$.

Transmisión en las superficies $B_{n \geq 2}$ - Bour

En este caso uno tiene $x_n(r) = |c| \left(\frac{r^{n-1}}{n-1} + \frac{r^{n+1}}{n+1} \right)$ con $n \geq 2$, por tanto, la transformada de Fourier se reduce a la integral

$$\mathcal{U}(\xi) = 2 \int_0^\infty \frac{dr}{r} \cos \left(\xi \left(\frac{r^{n-1}}{n-1} + \frac{r^{n+1}}{n+1} \right) \right). \quad (6.54)$$

Esta integral es estrictamente divergente debido a la singularidad en $r = 0$. La integral se regulariza introduciendo un corte inferior tal que $r \geq \epsilon$. Para aislar la parte singular consideremos la siguiente aproximación. En primer lugar, centrémonos en la superficie clásica de Enneper $n = 2$. Se puede argumentar que la contribución más importante a la integral está cerca de $r = \epsilon$, donde el término cúbico del argumento del coseno puede despreciarse ya que $r^3 \simeq \epsilon^3$, además, para valores grandes de r , las contribuciones a la integral decaen a cero como r^{-1} . Usando este razonamiento, ignoremos el

término cúbico dentro del argumento de la función coseno, por lo que la integral se reduce a la integral del coseno.

$$\mathcal{U}(\xi) \simeq 2 \int_{\epsilon}^{\infty} \frac{dr}{r} \cos(\xi r) := -2\text{Ci}(\epsilon\xi), \quad (6.55)$$

donde $\text{Ci}(x)$ es la integral del coseno, que tiene la expansión en serie $\text{Ci}(x) = \gamma + \log x + \sum_{n=1}^{\infty} (-1)^n x^{2n} / (2n(2n)!) [69]$. Así, uno tiene

$$\mathcal{U}(\xi) \simeq -2(\gamma + \log(\xi)) + 2 \log(1/\epsilon) + \mathcal{O}(\epsilon^2), \quad (6.56)$$

donde γ es la constante de Euler-Mascheroni. Por lo tanto, la parte singular viene dada por $2 \log(1/\epsilon)$. Ahora, realizamos una evaluación numérica de (6.54), restando la parte singular y comparando con el resultado anterior (6.56) [ver Fig. (6.4)]. Es claro que el error principal está cercano al $k \simeq 0$, mientras que para el resto de valores el error ronda el 1%.

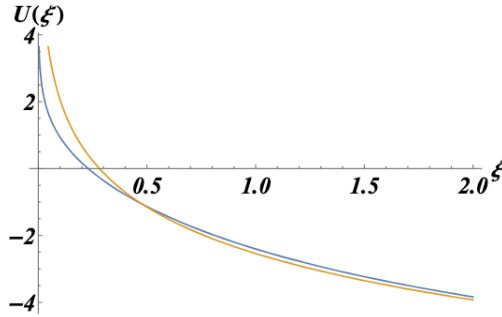


Figura 6.4 : Transformada de Fourier (6.54) versus el argumento ξ para la geometría clásica de Enneper con $n = 2$ (curva de color azul). También se muestra una comparación entre el cálculo numérico (6.54) y aproximación analítica (6.56), curvas azul y naranja, respectivamente.

En la Fig. (6.5), se muestra el coeficiente de reflexión y transmisión de una onda de propagación a través de la superficie clásica de Enneper, donde

hemos calculado numéricamente la transformada de Fourier $\mathcal{U}(\xi)$. La característica principal de las curvas de transmisión para la superficie de Enneper es el valor de transmisión $\mathcal{T}(E_K) = 1$ en la energía E_K que muestra el fenómeno de la paradoja de Klein en este caso [70]. El valor de Klein E_K corresponde al valor donde la transformada de Fourier $\mathcal{U}(\xi)$ desaparece [ver Fig. (6.4)]. Usando la aproximación (6.56) se puede estimar el valor de $E_K \simeq \frac{E_0}{2} e^{-\gamma} \approx 0.28E_0$, con un error de 5 % respecto al cálculo numérico. Sin embargo, a diferencia de los casos anteriores, catenoide y superficie B_1 -Bour, en el presente caso se muestra una fuerte supresión de la transmisión para valores superiores al valor de Klein E_K , dando lugar a un efecto de reflexión total y, por lo tanto, a una conductancia que desaparece $\mathcal{G}(E) \rightarrow 0$ para $E \gg E_K$. Además, se puede observar en la Fig. (6.5) que hay dos valores de intercepción y que ambos valores se mueven hacia el valor de Klein a medida que aumenta el valor de m . Este efecto se puede explicar usando la aproximación (6.56) haciendo que la condición $m^2 |\mathcal{U}(2E_*(m))|^2 = 1$, así se obtienen los valores en términos de m mediante la ecuación $E_*(m) \simeq E_K e^{\pm \frac{1}{2m}}$, mostrando el efecto recién mencionado.

Para el caso $n \geq 2$ se puede seguir la misma línea argumental que en el caso Enneper. Por ejemplo, realicemos el cambio de variable $y = \frac{r^{n-1}}{n-1}$, por lo que la transformada de Fourier (6.54) resulta como

$$\mathcal{U}(\xi) = \frac{2}{n-1} \int_{\epsilon}^{\infty} \frac{dy}{y} \cos\left(\xi \left(y + \alpha_n y^{\beta_n}\right)\right), \quad (6.57)$$

donde $\alpha_n = (n-1)^{\beta_n}/(n+1)$ y $\beta_n = \frac{n+1}{n-1}$.

Observe que $1 < \beta_n \leq 3$ donde la igualdad corresponde al caso clásico de Enneper. Dado que $\beta_n > 1$, se puede intentar argumentar que este término no es dominante cerca de la singularidad, por lo que en esta aproximación se tiene $\mathcal{U}(\xi) \simeq -2\text{Ci}(\epsilon\xi/(n-1))/(n-1)$, por lo tanto, la diferencia entre el presente caso y el caso Enneper es un factor de $1/(n-1)$.

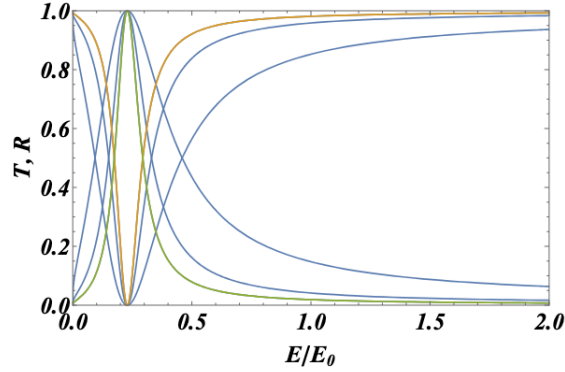


Figura 6.5 : Familia de coeficientes de transmisión y reflexión ((6.43) y (6.44)) versus energía reducida $E_* = E/E_0$ usando la evaluación numérica de la transformada de Fourier (6.56) correspondiente a la geometría clásica de Enneper con $n = 2$. El conjunto de curvas se obtuvo para casos con $m = 1, 2, 3$. Las curvas naranja y verde son guías para que se identifique el caso $m = 3$. Para todos los conjuntos de curvas de transmisión, identificamos el mismo punto de Klein $E_K \simeq 0.28E_0$ donde la transmisión es 1, y una clara tendencia de supresión después de ese punto.

Sin embargo, en este caso el error aumenta más de 10%. Por lo tanto, en este caso simplemente calculamos la transformada de Fourier (6.54) numéricamente.

En Fig. (6.6), se muestra el coeficiente de reflexión y transmisión de una onda de propagación a través de las superficies B_3 -Bour y B_4 -Bour. Como en el caso clásico de Enneper, se puede apreciar que para cada superficie B_n -Bour existe un único punto de Klein $E_{K,n}$, donde la transmitancia es uno. El punto de Klein se mueve hacia la derecha para valores mayores de n . Después del punto de Klein $E_{K,n}$ la transmisión disminuye lentamente a medida que n aumenta; sin embargo, también se suprime por completo para valores de energía grandes.

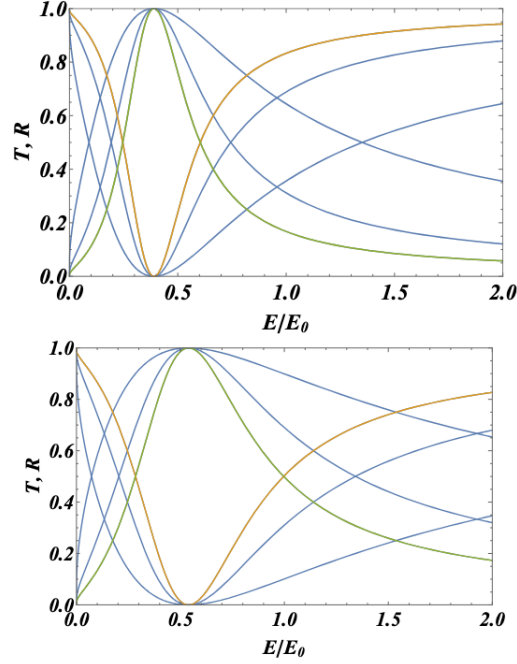


Figura 6.6 : Familia de coeficientes de transmisión y reflexión ((6.43) y (6.44)) versus energía reducida $E_* = E/E_0$ usando la evaluación numérica de la transformada de Fourier (6.57) correspondiente a la superficie B3-Bour con $n = 3$ (arriba) y la superficie B4-Bour con $n = 4$ (abajo). El conjunto de curvas se obtuvo para casos con $m = 1, 2, 3$. Las curvas naranja y verde son guías para identificar el caso $m = 3$. Para todos los conjuntos de curvas de transmisión, identificamos el mismo punto de Klein $E_K \simeq 0.39E_0$ (arriba) y $E_K \simeq 0.54E_0$ (abajo), donde el la transmisión es 1, y una clara tendencia a la baja en la transmisión después de ese punto. Además, cuánto mayor sea el valor de n , más lenta será la tendencia a la baja.

Capítulo 7

Conclusiones

En este trabajo de investigación estudiamos la propagación de los grados de libertad electrónicos sobre una hoja curva de grafeno con base a la ecuación de Dirac. Planteamos la hipotética existencia de una lámina de grafeno con la geometría de una superficie de Bour; ejemplos de estas superficies son la catenoide, el helicoide y la superficie de Enneper, entre otras superficies B_n ¹. Las superficies de Bour pertenecen a la gran familia de superficies mínimas que minimizan el área. La geometría de las superficies mínimas se propuso para modelar estructuras de carbono específicas [21]. Aunque todavía no existe una realización artificial o natural de estos alótropos de carbono en el laboratorio o en la naturaleza, existen buenas expectativas de su existencia a partir de investigaciones numéricas y experimentales [20, 25, 27].

La ecuación de Dirac obtenida para nuestras estructuras se escribe como

$$i\hbar\partial_t\Phi = v_F\sigma_1\hat{p}_x\Phi + v_FV(x)\sigma_2\hat{\ell}_\theta\Phi, \quad (7.1)$$

¹Que se pueden etiquetar usando el parámetro n

donde v_F es la velocidad de Fermi, siendo σ_1 y σ_2 las matrices de Pauli. En esta ecuación, $V(x)$ se ha interpretado como un potencial de dispersión efectivo acoplado a un término de órbita de pseudoespín de la forma $\sigma_2 \ell_\theta$, donde σ_2 la dirección del pseudogiro y $\hat{\ell}_\theta$ el momento angular en dos dimensiones. Para cada superficie de Bour, se encontró que $V(x)$ decae a cero conforme $x \rightarrow \infty$, mientras que $V(x)$ funciona como una barrera potencial cerca de $x = 0$. De hecho, se puede demostrar que para $n \geq 2$, $V(x)$ se acerca a un potencial repulsivo de tipo Coulombico.

El comportamiento asintótico de los estados en $x \rightarrow \infty$ se determina con (7.1), que efectivamente corresponde a soluciones de una ecuación de Dirac en un espacio-tiempo $1 + 1$. Estos estados en términos de x se caracterizan como ondas planas con un pseudoespín hacia arriba \uparrow (o hacia abajo \downarrow) dependiendo del valor positivo o negativo de la energía. Además, mediante el formalismo de Lippmann-Schwinger, estudiamos los estados de dispersión, dando lugar a un estado de dispersión dividido en una onda transmitida y una reflejada. Esto se hace mediante la aproximación Born y Born de orden superior. En particular, se observa que la onda reflejada transmuta la dirección del pseudoespín, que denominamos interacción espín-órbita.

Además, a través de la corriente de Nöether J^μ , se determina la densidad de probabilidad, J^0 , lo que nos permite argumentar que es más probable encontrar fermiones de Dirac cerca del punto de dispersión; de hecho, dentro de esta aproximación encontramos que la densidad de probabilidad es proporcional a $V(x)$. Ahora, a partir de las componentes espaciales de J^μ , se determinan las corrientes incidente y dispersa para encontrar expresiones para la reflectancia $\mathcal{R}(E)$ y la transmitancia $\mathcal{T}(E)$, respectivamente. Se encuentra que para las superficies de Bour B_0 , catenoide (o helicoidal) y B_1 -Bour, existe un comportamiento habitual para la transmitancia y la reflectancia, dando lugar al efecto de transmitancia total para grandes va-

lores de energía. Aunque la barrera potencial en los casos B_0 y B_1 evoca la situación habitual donde surge la paradoja de Klein, la diferencia radica en el acoplamiento con σ_2 que aparece en (7.1), que acuñamos como la ausencia de la paradoja de Klein [70]. Sin embargo, para las superficies de Bour B_n con $n \geq 2$, incluida la superficie clásica de Enneper, demostramos que hay un punto de energía E_K para el cual la transmitancia es igual a $\mathcal{T}(E_K) = 1$, dando lugar a una manifestación de la paradoja de Klein, mientras que para grandes valores de energía $E \gg E_K$ la transmitancia decae a cero suprimiendo la conductancia por completo.

Cabe mencionar es que en esta tesis no contempla un análisis a nivel de la red en la ecuación de Dirac, es decir, no toma en cuenta los defectos topológicos que ocurren en realidad en todas las superficies de carbono con curvatura, sin embargo, la inclusión de estos defectos se manifiestan como flujos magnéticos (no abelianos) que salen en forma transversal a la superficie a través de la inserción de anillos heptagonal. De esta manera, se considera el campo de Dirac acoplado a un campo de norma no Abelianos, esto se reporta en el artículo publicado [71].

El presente trabajo de investigación puede ampliarse de la siguiente manera. Como sabemos el programa VASP tiene sus limitaciones para estructuras como es nuestro caso por ende el primer paso sería explorar otras herramientas como Quantum Espresso o Gaussian [62, 63] para realizar nuevamente la optimización de la estructura como la densidad de estados y así comparar con nuestros resultados. Por otra parte, siguiendo una dirección diferente, a través de la representación de Weierstrass-Enneper, podemos proponer el estudio de la propagación de los grados de libertad electrónicos en otras superficies mínimas como superficies mínimas simplemente periódicas, k-noides o Schwartzitas que están más involucrados actualmente en la investigación. En particular, para estas superficies, encontramos que el

factor conforme $\Lambda(r, \theta)$ depende intrincadamente de r y θ , por lo que no es posible realizar una separación como en el caso de Bour [34]. Sin embargo, podemos implementar métodos tradicionales como el elemento finito para resolver la ecuación de Dirac

$$i\hbar\partial_t\Phi = -i\frac{\hbar v_F}{\Lambda} \left(\sigma_1\partial_r\Phi + \frac{1}{r}\sigma_2\partial_\theta\Phi \right). \quad (7.2)$$

para estudiar otras propiedades electrónicas como la densidad de estados, la conductividad de Kubo, etc.

Apéndice A

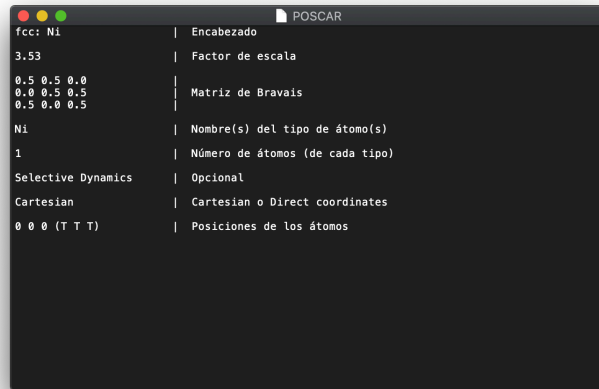
Programa VASP

Vienna Ab initio Simulation Package (VASP) es un programa de ordenador escrito en Lenguaje FORTRAN para el modelado de materiales a escala atómica a partir de los primeros principios [72–74]. VASP calcula una solución aproximada a la ecuación de Schrödinger de muchos cuerpos, ya sea dentro de la teoría funcional de densidad (DFT), o dentro del esquema de Hartree-Fock (HF). En VASP, las cantidades centrales, como los orbitales de un electrón, la densidad de carga electrónica y el potencial local se expresan en conjuntos de base de onda plana. Las interacciones entre los electrones y los iones se describen utilizando pseudopotenciales, o el método de Proyección Augmentada Wave (PAW). Más información sobre las características se puede encontrar en [50].

A.1. Archivos de entrada

Para realizar un cálculo en VASP se necesitan cuatro archivos de entrada: POSCAR, POTCAR, INCAR y KPOINT.

El archivo POSCAR contiene la configuración inicial de la geometría de red



```

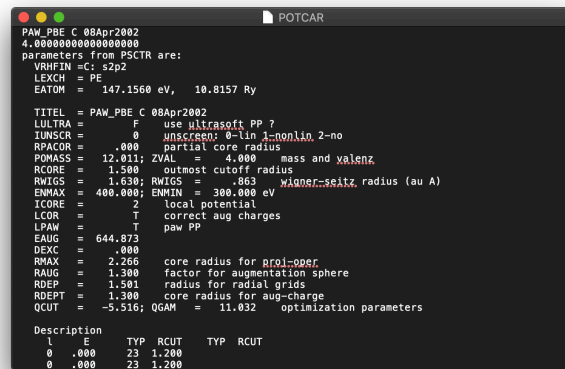
fcc: Ni | Encabezado
3.53 | Factor de escala
0.5 0.5 0.0 | Matriz de Bravais
0.0 0.5 0.5 |
0.5 0.0 0.5 |
Ni | Nombre(s) del tipo de átomo(s)
1 | Número de átomos (de cada tipo)
Selective Dynamics | Opcional
Cartesian | Cartesian o Direct coordinates
0 0 0 (T T T) | Posiciones de los átomos
  
```

Figura A.1 : Estructura del archivo POSCAR.

y las posiciones iónicas [ver Fig. A.1]. La primera línea es una línea de comentario, que puede ser el título del cálculo. La segunda línea es un factor de escala universal que escala todos los vectores de red y todas las coordenadas atómicas, o interpretado como el total volumen de la celda si es un valor negativo. Las líneas tercera, cuarta y quinta son los vectores de red que definen la celda unitaria del sistema. La sexta línea proporciona los símbolos atómicos de los elementos químicos del sistema. La séptima línea es el número correspondiente de átomos para las especies atómicas escritas en la sexta línea. La octava línea es opcional, si se escribe “Selective Dynamics”, entonces las siguientes líneas que representan las coordenadas de los átomos son proporcionadas por las banderas adicionales “T” y “F”, lo que permite que la coordenada(s) de este átomo cambie durante la optimización iónica (usando T) o no (usando F). En caso de no escribir “Selective Dynamics”, todos los átomos de los sistemas pueden cambiar sus coordenadas durante la optimización por defecto. De esta manera la octava línea especifica que

las coordenadas de los átomos están escritas en coordenadas cartesianas o en coordenadas directas. Si está escrito como “Cartesian”, se usan las coordenadas cartesianas. Si está escrito como “Direct”, se usan las coordenadas directas. Las siguientes líneas son las tres coordenadas para cada átomo. En el modo directo, estos tres números se suministran valores, que se combinan con los tres vectores básicos escritos en la tercera, cuarta y quinta líneas. La línea de coordenadas debe ser consistente con la sexta línea que representa los símbolos atómicos.

El archivo POTCAR es una lista de pseudopotenciales para cada átomo en el sistema. Los pseudopotenciales para algunas especies de átomos son suministrados por el paquete VASP [ver Fig. A.2]. Si el sistema tiene más de



```

PAW_PBE_C_08Apr2002
4.0000000000000000
parameters from PSCAR are:
VRHFIN = C; s2p2
LEXCH = PE
EATOM = 147.1560 eV, 10.8157 Ry

TITEL = PAW_PBE_C_08Apr2002
LULTRA = F use ultrasoft PP ?
IUNSCR = 0 unscreen: 0=lin 1=nonlin 2=no
RPAICOR = 000 partial core radius
POMASS = 12.011; ZVAL = 4.900 mass and valenz
RCORE = 1.500 outmost cutoff radius
RWIGS = 1.630; RWIGS = 0.863 WAGNER-seitz radius (au A)
ENMAX = 400.000; ENMIN = 300.000 eV
TCORE = 2 local potential
LCOR = T correct aug charges
LPAM = T paw PP
EAIG = 644.873
DEXC = 0.000
RMAX = 2.266 core radius for ppol-ppcr
RABG = 1.300 factor for augmentation sphere
RDEP = 1.501 radius for radial grids
RDEPT = 1.300 core radius for aug-charge
QCUT = -5.516; QGAM = 11.032 optimization parameters

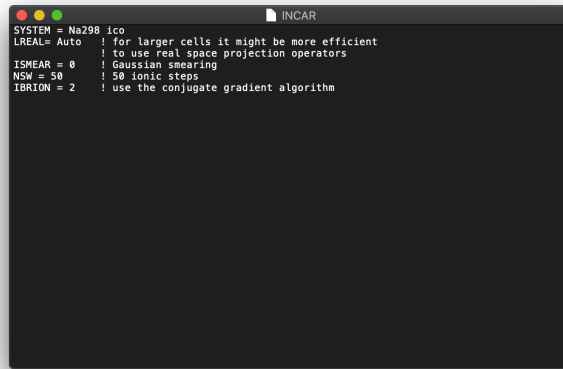
Description
l E TYP RCUT TYP RCUT
0 0.000 23 1.200
0 0.000 23 1.200

```

Figura A.2 : Estructura del archivo POTCAR.

una especie atómica, el archivo debe ser la combinación de todos los pseudopotenciales de los átomos. En el sistema UNIX, esto se puede realizar usando el comando “cat” para obtener un archivo combinado. Los pseudopotenciales de los átomos deben estar en el mismo orden que los átomos del archivo POSCAR, en el que la sexta línea representa los símbolos atómicos del sistema.

INCAR es el archivo de entrada central, que incluye la mayoría de las palabras clave para los cálculos [ver Fig. A.3], por ejemplo: optimización, la energía de corte, los parámetros de convergencia, cálculo SCF, DOS, propiedades dieléctricas, etc. Los parámetros en el archivo pueden modificarse



```
SYSTEM = Na298_ico
LREAL = Auto      ! for larger cells it might be more efficient
                  ! to use real space projection operators
ISMEAR = 0        ! Gaussian smearing
NSW = 50          ! 50 ionic steps
IBRION = 2        ! use the conjugate gradient algorithm
```

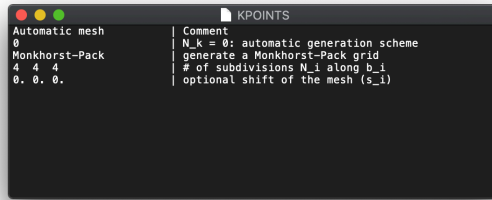
Figura A.3 : Parámetros del archivo INCAR.

dependiendo del tipo de cálculo que se realice. Para obtener una lista de todas las etiquetas consulte [50].

En el archivo KPOINTS se especifican los puntos que VASP utilizará para muestrear la primera zona de Brillouin en el espacio recíproco. Por lo general se utiliza una generación automática de k-mesh. La primera línea es una línea de comentario. El cero en la segunda línea decide usar una generación automática de k-puntos. La tercera línea indica el método a utilizar para la generación, en este caso, el método Monkhorst-Pack [ver Fig. A.4].

A.2. Archivos de salida

Al finalizar un cálculo con VASP se generan los siguientes archivos: OUTCAR, CONTCAR, CHG, CHGCAR, WAVECAR, EIGENVAL, DOSCAR,



```

Automatic mesh      Comment
0                  N,k = 0: automatic generation scheme
Monkhorst-Pack     generate a Monkhorst-Pack grid
4 4 4              # of subdivisions N_i along b_i
0. 0. 0.           optional shift of the mesh (s_i)

```

Figura A.4 : Parámetros del archivo KPOINT.

OSZICAR, entre otros.

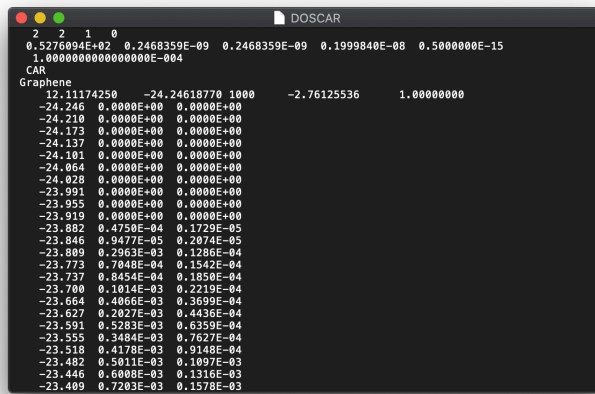
El archivo OUTCAR es el archivo de salida principal de VASP. La mayoría de los datos de salida del cálculo se incluyen en este archivo. Contiene las siguientes partes: información de los archivos INCAR, POTCAR, POSCAR, cálculo de los resultados de la distancia vecina más cercana y análisis de simetría del sistema, información sobre la palabra clave INCAR analizada y detallada, información detallada del trabajo, información de redes, puntos k y posiciones iónicas, información de conjunto de bases, información pseudo-potencial no local e información detallada de cada paso electrónico durante la optimización; valores propios, carga, tensor de energía, etc.

Los archivos de salida CHG, CONTCAR y CHGCAR contienen información gráfica del sistema en estudio, antes de la optimización estructural inicial asignada a VASP (archivo CHG), después de la estabilización (archivo CONTCAR) y el último archivo CHGCAR contiene la densidad de carga electrónica en la configuración nuclear estabilizada. Estos archivos son compatibles con el programa VESTA ¹ [51] para poder visualizarlos de manera gráfica. El archivo CONTCAR se escribe y se actualiza después de cada paso iónico. Contiene la geometría de red y posiciones iónicas después de la

¹Visualization for Electronic and STructural Analysis

optimización. Tiene un formato similar al archivo POSCAR y normalmente escrito en coordenadas directas.

DOSCAR es un archivo de salida que contiene una tábula de tres columnas, la primer columna contiene las energías de amarre de los electrones a los núcleos, la segunda columna corresponde a la integral de la DOS, la tercera columna es la DOS que nos da información del número de estados por unidad de energía de la nube electrónica del sistema [ver Fig. A.5]. Para poder



```

2 2 1 0
0.5276904E+02 0.2468359E-09 0.2468359E-09 0.1999840E-08 0.5000000E-15
1.000000000000000E-004
CAR
Graphene
12.11174250 -24.24618770 1000 -2.76125536 1.00000000
-24.246 0.0000E+00 0.0000E+00
-24.210 0.0000E+00 0.0000E+00
-24.173 0.0000E+00 0.0000E+00
-24.137 0.0000E+00 0.0000E+00
-24.101 0.0000E+00 0.0000E+00
-24.064 0.0000E+00 0.0000E+00
-24.028 0.0000E+00 0.0000E+00
-23.991 0.0000E+00 0.0000E+00
-23.955 0.0000E+00 0.0000E+00
-23.919 0.0000E+00 0.0000E+00
-23.882 0.4750E-04 0.1729E-05
-23.846 0.9477E-05 0.2074E-05
-23.809 0.2963E-03 0.1286E-04
-23.773 0.7048E-04 0.1542E-04
-23.737 0.8454E-04 0.1850E-04
-23.700 0.1014E-03 0.2219E-04
-23.664 0.4066E-03 0.3699E-04
-23.627 0.2027E-03 0.4436E-04
-23.591 0.5283E-03 0.6359E-04
-23.555 0.3484E-03 0.7627E-04
-23.518 0.4178E-03 0.9148E-04
-23.482 0.5011E-03 0.1097E-03
-23.446 0.6008E-03 0.1316E-03
-23.409 0.7283E-03 0.1578E-03

```

Figura 2.5 : Estructura del archivo DOSCAR.

visualizar los resultados del archivo DOSCAR, podemos emplear cualquier programa para obtener las funciones a partir de la tábula, podemos utilizar GNUPLOT, XMGRACE, entre otros; lo recomendable es que sean programas que trabajen con imágenes de alta calidad para poder distinguir con claridad los resultados. El archivo OSZICAR es una versión simplificada del archivo OUTCAR que resume la información en una línea para cada paso electrónico. En este archivo, el recuento de iteración, la energía total, el cambio de la energía total se puede encontrar fácilmente.

Apéndice B

Red de Bravais

Un concepto fundamental en la descripción de cualquier sólido cristalino es el de la red de Bravais, que especifica el arreglo periódico en la que se ordenan las unidades repetidas del cristal. Las unidades pueden ser átomos individuales, grupos de átomos, moléculas, iones, etc., pero la red de Bravais resume solo la geometría de la estructura periódica subyacente, independientemente de cuáles sean las unidades reales. Damos dos definiciones equivalentes de una red Bravais:

- (a) Una red de Bravais es un arreglo infinito de puntos discretos con un ordenamiento y orientación, que parece exactamente la misma, desde cualquier punto de observación.
- b) Una red de Bravais (tridimensional) es aquella formada por todos los puntos con vectores de posición \mathbf{R} de la forma:

$$\mathbf{R} = n_1 \mathbf{a}_1 + n_2 \mathbf{a}_2 + n_3 \mathbf{a}_3, \quad (\text{B.1})$$

donde \mathbf{a}_1 , \mathbf{a}_2 y \mathbf{a}_3 son cualquiera tres vectores que no están todos en el mismo plano, y n_1 , n_2 y n_3 varían a través de todos los valores enteros.

Los vectores \mathbf{a}_i que aparecen en la definición (b) de una red de Bravais son llamados vectores primitivos y se dice que éstos generan la red [45].

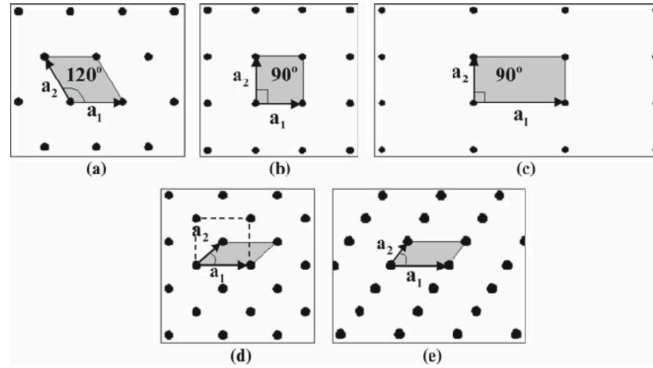


Figura A.1 : Los cinco tipos diferentes de red de Bravais: a) Hexagonal, b) Cuadrada, c) Rectangular, d) Rectangular centrado, donde las líneas discontinuas forman un rectángulo y e) Oblicua.

Apéndice C

Cálculo de la función de Green

Comencemos con la ecuación

$$(E - v_F \sigma_1 \hat{p}_x) \mathbb{G}(x, x', E) = \delta(x - x'), \quad (\text{C.1})$$

donde el operador $\hat{p}_x = -i\hbar\partial_x$ y recordemos que la relación de dispersión viene dada por $E = \pm\hbar v_F |k|$. Ahora definamos la función $g_0(x, x', E)$ de manera que

$$\mathbb{G}(x, x', E) = (E + v_F \sigma_1 \hat{p}_x) g_0(x, x', E), \quad (\text{C.2})$$

sustituyendo (C.2) en (C.1) se obtiene

$$(\hbar v_F)^2 (-\partial_x^2 + k^2) g_0(x, x', E) = \delta(x - x'), \quad (\text{C.3})$$

observemos que (C.3) es la ecuación de Green-Helmholtz, y la solución está dado por [75]

$$g_0(x, x', E) = \frac{1}{2i(\hbar v_F)^2 |k|} e^{i|k||x-x'|}. \quad (\text{C.4})$$

Apéndice D

Cálculo de la aproximación de Born de orden superior

D.1. Cálculo de los términos $\tau_{n+1}(p)$

Comenzamos con la ecuación (6.15)

$$\begin{aligned}\tau_{n+1}(p) &= (\hbar v_F)^{n+1} (2\pi)^n \sum_{\mathbf{q}^{(1)}, \dots, \mathbf{q}^{(n)}} \sigma_2 m \delta_{m m^{(1)}} \tilde{U}(p - q^{(1)}) \\ &\times \left(\prod_{\ell=1}^{n-1} \mathbb{G}(q^{(\ell)}) \sigma_2 m^{(\ell)} \delta_{m^{(\ell)} m^{(\ell+1)}} \tilde{U}(q^{(\ell)} - q^{(\ell+1)}) \right) \mathbb{G}(q^{(n)}) \\ &\times \sigma_2 v_{\mu \cdot \sigma} f_{m^{(n)}} m^{(n)} \tilde{U}(q^{(n)} - \sigma |k|),\end{aligned}\tag{D.1}$$

donde hemos sustituido la expresión (6.16) y (6.17). Aprovechando los deltas de Kronecker $\delta_{m^{(\ell)} m^{(\ell+1)}}$ podemos simplificar la última expresión de la

siguiente manera

$$\begin{aligned} \tau_{n+1}(p) &= (\hbar v_F m)^{n+1} f_m \int \left(\prod_{\ell=1}^n \frac{dq^{(\ell)}}{2\pi} \right) \sigma_2 \tilde{U}(p - q^{(1)}) \\ &\times \left(\prod_{\ell=1}^{n-1} \mathbb{G}(q^{(\ell)}) \sigma_2 \tilde{U}(q^{(\ell)} - q^{(\ell+1)}) \right) \mathbb{G}(q^{(n)}) \sigma_2 v_{\mu\sigma} \tilde{U}(q^{(n)} - \sigma |k|). \end{aligned} \quad (\text{D.2})$$

Ahora, organizamos las integrales en la siguiente estructura anidada

$$\tau_{n+1}(p) = (\hbar v_F m)^{n+1} f_m \int \frac{dq^{(1)}}{2\pi} \sigma_2 \tilde{U}(p - q^{(1)}) \mathbb{G}(q^{(1)}) \mathcal{U}^{(1)}(q^{(1)}) \sigma_2 v_{\mu\sigma}, \quad (\text{D.3})$$

donde $\mathcal{U}^{(1)}(q^{(1)})$ está escrito en términos de $\mathcal{U}^{(2)}(q^{(2)})$, y así sucesivamente.

En general, uno tiene la siguiente definición

$$\mathcal{U}^{(\ell)}(q^{(\ell)}) = \int \frac{dq^{(\ell+1)}}{2\pi} \sigma_2 \tilde{U}(q^{(\ell)} - q^{(\ell+1)}) \mathbb{G}(q^{(\ell+1)}) \mathcal{U}^{(\ell+1)}(q^{(\ell+1)}),$$

donde $\ell = 1, 2, \dots, n-1$ y $\mathcal{U}^{(n)}(q^{(n)}) = \tilde{U}(q^{(n)} - \sigma |k|)$. A continuación, procedamos a calcular $\mathcal{U}^{(n-1)}(q^{(n-1)})$. La integral involucrada en esta cantidad se puede realizar usando integración compleja, reemplazando $q^{(n)}$ por la variable compleja z

$$\mathcal{U}^{(n-1)}(q^{(n-1)}) = i \int_{\Gamma_1} \frac{dz}{2\pi i} \sigma_2 \tilde{U}(q^{(n-1)} - z) \mathbb{G}(z) \tilde{U}(z + |k|), \quad (\text{D.4})$$

donde hemos puesto $\sigma = -1$ ya que tenemos una onda izquierda inicial. La integración compleja de contorno Γ_1 se elige como se muestra en el lado izquierdo de la Fig. D.1 ya que excluimos los puntos donde el argumento de la transformada de Fourier es cero. Observemos que $\tilde{U}(0) = \int_{-\infty}^{\infty} dx U(x)$ es estrictamente divergente ya que $U(x)$ es un potencial de largo alcance que para todas las superficies de Bour decae como $1/x$.

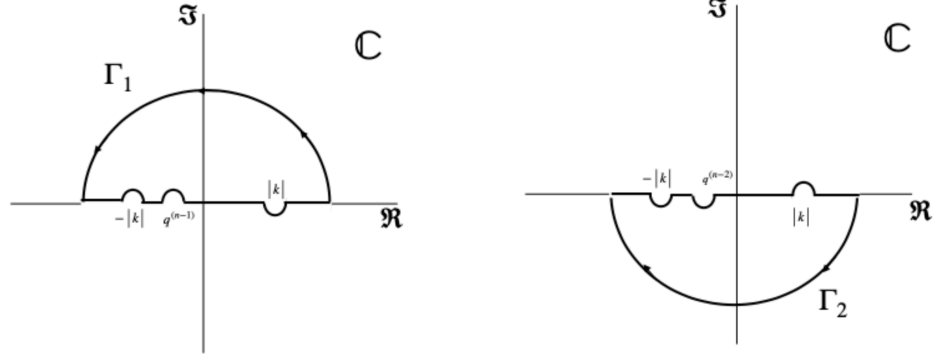


Figura C.1 : Curvas de contorno Γ_1 y Γ_2 para las integrales complejas en el plano z (D.4) y (D.5).

La función de Green $\mathbb{G}(p)$ en el espacio de momentos se puede escribir como

$$\mathbb{G}(p) = \frac{\mu}{\hbar v_F} \frac{|k| + \mu \sigma_1 p}{[p - (|k| + i\epsilon)][p + (|k| + i\epsilon)]},$$

donde $\mu = \pm$ representa los estados de energía positiva y negativa, y uno puede identificar dos polos en $|k| + i\epsilon$ y $-|k| - i\epsilon$. Usando el teorema integral de Cauchy no es difícil demostrar que

$$\mathcal{U}^{(n-1)}(q^{(n-1)}) = \tilde{U} \left(q^{(n-1)} - |k| \right) \frac{i\mu}{\hbar v_F} \tilde{U} (2|k|) \sigma_2 \mathbb{P}_\mu,$$

donde $\mathbb{P}_\mu = \frac{1}{2}(1 + \mu \sigma_1)$ es un proyector. Ahora, para ser transparentes en el cálculo, insertemos este resultado en la integración por la variable $q^{(k-1)}$, resultando como

$$\begin{aligned} \mathcal{U}^{(n-2)}(q^{(n-2)}) &= \int \frac{dq^{(n-1)}}{2\pi} \sigma_2 \tilde{U} \left(q^{(n-2)} - q^{(n-1)} \right) \mathbb{G} \left(q^{(n-1)} \right) \tilde{U} \left(q^{(n-1)} - |k| \right) \\ &\times \frac{i\mu}{\hbar v_F} \tilde{U} (2|k|) \sigma_2 \mathbb{P}_\mu. \end{aligned}$$

Aunque la integración es similar a la anterior, conviene realizar el cambio

de variable $q^{(n-1)} \rightarrow -q^{(n-1)}$, por lo tanto, la integración da como resultado

$$\begin{aligned} \mathcal{U}^{(n-2)}(q^{(n-2)}) &= \int \frac{dq^{(n-1)}}{2\pi} \sigma_2 \tilde{U} \left(q^{(n-2)} + q^{(n-1)} \right) \mathbb{G} \left(-q^{(n-1)} \right) \tilde{U}^* \left(q^{(n-1)} + |k| \right) \\ &\times \frac{i\mu}{\hbar v_F} \tilde{U} \left(2|k| \right) \sigma_2 \mathbb{P}_\mu, \end{aligned} \quad (\text{D.5})$$

donde $\tilde{U}^*(k) = \tilde{U}(-k)$ es el complejo conjugado. Ahora, procedemos a calcular esta integral usando nuevamente la integración compleja como la integración anterior. El resultado es el mismo excepto que \mathbb{P}_μ cambia en $\mathbb{P}_{-\mu}$, es decir,

$$\mathcal{U}^{(n-2)}(q^{(n-2)}) = \tilde{U} \left(q^{(n-2)} + |k| \right) \left(\frac{i\mu}{\hbar v_F} \right)^2 \left| \tilde{U} \left(2|k| \right) \right|^2 \sigma_2 \mathbb{P}_{-\mu} \sigma_2 \mathbb{P}_\mu,$$

donde $|\cdot|$ es la norma compleja. Ahora, mediante un proceso iterativo, se puede concluir que

$$\mathcal{U}^{(1)}(q^{(1)}) = \tilde{U} \left(q^{(1)} + (-1)^{n-1} |k| \right) \left(\frac{i\mu}{\hbar v_F} \right)^{n-1} \mathbb{B}_\mu^{(n)},$$

donde

$$\mathbb{B}_\mu^{(n)} = \begin{cases} \prod_{j=1}^{(n-1)/2} \left[\left| \tilde{U} \left(2|k| \right) \right|^2 \sigma_2 \mathbb{P}_{-\mu} \sigma_2 \mathbb{P}_\mu \right], & \text{para } n \text{ impar,} \\ \tilde{U} \left(2|k| \right) \sigma_2 \mathbb{P}_\mu \prod_{j=1}^{(n-2)/2} \left[\left| \tilde{U} \left(2|k| \right) \right|^2 \sigma_2 \mathbb{P}_{-\mu} \sigma_2 \mathbb{P}_\mu \right], & \text{para } n \text{ par.} \end{cases} \quad (\text{D.6})$$

Tenga en cuenta que (D.6) se puede simplificar aún más como consecuencia de la siguiente álgebra $\sigma_2 = \mathbb{P}_\mu = \mathbb{P}_{-\mu} \sigma_2$, de este modo, $\sigma_2 \mathbb{P}_{-\mu} \sigma_2 \mathbb{P}_\mu = \mathbb{P}_\mu \sigma_2^2 \mathbb{P} = \mathbb{P}_\mu^2 = \mathbb{P}_\mu$. Usando esta álgebra y la propiedad $\mathbb{P}_\mu^2 = \mathbb{P}_\mu$, se obtiene

$$\mathbb{B}_\mu^{(n)} = \begin{cases} \left| \tilde{U} \left(2|k| \right) \right|^{n-1} \mathbb{P}_\mu, & \text{para } n \text{ impar,} \\ \tilde{U} \left(2|k| \right) \left| \tilde{U} \left(2|k| \right) \right|^{n-2} \sigma_2 \mathbb{P}_\mu, & \text{para } n \text{ par.} \end{cases}$$

Ahora, sustituimos $\mathcal{U}^{(1)}(q^{(1)})$ en la ecuación (D.3). Procedemos a realizar el cálculo para n casos pares e impares utilizando la misma estrategia utilizada

para calcular las integrales sobre las variables $q^{(k)}$ y $q^{(k-1)}$. Además usamos la propiedad $\mathbb{P}_\mu v_\mu = v_\mu$ y $\sigma_2 v_{-\mu} = i\mu v_\mu$. Así, el resultado del $(n+1)$ -ésimo término corresponde a las expresiones en (6.19) y (6.20).

D.2. Cálculo de los términos $C_{n+1}(x)$

El punto de partida para calcular los términos $C_{n+1}(x)$ corresponde a la integral de Fourier

$$C_{n+1}(x) = \int \frac{dp}{2\pi} e^{ipx} \mathbb{G}(p) \tau_{n+1}(p), \quad (\text{D.7})$$

en los casos n par o impar. Para n impar, usamos la ecuación (6.19), hacemos el cambio de variable $p \rightarrow -p$, y realizamos la integración compleja usando el contorno Σ_2 . En cambio, para n par, usamos la ecuación (6.20), y la integración compleja se realiza usando el contorno Σ_1 . De esta manera, obtenemos las expresiones deseadas (6.24) y (6.25), respectivamente.

Apéndice E

Parametrización explícita

En esta sección, mostramos las parametrizaciones explícitas para las superficies; Catenoide, Helicoide, B_1 y Enneper en coordenadas polares (r, θ) , siguiendo [76]. para el catenoide

$$\mathbf{X}_c(r, \theta) = \left(\frac{\alpha}{2} \left(\frac{1}{r} + r \right) \cos \theta, \frac{\alpha}{2} \left(\frac{1}{r} + r \right) \sin \theta, -\alpha \log r \right); \quad (\text{E.1})$$

para el helicoide

$$\mathbf{X}_h(r, \theta) = \left(\frac{\beta}{2} \left(r - \frac{1}{r} \right) \sin \theta, \frac{\beta}{2} \left(r - \frac{1}{r} \right) \cos \theta, \beta \varphi \right); \quad (\text{E.2})$$

para la superficie de Enneper

$$\mathbf{X}_e(r, \theta) = \left(r \cos \theta - \frac{r^3}{3} \cos 3\theta, -r \sin \theta - \frac{r^3}{3} \sin 3\theta, r^2 \cos 2\theta \right); \quad (\text{E.3})$$

y para la superficie B_1

$$\mathbf{X}_b(r, \theta) = \left(\log r - \frac{r^2}{2} \cos 2\theta, -\theta - \frac{r^2}{2} \sin 2\theta, 2r \cos \theta \right), \quad (\text{E.4})$$

Usando estas parametrizaciones, \mathbf{X}_c , \mathbf{X}_h , \mathbf{X}_b y \mathbf{X}_e , se dibujan las superficies con ayuda de *Mathematica*.

Referencias

- [1] S. Deng and V. Berry, “Wrinkled, rippled and crumpled graphene: an overview of formation mechanism, electronic properties, and applications,” *Materials Today*, vol. 19, no. 4, pp. 197–212, 2016.
- [2] K. S. Novoselov, A. K. Geim, S. V. Morozov, D. Jiang, Y. Zhang, S. V. Dubonos, I. V. Grigorieva, and A. A. Firsov, “Electric field effect in atomically thin carbon films,” *Science*, vol. 306, pp. 666–669, 2004.
- [3] A. A. Balandin, S. Ghosh, W. Bao, I. Calizo, D. Teweldebrhan, F. Miao, and C. N. Lau, “Superior thermal conductivity of single-layer graphene,” *Nano letters*, vol. 8, no. 3, pp. 902–907, 2008.
- [4] C. Lee, X. Wei, J. W. Kysar, and J. Hone, “Measurement of the elastic properties and intrinsic strength of monolayer graphene,” *science*, vol. 321, no. 5887, pp. 385–388, 2008.
- [5] N. Savage, “Materials science: Super carbon,” *Nature*, vol. 483, no. 7389, pp. S30–S31, 2012.

- [6] H. W. Kroto, J. R. Heath, S. C. O'Brien, R. F. Curl, and R. E. Smalley, " c_{60} : Buckminsterfullerene," *Nature*, vol. 318, pp. 162–163, 1985.
- [7] W. Kratschmer, L. D. Lamb, K. Fostiropoulos, and D. R. Huffman, "Solid c_{60} : a new form of carbon," *Nature*, vol. 347, pp. 354–358, 1990.
- [8] S. Iijima, "Helical microtubules of graphitic carbon," *Nature*, vol. 354, pp. 56–58, 1991.
- [9] A. K. Geim and K. S. Novoselov, "The rise of graphene," *Nature materials*, vol. 6, no. 3, pp. 183–191, 2007.
- [10] K. S. Novoselov, A. K. Geim, S. V. Morozov, D. Jiang, M. I. Katsnelson, I. V. Grigorieva, S. V. Dubonos, and A. A. Firsov, "Two-dimensional gas of massless dirac fermions in graphene," *Nature*, vol. 438, pp. 197–200, 2005.
- [11] G. W. Semenoff, "Condensed-matter simulation of a three-dimensional anomaly," *Phys. Rev. Lett.*, vol. 53, pp. 2449–2452, Dec 1984.
- [12] D. P. DiVincenzo and E. J. Mele, "Self-consistent effective-mass theory for intralayer screening in graphite intercalation compounds," *Phys. Rev. B*, vol. 29, pp. 1685–1694, Feb 1984.
- [13] H. Shima and J. Onoe, "Topology-induced geometry and properties of carbon nanomaterials," *The Role of Topology in Materials*, pp. 53–84, 2018.
- [14] F. de Juan, J. L. Manes, and M. A. Vozmediano, "Gauge fields from strain in graphene," *Physical Review B*, vol. 87, no. 16, p. 165131, 2013.
- [15] M. Oliva-Leyva and G. G. Naumis, "Generalizing the fermi velocity of strained graphene from uniform to nonuniform strain," *Physics Letters A*, vol. 379, no. 40-41, pp. 2645–2651, 2015.

- [16] P. Castro-Villarreal and R. Ruiz-Sánchez, “Pseudomagnetic field in curved graphene,” *Physical Review B*, vol. 95, no. 12, p. 125432, 2017.
- [17] Z. Jiang, Y. Zhang, Y.-W. Tan, H. Stormer, and P. Kim, “Quantum hall effect in graphene,” *Solid state communications*, vol. 143, no. 1-2, pp. 14–19, 2007.
- [18] M. I. Katsnelson, K. S. Novoselov, and A. K. Geim, “Chiral tunneling and the klein paradox in graphene,” *Nature physics*, vol. 2, no. 9, pp. 620–625, 2006.
- [19] T. M. Rusin and W. Zawadzki, “Zitterbewegung of electrons in graphene in a magnetic field,” *Physical Review B*, vol. 78, no. 12, p. 125419, 2008.
- [20] A. L. Mackay, H. Terrones, P. W. Fowler, H. W. Kroto, A. L. Mackay, G. Turner, and D. R. M. Walton, “Hypothetical graphite structures with negative gaussian curvature,” *Philosophical Transactions of the Royal Society of London. Series A: Physical and Engineering Sciences*, vol. 343, no. 1667, pp. 113–127, 1993.
- [21] H. Terrones and A. Mackay, “The geometry of hypothetical curved graphite structures,” *Carbon*, vol. 30, no. 8, pp. 1251–1260, 1992.
- [22] T. Lenosky, X. Gonze, M. Teter, and V. Elser, “Energetics of negatively curved graphitic carbon,” *Nature*, vol. 355, no. 6358, pp. 333–335, 1992.
- [23] D. Vanderbilt and J. Tersoff, “Negative-curvature fullerene analog of c_{60} ,” *Physical review letters*, vol. 68, no. 4, p. 511, 1992.
- [24] M. O’Keeffe, G. B. Adams, and O. F. Sankey, “Predicted new low energy forms of carbon,” *Physical review letters*, vol. 68, no. 15, p. 2325, 1992.

- [25] H. Terrones and M. Terrones, “Curved nanostructured materials,” *New Journal of Physics*, vol. 5, pp. 126–126, oct 2003.
- [26] H. Terrones, J. Aragon, and J. Fayos, “Geometrical and physical properties of hypothetical periodic and aperiodic graphitic structures,” *Acta Metallurgica et Materialia;(United States)*, vol. 42, no. 8, 1994.
- [27] E. Braun, Y. Lee, S. M. Moosavi, S. Barthel, R. Mercado, I. A. Baburin, D. M. Proserpio, and B. Smit, “Generating carbon schwarzites via zeolite-templating,” *Proceedings of the National Academy of Sciences*, vol. 115, no. 35, pp. E8116–E8124, 2018.
- [28] M.-W. Wang, Z. Li, Y. Liu, W. Jiang, and Z. Wang, “Precise synthesis of schwarzite carbon: hypothesis or reality?,” *Organic Chemistry Frontiers*, vol. 10, no. 11, pp. 2808–2812, 2023.
- [29] A. Lherbier, H. Terrones, and J.-C. Charlier, “Three-dimensional massless dirac fermions in carbon schwarzites,” *Physical Review B*, vol. 90, no. 12, p. 125434, 2014.
- [30] M. Nakahara, *Geometry, Topology and Physics*. CRC Press, 2003.
- [31] W. P. Thurston and J. R. Weeks, “The mathematics of three-dimensional manifolds,” *Scientific American*, vol. 251, no. 1, pp. 108–121, 1984.
- [32] B. Riemann, *Ueber die Hypothesen, welche der Geometrie zu Grunde liegen*, vol. 13. Dietrich, 1867.
- [33] S. Weinberg, “Gravitation and cosmology: principles and applications of the general theory of relativity,” 1972.
- [34] U. Dierkes, S. Hildebrandt, and F. Sauvigny, *Minimal surfaces*. Springer, 2010.

- [35] E. Bour, “Journ. de l’école imperial polytechnique 19,” 1862.
- [36] P. Castro-Villarreal and R. Ruiz-Sánchez, “Pseudomagnetic field in curved graphene,” *Phys. Rev. B*, vol. 95, p. 125432, Mar 2017.
- [37] A. H. Castro Neto, F. Guinea, N. M. R. Peres, K. S. Novoselov, and A. K. Geim, “The electronic properties of graphene,” *Rev. Mod. Phys.*, vol. 81, pp. 109–162, Jan 2009.
- [38] P. Hohenberg and W. Kohn, “Density functional theory (dft),” *Phys. Rev*, vol. 136, p. B864, 1964.
- [39] W. Kohn, “Nobel lecture: Electronic structure of matter—wave functions and density functionals,” *Reviews of Modern Physics*, vol. 71, no. 5, p. 1253, 1999.
- [40] R. O. Jones and O. Gunnarsson, “The density functional formalism, its applications and prospects,” *Reviews of Modern Physics*, vol. 61, no. 3, p. 689, 1989.
- [41] R. G. Parr *et al.*, “W. yang density functional theory of atoms and molecules,” *Oxford University Press*, vol. 1, p. 1989, 1989.
- [42] W. Koch and M. C. Holthausen, *A chemist’s guide to density functional theory*. John Wiley & Sons, 2015.
- [43] W. Kohn and L. J. Sham, “Self-consistent equations including exchange and correlation effects,” *Physical review*, vol. 140, 1965.
- [44] A. Szabo and N. S. Ostlund, *Modern quantum chemistry: introduction to advanced electronic structure theory*. Courier Corporation, 2012.
- [45] N. W. Ashcroft and N. D. Mermin, “Solid state physics,” *Thomson Learning Inc*, 1976.

- [46] P. R. Wallace, "The band theory of graphite," *Physical review*, vol. 71, no. 9, p. 622, 1947.
- [47] L. E. F. Torres, S. Roche, and J.-C. Charlier, "Introduction to graphene-based nanomaterials: from electronic structure to quantum transport," *Cambridge University Press*, vol. 40, 2015.
- [48] S. Reich, J. Maultzsch, C. Thomsen, and P. Ordejon, "Tight-binding description of graphene," *Physical Review B*, vol. 66, no. 3, p. 035412, 2002.
- [49] C. Bena and G. Montambaux, "Remarks on the tight-binding model of graphene," *New Journal of Physics*, vol. 11, no. 9, p. 095003, 2009.
- [50] G. Kresse, "Vasp the guide," <http://cms.mpi.univie.ac.at/vasp/>, 2001.
- [51] K. Momma and F. Izumi, "VESTA3 for three-dimensional visualization of crystal, volumetric and morphology data," *Journal of Applied Crystallography*, vol. 44, pp. 1272–1276, Dec 2011.
- [52] V. Wang, N. Xu, J.-C. Liu, G. Tang, and W.-T. Geng, "Vaspkit: A user-friendly interface facilitating high-throughput computing and analysis using vasp code," *Computer Physics Communications*, vol. 267, p. 108033, 2021.
- [53] D. W. Boukhvalov, M. I. Katsnelson, and A. I. Lichtenstein, "Hydrogen on graphene: Electronic structure, total energy, structural distortions and magnetism from first-principles calculations," *Phys. Rev. B*, vol. 77, p. 035427, Jan 2008.
- [54] H. Shima, *Functional Analysis for Physics and Engineering: An Introduction*. CRC Press, 2016.

- [55] J. Onoe, T. Nakayama, M. Aono, and T. Hara, “Structural and electrical properties of an electron-beam-irradiated c 60 film,” *Applied physics letters*, vol. 82, no. 4, pp. 595–597, 2003.
- [56] S. Ihara, S. Itoh, and J.-i. Kitakami, “Helically coiled cage forms of graphitic carbon,” *Physical Review B*, vol. 48, no. 8, p. 5643, 1993.
- [57] A. Cortijo and M. A. H. Vozmediano, “Effects of topological defects and local curvature on the electronic properties of planar graphene,” *Nuclear Physics B*, vol. 763, pp. 293–308, 12 2006.
- [58] O. V. Yazyev and S. G. Louie, “Topological defects in graphene: Dislocations and grain boundaries,” *Physical Review B*, vol. 81, no. 19, p. 195420, 2010.
- [59] M. V. Diudea, “Corannulene and corazulene tiling of nanostructures,” *Physical Chemistry Chemical Physics*, vol. 7, no. 20, pp. 3626–3633, 2005.
- [60] W. Humphrey, A. Dalke, and K. Schulten, “Vmd: visual molecular dynamics,” *Journal of molecular graphics*, vol. 14, no. 1, pp. 33–38, 1996.
- [61] M. D. Hanwell, D. E. Curtis, D. C. Lonie, T. Vandermeersch, E. Zurek, and G. R. Hutchison, “Avogadro: an advanced semantic chemical editor, visualization, and analysis platform,” *Journal of cheminformatics*, vol. 4, no. 1, pp. 1–17, 2012.
- [62] P. Giannozzi, S. Baroni, N. Bonini, M. Calandra, R. Car, C. Cavazzoni, D. Ceresoli, G. L. Chiarotti, M. Cococcioni, I. Dabo, *et al.*, “Quantum espresso: a modular and open-source software project for quantum simulations of materials,” *Journal of physics: Condensed matter*, vol. 21, no. 39, p. 395502, 2009.

- [63] M. Caricato, M. J. Frisch, J. Hiscocks, and M. J. Frisch, *Gaussian 09: IOps Reference*. Gaussian Wallingford, CT, USA, 2009.
- [64] R. Osserman, “Global properties of classical minimal surfaces,” *Duke Mathematical Journal*, vol. 32, no. 4, pp. 565 – 573, 1965.
- [65] V. Atanasov, R. Dandoloff, and A. Saxena, “Geometry-induced charge separation on a helicoidal ribbon,” *Phys. Rev. B*, vol. 79, p. 033404, Jan 2009.
- [66] B. A. Lippmann and J. Schwinger, “Variational principles for scattering processes. i,” *Phys. Rev.*, vol. 79, pp. 469–480, Aug 1950.
- [67] J. J. Sakurai and E. D. Commins, “Modern quantum mechanics, revised edition,” *American Journal of Physics*, vol. 63, no. 1, pp. 93–95, 1995.
- [68] L. Parker and D. Toms, *Quantum field theory in curved spacetime: quantized fields and gravity*. Cambridge university press, 2009.
- [69] D. Zwillinger and A. Jeffrey, *Table of integrals, series, and products*. Elsevier, 2007.
- [70] A. S. de Castro, “n+1 dimensional Dirac equation and the Klein paradox,” *American Journal of Physics*, vol. 69, pp. 1111–1112, 10 2001.
- [71] V. A. González-Domínguez, J. A. Reyes-Nava, and P. Castro-Villarreal, “Klein tunneling on bour surfaces with n topological defects,” *Physical Review B*, vol. 108, no. 19, p. 195421, 2023.
- [72] G. Kresse and D. Joubert, “From ultrasoft pseudopotentials to the projector augmented-wave method,” *Phys. Rev. B*, vol. 59, pp. 1758–1775, Jan 1999.
- [73] G. Kresse and J. Hafner, “Ab initio molecular dynamics for liquid metals,” *Phys. Rev. B*, vol. 47, pp. 558–561, Jan 1993.

- [74] G. Kresse and J. Furthmüller, “Efficiency of ab-initio total energy calculations for metals and semiconductors using a plane-wave basis set,” *Computational Materials Science*, vol. 6, no. 1, pp. 15–50, 1996.
- [75] P. M. Morse and H. Feshbach, “Methods of theoretical physics, renewed ed,” *Feshbach, Minneapolis, Minn*, 1981.
- [76] J. Whittemore, “Minimal surfaces applicable to surfaces of revolution,” *Annals of Mathematics*, pp. 1–20, 1917.

1ª ESCUELA SOBRE LA FÍSICA DE MATERIALES CUÁNTICOS

TUXTLA GUTIÉRREZ, CHIAPAS
23 - 26 DE OCTUBRE, 2023

El comité organizador otorga el presente

RECONOCIMIENTO


a **Víctor A. González Domínguez**

Por haber presentado el trabajo

**“Grafeno catenoidal: una nueva nanoestructura de carbono
con curvatura gaussiana negativa”**

en la sesión de Carteles de la Primera Escuela sobre la Física de los Materiales Cuánticos, la cual se desarrolló del 23 al 26 de octubre de 2023, en la ciudad de Tuxtla Gutiérrez, Chiapas, México.


Dr. Pavel Castro Villareal
UNACH




Dr. Romeo de Coss
Cinvestav


Dr. Alberto Martín Ruíz
UNAM



Klein tunneling on Bour surfaces with N topological defects

V́ctor A. Gonźlez-Doḿnguez and Juan A. Reyes-Nava

*Instituto de Investigaci3n e Innovaci3n en Energías Renovables, Universidad de Ciencias y Artes de Chiapas, Libramiento Norte Poniente No. 1150, C.P. 29039, Tuxtla Guti3rrez, Chiapas, M3xico*Pavel Castro-Villarreal **Facultad de Ciencias en F́sica y Matemáticas, Universidad Aut3noma de Chiapas, Carretera Emiliano Zapata, Km. 8, Rancho San Francisco, 29050 Tuxtla Guti3rrez, Chiapas, M3xico* (Received 12 July 2022; revised 10 March 2023; accepted 18 October 2023; published 14 November 2023)

The existence of a curved graphene sheet with the geometry of a Bour surface B_n is supposed, such as the catenoid (or helicoid), B_0 , and the classical Enneper surface, B_2 , among others. In particular, in this paper, the propagation of the electronic degrees of freedom on these surfaces is studied based on the Dirac model coupled to a non-Abelian gauge field that captures topological defects present on each of the surfaces. As a consequence of the polar geometry of B_n , it is found that the geometry of the surface causes the Dirac fermions to move as if they would be subjected to an external potential coupled to a spin-orbit term. The geometry-induced potential is interpreted as a barrier potential, which is asymptotically zero. Furthermore, the behavior of asymptotic Dirac states and scattering states are studied through the Lippmann-Schwinger formalism. It is found that for surfaces B_0 and B_1 , the total transmission phenomenon is found for sufficiently large values of energy, while for surfaces B_n , with $n \geq 2$, it is shown that there is an energy point E_K where Klein's tunneling is realized, while for energy values $E \gg E_K$ it is found that the conductance of the hypothetical material is completely suppressed. In addition, for a large number, N , of topological defects the transmission decays as N^{-2} as far as energy values are different than E_K .

DOI: [10.1103/PhysRevB.108.195421](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.108.195421)**I. INTRODUCTION**

One of the intriguing properties of graphene, among many others [1,2], is that the charge carriers can be described by quasiparticles with the same behavior as relativistic Dirac fermions at the low-energy regime [3]. This fact had been theoretically predicted when it was shown that Dirac's field theory emerges [4,5] from Wallace's tight-binding model [6,7]. These characteristics of graphene allowed for establishing an analogy with relativistic quantum phenomena [8]. Even more so, it is possible to think of graphene as the mother of other graphitic materials since it can fold up to form fullerenes [9,10], roll up into carbon nanotubes [11], and stack up to shape graphite. Furthermore, using concepts from geometry and topology, carbon nanostructured curved materials can be created with unique properties [12,13]. Indeed, curved carbon materials were proposed more than a decade before the advent of groundbreaking graphene [14]. Although there is still no experimental synthesis of these nanostructured materials, there is a good expectation [15] that there will be so with technological advancement [13,16,17].

The possibility of studying quantum phenomena on curved space-times was also raised [18] with the logical implication to explore gravitational analogs phenomena in tabletop experiments [19,20], for instance, through the conformal-gauge symmetry encoded in the $2 + 1$ Dirac theory [21,22], the

intrinsic curvature of the graphene sheet gives up a general relativistic description of fermionic degrees of freedom, whereas the electronic properties of a sheet with a shape of a Beltrami trumpet [23] is interpreted as the Unruh-Hawking effect [24–26], forasmuch under a specific external magnetic field the space-time metric is described by a Zermelo optical metric which is conformally equivalent to the BTZ black hole metric [22], where also Hawking-radiation phenomena can be explored [27]. Likewise, using a variation of the hopping parameters in the tight-binding model, an emergent Horava gravity arises [28]. Additionally, a simulation of quantum gravity analogs can be achieved when chiral symmetry is broken; that is, when it considers trigonal warping of the electronic spectrum [29,30]. From the condensed matter perspective, the Dirac equation in the curved space is a natural model for studying the electronic properties of the graphene sheet when undulations [31–34] and topological defects are present; for instance, one can address the problem of impurities and topological defects [35,36]; in fact, the QFT formulation on the curved space might also describe the external strain acting on the material [37]. Furthermore, the corrugations on a curved sheet of graphene give up the appearance of a pseudomagnetic field [18,38], which is proportional to the Ricci scalar curvature [39,40].

Geometric and topology effects on the behavior of quantum states have been quite interesting to the community for a while. For example, by formulating Schr3dinger quantum mechanics on curves and surfaces using *confining potential formalism* [41–43], the quantum states are analyzed for

*Corresponding author: pcastrov@unach.mx

particles confined to a helix, catenary, helicoid (or catenoid), and Möbius strip [44–47]. Also, evidence was found for reminiscences of an analogous quantum Hall effect when bending a strip helically [48,49]. At the same time, motivated by the physics behind a wormhole space-time in general relativity [50], the catenoid was shown to be the analogous wormhole model in $2 + 1$, while the external electric and magnetic background fields on the catenoid material give up bound states around the bridge and produce modified Landau levels [51]. From the intrinsic perspective, [52], a geometry-induced potential for Dirac fermions is deduced from the intrinsic geometry of the helicoid, resulting in the emergence of a pseudoelectric field near the potential minima giving rise to a chiral separation on the opposite rims of the helicoid [53].

The helicoid and catenoid are isometric surfaces belonging to the family of minimal surfaces, those surfaces that minimize area or, equivalently, those such that mean curvature is zero at each point on the surface, implying a negative Ricci scalar curvature. Also, minimal surfaces are solutions of the Willmore shape equation used to describe the conformation of soft surfaces in biophysics [54]. These surfaces were proposed three decades ago as representations of nanostructured allotropes of carbon obtained by decorating a minimal surface with carbon arrangement such as the triply periodic minimal surface by considering the inclusion of octagon rings in the carbon lattice structure [14]. Here, we assume that minimal surfaces are stable nanostructured graphitic shapes [12]; particularly, we focus on a subset of this family known as Bour surfaces [55] where the catenoid, helicoid, or the classical Enneper surface belong, among other surfaces, all characterized by their polar symmetry. As a consequence of the symmetry and the Weierstrass-Enneper (WE) representation [56], we can simplify the Dirac model in terms of two Dirac equations to study the electronic degrees of freedom in each of the valleys. Furthermore, we determine a geometry-induced potential for the Bour surface that generalizes that found for the helicoid [53]. In particular, we study the propagation of Dirac waves, in each valley, using the Lippmann-Schwinger (LS) equation along the latitudinal lines of the hypothesized material to address the problem of elucidating the role of geometry in the scattering states and the conductance of the material.

This paper is organized as follows. Section II introduces the noncoordinate basis notation and the WE representation for a minimal surface. These elements are necessary so that in Sec. III, we can write the Dirac equation in space-time $\mathbb{M} = \mathbb{R} \times \Sigma$, where Σ is a surface of Bour. In Sec. IV, the Dirac equation is rewritten so it can be interpreted as the equation for a Dirac fermion subjected to a repulsive potential coupled to a spin-orbit term. Furthermore, the asymptotic Dirac states are determined and used as initial states in Sec. V to determine the scattered states based on the LS formalism. Furthermore, in Sec. VI, the transmittance and reflectance coefficients are calculated using the Nöether current. In Sec. VII, conclusions and perspectives are presented; also, Appendices A–C have been added.

II. GEOMETRICAL PRELIMINARIES

This section introduces geometrical preliminaries suitable to set up the analysis of electronic degrees of freedom for

curved Dirac materials performed here. Particularly, it introduces the tetrad formalism for the geometry of a $2 + 1$ space-time, which allows us to write the Dirac equation on a curved space-time associated with the curved Dirac material. Additionally, the WE representation of a minimal surface, $\Sigma \subset \mathbb{R}^3$, is presented; it particularly introduces the Bour subfamily of minimal surfaces. These surfaces are introduced, since we shall analyze the electronic propagation on materials associated with the space-time $\mathbb{R} \times \Sigma$.

A. Tetrad formalism for a $2 + 1$ space-time

First, we introduce local coordinate bases for a $2 + 1$ space-time geometry \mathbb{M} . For the tangent space $T_p\mathbb{M}$, let the set $\{\partial_\mu\}$ be a local coordinate basis, whereas the set $\{dx^\mu\}$ the corresponding basis for the cotangent space $T_p^*\mathbb{M}$. Here, $p \in \mathbb{M}$ and the biorthogonality condition $dx^\mu(\partial_\nu) = \delta_\nu^\mu$ is satisfied. The Greek indices μ split in the chosen local coordinate patch.

The following presents a noncoordinate basis for the tangent space as the set $\{\hat{e}_A = e_\mu^A \partial_\mu\}$, where the capital Latin indices A are global indices $A = 0, 1, 2$, and the coefficients sort up in a matrix structure E , building up an element of $GL(3, \mathbb{R})$. These coefficients, called vielbeins, are attached to a local patch of the manifold \mathbb{M} . The noncoordinate basis is defined in such a way that it diagonalizes the metric tensor $g = g_{\mu\nu} dx^\mu \otimes dx^\nu$, that is, $g(\hat{e}_A, \hat{e}_B) = \eta_{AB}$, where $\eta_{AB} = \text{diag}(-1, 1, 1)$ is the Minkowski space-time metric. This means that one can write the metric tensor components as $g_{\mu\nu} = \eta_{AB} e_\mu^A e_\nu^B$, where e_μ^A are the elements of the inverse matrix E^{-1} . Additionally, the corresponding noncoordinate basis for the cotangent space is defined as the set $\{\hat{\theta}^A = e_\mu^A dx^\mu\}$. Now, the tensor metric can be written as $g = \eta_{AB} \hat{\theta}^A \otimes \hat{\theta}^B$, that is clearly diagonal. Remark that given a metric tensor g , the covectors $\hat{\theta}^A$ are not uniquely determined since there is a gauge freedom to choose $\hat{\theta}^A$ or $\Lambda_A^B \hat{\theta}^A$, where $\Lambda_A^B \in \text{SO}(2, 1)$ is a local element of the Lorentz group [57].

Now, let us introduce a connection one-form $\omega_B^A = \hat{\Gamma}_{CB}^A \hat{\theta}^C$, where $\hat{\Gamma}_{BC}^A$ are the coefficients of the affine connection, ∇ , defined through the equation $\nabla_A \hat{e}_B = \hat{\Gamma}_{AB}^C \hat{e}_C$. The connection one-form encodes geometrical information of \mathbb{M} through the Maurer-Cartan structure equations, which are given by

$$d\hat{\theta}^A + \omega_B^A \wedge \hat{\theta}^B = \mathcal{T}^A, \quad (1)$$

$$d\omega_B^A + \omega_C^A \wedge \omega_B^C = \mathcal{R}_B^A, \quad (2)$$

where \mathcal{T}^A and \mathcal{R}_B^A are the torsion and Riemann curvature of the manifold, respectively. Further, the connection one-form written in the local coordinate basis looks like $\omega^{AB} = \omega_\alpha^{AB} dx^\alpha$, where $\omega^{AB} = \eta^{BC} \omega_C^A$. Note that under a local Lorentz transformation, Λ , the connection one-form transform as $\omega_B^A = \Lambda_C^A \omega_D^C \Lambda_B^D + \Lambda_C^A \partial_\mu \Lambda_B^D$, where $\Lambda_B^D \equiv (\Lambda^{-1})_B^D$. Furthermore, if one asks for a Levi-Civita affine connection ∇ , one has the metric compatibility condition $\nabla_X g = 0$ for any vector field X . This implies the conditions $\omega_{AB} = -\omega_{BA}$ and $\mathcal{T}^A = 0$ [58].

B. Weierstrass-Enneper representation for a minimal surface, and Bour surfaces

Minimal surfaces are mathematical surfaces in the space corresponding to minimizing area surface or surfaces minimizing the Willmore energy [54]. The geometry of these surfaces is determined using the WE representation following Ref. [56]. The WE representation of a minimal surface can be cast in terms of the mapping $\mathbf{X} : \Omega \subset \mathbb{C} \rightarrow \Sigma \subset \mathbb{R}^3$ defined by

$$\mathbf{X}(\omega) = \mathbf{X}_0 + \text{Re} \int_{\omega_0}^{\omega} \Phi(\underline{\omega}) d\underline{\omega}, \tag{3}$$

with $\omega \in \Omega$, where Ω is a simply connected domain Ω . The differential volume $d\underline{\omega}$ represents an appropriate measure for Ω ; Re , and Im denote the real and imaginary parts, respectively. The function $\Phi(\omega)$ can be written in terms of a holomorphic function $\mathcal{F}(\omega)$ as

$$\Phi(\omega) = ((1 - \omega^2)\mathcal{F}(\omega), i(1 + \omega^2)\mathcal{F}(\omega), 2\omega\mathcal{F}(\omega)), \tag{4}$$

where $\mathcal{F}(\omega)$ is called Weierstrass function. The Gauss map using this WE representation is given by the normal vector field $\mathbf{N}(\omega) = (2\text{Re}\omega, 2\text{Im}\omega, |\omega|^2 - 1)/(1 + |\omega|^2)$. Additionally, by taking the real and imaginary parts of $\omega = u + iv \in \mathbb{C}$, respectively, it can be defined as a local patch with local coordinates $\{u, v\}$.

Given a specific Weierstrass function $\mathcal{F}(\omega)$, one can determine the parametrization $\mathbf{X}(\omega)$, which allows us to determine the whole extrinsic and intrinsic geometry of Σ . For instance, the main feature of a minimal surface is the vanishing mean curvature, $H = 0$. Furthermore, the intrinsic geometry of a minimal surface is described in terms of the metric tensor, introduced here, through the square of the line element $ds^2 = g_{ab}d\xi^a d\xi^b$, where the metric tensor components, g_{ab} , are calculated using the equation $g_{ab} = \partial_a \mathbf{X} \cdot \partial_b \mathbf{X}$, with indices $a, b = u, v$. Using the above parametrization of WE representation, it can be shown that $ds^2 = \Lambda^2(\omega)|d\omega|^2$, where $|d\omega|^2 = du^2 + dv^2$, and the conformal factor, $\Lambda^2(\omega)$, is given by $\Lambda^2(\omega) = |\mathcal{F}(\omega)|^2(1 + |\omega|^2)^2$. Thus, WE representation already gives local isothermal coordinates that always exist in a two-dimensional manifold [59]. In addition, the Gaussian curvature is given by $K = -4/|\mathcal{F}(\omega)|^2(1 + |\omega|^2)^4$ for points $\omega \in \Omega'$, where the set of regular points is given by $\Omega' = \{\omega \in \Omega : \mathcal{F}(\omega) \neq 0\}$. In the following, we focus on a subfamily of minimal surfaces known as Bour's minimal surfaces [55,56] defined through the Weierstrass function $\mathcal{F}(\omega) = c\omega^{n-2}$, where $c \in \mathbb{C}$ and $n \in \mathbb{R}$. In this subfamily belong the catenoid with $n = 0$ and $c = R_0/2$, R_0 being the radius of the neck; the helicoid with $n = 0$ and $c = i\alpha$, α being the pitch of the helicoid, and the Enneper surface with $n = 2$, $c = 1$. Also, it is known that n and $-n$ represent the same Bour surface; thus, it is enough to consider the cases $n \geq 0$ [55]. Notice that in the case of the Bour's surfaces, the conformal factor depends just on the norm $|\omega| = \sqrt{u^2 + v^2}$, thus it is convenient to use polar coordinates, (r, θ) , defined as usual, $r = |\omega|$ and $\theta = \arctan(v/u)$. The conformal factor is just given by

$$\Lambda(r) = |c|r^{n-2}(1 + r^2), \tag{5}$$

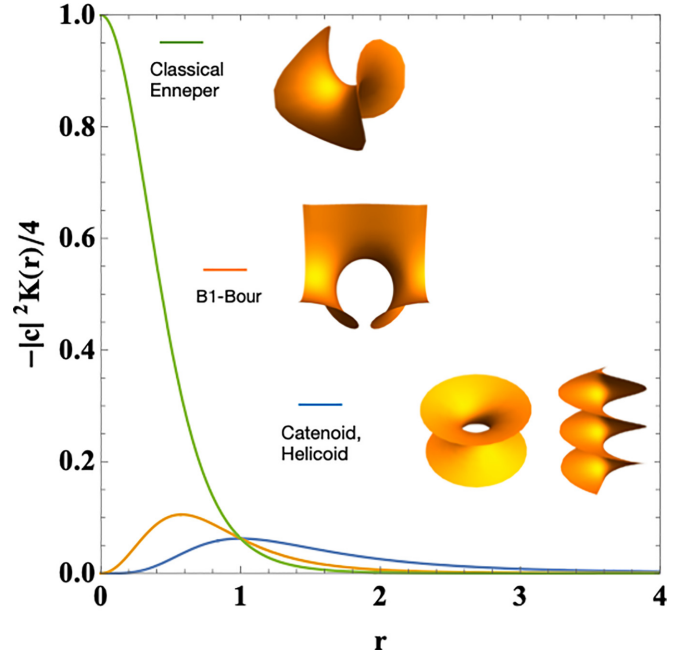


FIG. 1. Negative of Gaussian curvature [Eq. (6)] vs radial coordinate r for the cases $n = 0, 1, 2$. The figure also shows examples of minimal Bour surfaces from top to bottom: classical Enneper, B_1 -Bour, catenoid, and helicoid surfaces, respectively. All the surfaces inset have a finite value of curvature.

where we recall $c \in \mathbb{C}$ and $n \geq 0$ are parameters that give a specific Bour's surface. Now, the Gaussian curvature of these surfaces is given by

$$K(r) = -\frac{4}{|c|^2 r^{2(n-2)}(1 + r^2)^4}. \tag{6}$$

By inspection, one can see that the Gaussian curvature is finite for $r \in \mathbb{R}$ for the cases $n = 0, 1, 2$ [see Fig. 1], while for $n > 2$ all the B_n -Bour surfaces have a singular curvature at $r = 0$. In addition, since Gaussian curvature has units of the inverse square of the length $|c|$, it gives a natural length unit for a Bour surface. Note that the catenoid and helicoid have the same Gaussian curvature since these surfaces are isometric. In addition, denoting $dA = \sqrt{g}drd\theta$ the area element, let us note that the total curvature of each Bour surface Σ has the same value, that is, $\int_{\Sigma} dA K = -4\pi$; however, this does not mean that they have the same topology, for instance, the Enneper surface is simply connected but catenoid is not [60].

III. DIRAC FIELD ON THE CURVED SPACE-TIME $\mathbb{M} = \mathbb{R} \times \Sigma$

This section introduces the Dirac model on a space-time geometry with the global structure $\mathbb{M} = \mathbb{R} \times \Sigma$, where Σ is a minimal surface. Later, Σ is specified as a specific member of the Bour minimal surface family.

A. Dirac model with an artificial SU(2) gauge field on the material curved space-time

The starting point is the Dirac equation $i\underline{\gamma}^\alpha \nabla_\alpha \psi = 0$, defined on a 2 + 1 space-time \mathbb{M} , where $\underline{\gamma}^\alpha(x) = \gamma^A e_A^\alpha(x)$ for

$x \in \mathbb{M}$, where e_A^α are the vielbeins introduced in the previous section and γ^A being the Dirac matrices that satisfy the Clifford algebra

$$\{\gamma^A, \gamma^B\} = 2\eta^{AB}\mathbb{1}, \quad (7)$$

where γ^A have range 2 and $\mathbb{1}$ is the unit diagonal matrix. A suitable representation of the Dirac matrices in $2+1$ space-time dimension that satisfy the Clifford algebra Eq. (7) is given by the matrices $\gamma^0 = -i\sigma_3$, $\gamma^1\gamma^0 = \sigma_1$ and $\gamma^2\gamma^0 = \sigma_2$, where σ_i , are the standard Pauli matrices, with $i = 1, 2, 3$. In addition, ∇_α are the covariant derivative for the spinor representation of the Lorentz group $SO(2, 1)$ acting on the Dirac spinors as $\nabla_\alpha\psi$, where $\nabla_\alpha = \partial_\alpha + \Omega_\alpha$, $\Omega_\alpha = \frac{1}{8}\omega_\alpha^{AB}[\gamma_A, \gamma_B]$ being the spin connection, and ω_α^{AB} are the components of the Maurer-Cartan one-form connection defined in the previous section.

To introduce the Dirac model on the curved material, let us remark that on the curved sheet of graphene, two Dirac fields are presented, Ψ_\uparrow and Ψ_\downarrow , in a $SU(2)$ color doublet

$$\chi = \begin{pmatrix} \Psi_\uparrow \\ \Psi_\downarrow \end{pmatrix} \quad (8)$$

to consider valley degrees of freedom. Dirac spinors Ψ_\uparrow and Ψ_\downarrow contribute equally whenever the valley symmetry has not been broken. Thus, strictly speaking, the propagation of the electronic degrees of freedom is given by

$$i\Gamma^\mu\nabla_\mu\chi = 0, \quad (9)$$

where the Dirac matrices now are $\Gamma^\mu = \gamma^\mu \otimes \mathbb{1}$, and the spinorial covariant derivative $\nabla_\mu = \mathbb{1} \otimes \mathbb{1}\partial_\mu + \Omega_\mu \otimes \mathbb{1}$ [61]. Furthermore, for the nanostructured material to preserve the topology of a minimal surface, it is necessary to insert heptagonal rings [14]; this is because this class of surfaces has negative Gaussian curvature at each point. Although our work does not contemplate an analysis at the lattice level, as does the tight-binding model, it is known that such intrusions are considered topological defects, which modify the energy spectrum and the number of states [62].

At the level of the continuous model, the topological defects manifest as non-Abelian magnetic fluxes that go out transversally to the surface through the heptagonal incisions [18,35,63,64]. Thus, we ask whether this non-Abelian gauge field influences the Nöether current used below for the transmittance analysis. The Dirac field coupled with a non-Abelian gauge field is considered to answer this question,

$$i\Gamma^\mu(\nabla_\mu - i\mathbb{A}_\mu)\chi = 0, \quad (10)$$

where \mathbb{A}_μ is the non-Abelian gauge field taking values in the Lie algebra of $SU(2)$, which strictly must be written as $\mathbb{1} \otimes \mathbb{A}_\mu$, and χ turns out to be a $SU(2)$ color doublet that contains the two-component of the Dirac spinor mentioned above. In the continuum limit, we consider the approximation that the field is zero in the neighborhood of a finite flux traversing a section with effective area zero, thus the artificial non-Abelian gauge field is considered as a pure gauge field [64]

$$\mathbb{A}_\mu(x) = iU^{-1}(x)\partial_\mu U(x), \quad (11)$$

where $U(x)$ is a local element of the group $SU(2)$. Note that the strength tensor $\mathbb{F}_{\mu\nu} = \nabla_\mu\mathbb{A}_\nu - \nabla_\nu\mathbb{A}_\mu - i[\mathbb{A}_\mu, \mathbb{A}_\nu]$ is locally zero for the gauge field Eq. (11), but the flux is different

than zero to take into account the topological defects. Next, we choose a coordinate chart and specific gauge field to approach this problem.

B. Polar coordinates and the gauge field on $\mathbb{M} = \mathbb{R} \times \Sigma$

The metric of the space-time $\mathbb{R} \times \Sigma$ using polar coordinates is written through the square of the line element as follows:

$$ds^2 = -v_F^2 dt^2 + \Lambda^2(r, \theta)(dr^2 + r^2 d\theta^2). \quad (12)$$

The local indices, in this case, can be split as $\alpha = t, r, \theta$. From the metric Eq. (12), one can easily read $\hat{\theta}^0 = v_F dt$, $\hat{\theta}^1 = \Lambda dr$ and $\hat{\theta}^2 = \Lambda r d\theta$, from where one can extract the components of the vielbeins e_μ^A [65]. Also, recall that once $\hat{\theta}^A$ have been chosen, the gauge associated with the Lorentz invariance is fixed. Now, from the Maurer-Cartan Eq. (1) and the torsionless condition, one can obtain $d\hat{\theta}^0 = 0$, and

$$d\hat{\theta}^1 + \frac{\Lambda_\theta}{\Lambda^2 r} \hat{\theta}^1 \wedge \hat{\theta}^2 = 0, \quad (13)$$

$$d\hat{\theta}^2 + \frac{(\Lambda r)_r}{\Lambda^2 r} \hat{\theta}^2 \wedge \hat{\theta}^1 = 0, \quad (14)$$

where $(X)_r \equiv \partial_r X$. Now, from Eq. (13) one can deduce $\omega_0^1 = 0$ and $\omega_2^1 = \frac{\Lambda_\theta}{\Lambda^2 r} \hat{\theta}^1 + X \hat{\theta}^2$ for some local function X , whereas from Eq. (14) one can deduce that $\omega_0^2 = 0$ and $\omega_1^2 = \frac{(\Lambda r)_r}{\Lambda^2 r} \hat{\theta}^2 + \tilde{X} \hat{\theta}^1$. Now, we use the metric condition, $\omega^{AB} = -\omega^{BA}$, thus one can determine X and \tilde{X} , turning that the only nonzero components of the connection one-form are

$$\omega^{12} = -\omega^{21} = \frac{\Lambda_\theta}{\Lambda^2 r} \hat{\theta}^1 - \frac{(\Lambda r)_r}{\Lambda^2 r} \hat{\theta}^2. \quad (15)$$

These components expressed in local coordinates are given by $\omega_r^{12} = -\omega_r^{21} = \frac{1}{r} \partial_\theta \log \Lambda$ and $\omega_\theta^{12} = -\omega_\theta^{21} = -\frac{1}{\Lambda} \partial_r(\Lambda r)$. Consequently, the spin connection Ω_α is given simply by $\Omega_t = 0$, $\Omega_r = \frac{i}{2} \partial_\theta(\log \Lambda) \sigma_3$, and $\Omega_\theta = -\frac{i}{2} \frac{1}{\Lambda} \partial_r(\Lambda r) \sigma_3$.

The above coordinates (r, θ) are particularly useful for the Dirac model since the conformal factor Λ for the Bour's minimal surface family depends just on the coordinate r . In this case, due to the polar symmetry, the non-Abelian gauge field must be of the form $\mathbb{A}_\theta = \frac{\varphi}{2\pi} \tau_2$, $\mathbb{A}_t = \mathbb{A}_r = 0$, as suggested in Refs. [62,63], where τ_2 is the second Pauli matrix in the space of the two Dirac points. This field can be written like the previous expression Eq. (11) using the group element $U = e^{-i\theta \frac{\varphi}{2\pi} \tau_2}$.

Now we use all this information to write an explicit expression for the Dirac Eq. (10) in polar coordinates. Denoting the $2+1$ doublet Dirac spinor by χ and now performing the transformation $\chi = r^{-\frac{1}{2}} \Lambda^{-\frac{1}{2}} \Phi$, we can show that the Dirac equation can be written as

$$i\hbar\partial_t\Phi = -i\frac{\hbar v_F}{\Lambda} \left(\sigma_1 \partial_r \Phi + \frac{1}{r} \sigma_2 \left(\partial_\theta - i \frac{\varphi}{2\pi} \tau_2 \right) \Phi \right). \quad (16)$$

Following the same strategy as Ref. [63], i.e., by passing to the basis of eigenvectors of τ_2 , the above equation can be written

as the two Dirac equations

$$i\hbar\partial_t\Phi^\tau = -i\frac{\hbar v_F}{\Lambda}\left(\sigma_1\partial_r\Phi^\tau + \frac{1}{r}\sigma_2\left(\partial_\theta - i\frac{\tau\varphi}{2\pi}\right)\Phi^\tau\right), \quad (17)$$

where $\tau = \pm$ is the valley index and the eigenvalues of τ_2 . As we can appreciate in Eq. (17), the topological defects are taken into account by introducing an effective non-Abelian gauge flux φ in two Dirac equations. Since, in the present paper, we lack specific lattice geometry, one cannot infer a value for the artificial flux φ as it is performed in previous works [62,63]. However, according to Ref. [64], the value of each individual flux is classified in two forms $\pm\frac{\pi}{2}$ and $\pm\frac{\pi}{6}$, depending on the disposition of the defects in the lattice; if one has N heptagons intrusions, the value of the effective fluxes in each case correspond to $\frac{\varphi}{2\pi} = \pm\frac{N}{4}$ and $\frac{\varphi}{2\pi} = \pm\frac{N}{12}$. Since the lattice geometry of Bour surfaces is presently unknown, we will utilize these values as working examples for the time being and defer the construction of particular lattices to future research.

IV. GEOMETRY-INDUCED POTENTIAL AND ASYMPTOTIC STATES ON THE BOUR'S MINIMAL SURFACES FAMILY

This section determines the geometry-induced potential and the Dirac asymptotic states on the Bour's minimal surface. These states are defined as the solutions of the Dirac equation for $r \rightarrow \infty$.

A. Dirac fermions under effective potential

Our starting point is the Dirac equation on polar coordinates deduced above Eq. (17), where the conformal factor $\Lambda(r)$ is given just by Eq. (5). Since the conformal factor depends on just one of the coordinates, one can make a further change of variables using the transformation

$$x_n(r) = \int \Lambda(r)dr = |c|\left[\frac{r^{n-1}}{n-1} + \frac{r^{n+1}}{n+1}\right] \quad (18)$$

for $n \neq 1$, while for $n = 1$ the appropriate change of variable is $x_1(r) = |c|(\log r + \frac{1}{2}r^2)$. One can verify that these transformations are injective maps; thus, one can guarantee the existence of their corresponding inverse functions $r = r(x)$, where x would be defined in an appropriate domain \mathcal{D}_x . Using this variable, each Dirac equation from Eq. (17) can be simplified as

$$i\hbar\partial_t\Phi^\tau = v_F\sigma_1\hat{p}_x\Phi^\tau + v_F\sigma_2V(x)\hat{J}_{\theta,\tau}\Phi^\tau, \quad (19)$$

where $\hat{p}_x = -i\hbar\partial_x$ is a linear momentum operator and $\hat{J}_{\theta,\tau} = \hat{\ell}_\theta + \frac{\tau\varphi}{2\pi}\hbar$ is a total angular momentum, being $\hat{\ell}_\theta = -i\hbar\partial_\theta$ the two-dimensional angular momentum operator and $\tau\frac{\varphi}{2\pi}\hbar$ a valley pseudospin. Noticeably, the second term of this equation can be interpreted as an effective potential; although this term comes entirely from the intrinsic geometry of the surface, this potential is geometry induced. The effective potential is given by

$$V(x) = \frac{1}{r(x)\Lambda(r(x))}. \quad (20)$$

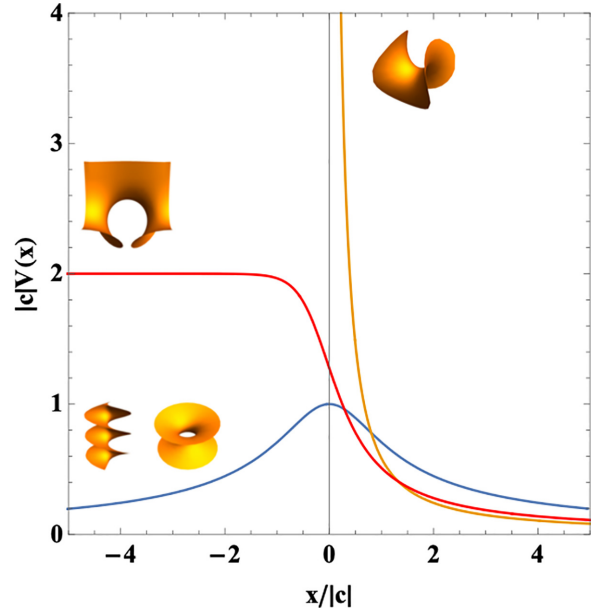


FIG. 2. Effective potential [Eq. (20)] vs coordinate x Eq. (18) for the classical Enneper ($n = 2$), B_1 -Bour, $n = 1$, and catenoid (helicoid) ($n = 0$).

This potential generalizes the effective potential found in Ref. [53] for the helicoid.

Let us note that for those cases with $n \geq 2$, such as the classical Enneper surface, the domain of the variable x is \mathbb{R}^+ [see Eq. (18)]. Thus, it is useful to define an extension to the whole reals defining $U(x) = V(x)$ for $x \geq 0$ and $U(x) = V(-x)$ for $x \leq 0$ as an extension for $x \in \mathbb{R}$. This construction makes the potential symmetric, and the Dirac equation for this extension turns out to be $i\hbar\partial_t\Phi^\tau = v_F\sigma_1\hat{p}_x\Phi^\tau + v_F\sigma_2U(x)\hat{J}_{\theta,\tau}\Phi^\tau$, which reduces to Eq. (19) for $x \geq 0$.

Now, we deduce the main characteristics of the effective potential $V(x)$. Using the conformal factor Eq. (5) and the change of variable $x(r)$, it can be shown that near $x \approx 0$ for the catenoid (or helicoid) surface with $n = 0$, the potential is $V(x) \approx c$, where c is a positive constant; for B_1 -Bour surface $n = 1$, the potential is linear $V(x) \simeq mx + b$, with a negative slope m and a positive y -intercept b ; and for any Bour surface with $n > 1$, the effective potential behaves as $V(x) = c/((n-1)x)$ for some positive constant c . Therefore, the potential $V(x)$ is a scattering potential. Furthermore, we are interested in the states far away from the center $x = 0$ to use them as initial states propagating along the surface. Additionally, one can verify that the effective potential, $V(x)$, vanishes for $x \rightarrow \infty$ for all $n \geq 0$. Figure 2 plots the geometry-induced potential for the first three cases $n = 0, 1, 2$.

a. Example B_0 (catenoid/helicoid). Let us note that, for example, in the case of the catenoid (or helicoid) $n = 0$ and $|c| = R_0/2$, one has $x = \frac{R_0}{2}(r - r^{-1})$, where the domain is the whole \mathbb{R} and recall R_0 is the radius of the neck of the catenoid. Using the expression for the conformal factor Eq. (5) and the generalized effective potential Eq. (20), it is straightforward to show that $V(x) = 1/\sqrt{x^2 + R_0^2}$, which satisfies the qualitative characteristics deduced above. Note that this effective potential is the same found in Ref. [53].

b. Example (B_1 -Bour surface). Let us note that, for example, in the case of B_1 -Bour surface $n = 1$ and choosing $c = 1$, one has $x = \log r + \frac{1}{2}r^2$, where the domain is the whole \mathbb{R} . One can express r in terms of x using the principal value of the Lambert W function $r^2 = W(e^{2x})$. Using the expression for the conformal factor Eq. (5) and the generalized effective potential Eq. (20), it is straightforward to show that $V(x) = 1/(1 + W(e^{2x}))$, which satisfies the qualitative characteristics deduced above.

c. Example B_2 (Enneper surface). Now, for the Enneper classical surface $n = 2$ using $c = 1$, one has

$$x = r + \frac{r^3}{3}. \quad (21)$$

Let us note that contrary to the previous examples, in this case, the domain of this variable $x \in \mathbb{R}^+$. Using the expression for the conformal factor Eq. (5) and the generalized effective potential Eq. (20) is $V(x) = 1/(r(x) + r^3(x))$, thus one needs to find the positive root of a third-order polynomial Eq. (21). The effective potential in terms of x is given explicitly by

$$V(x) = \frac{1}{3x + 2^{\frac{2}{3}}(R_-^{\frac{1}{3}}(x) - R_+^{\frac{1}{3}}(x))}, \quad (22)$$

where $R_{\pm}(x) = \sqrt{9x^2 + 4} \pm 3x$. Note that series expansion of $R_{\pm}^{\frac{1}{3}}(x)$ around $x \simeq 0$ is $R_{\pm}^{\frac{1}{3}}(x) \simeq 2^{\frac{1}{3}} \pm 2^{-\frac{2}{3}}x$. Thus, the effective potential near $x = 0$ behaves similarly to a Coulombic-type potential, $V(x) \simeq \frac{1}{x}$, while it is clear that for large values of x , that is for $x \rightarrow \infty$ the potential $V(x)$ vanishes as was shown qualitatively above.

B. Qualitative analysis of quantum states

An alternative way to qualitatively understand the nature of the states consists of decoupling Eq. (19) into two Schrödinger-type equations as was done for the helicoid case in Ref. [53]. Indeed, by squaring the operators on each side of Eq. (19), it is not so difficult to obtain

$$-\hbar^2 \partial_t^2 \Phi = v_F^2 (\hat{p}_x^2 + \hat{J}_\theta^2 V^2(x) + \sigma_3 \hbar \hat{J}_\theta V'(x)) \Phi, \quad (23)$$

where we are ignoring the notation \pm for the sake of simplicity and $V'(x) = \frac{d}{dx} V(x)$.

Now, writing the stationary states in the form $\Phi = e^{i\frac{Et}{\hbar} + im\theta} U(x)$, it is straightforward to obtain the time-independent Schrödinger-type equation

$$\left[-\frac{d^2}{dx^2} + V_{\text{eff}}^{m,\alpha}(x) \right] U_\alpha(x) = \epsilon U_\alpha(x) \quad (24)$$

for each spinorial component $U_\alpha(x)$ with $\alpha = \pm$ for the upper and lower spinorial components, respectively, where

$$V_{\text{eff}}^{m,\alpha}(x) = m_\tau^2 V^2(x) + \alpha m_\tau V'(x), \quad (25)$$

with $m_\tau = m + \frac{\tau\varphi}{2\pi}$ and $\epsilon = (E/(\hbar v_F))^2$. Let us first note that this potential vanishes for those cases when $m_\tau = 0$; this happens when quantum number m turns out to be $m = \frac{\varphi}{2\pi}$ or $m = -\frac{\varphi}{2\pi}$; this case describes the propagation of a Dirac wave in one valley without obstacles, while the Dirac wave in the other valley encounters some resistance.

The potential Eq. (25) is the same obtained in the study of a helical nanoribbon performed in Ref. [53] when we

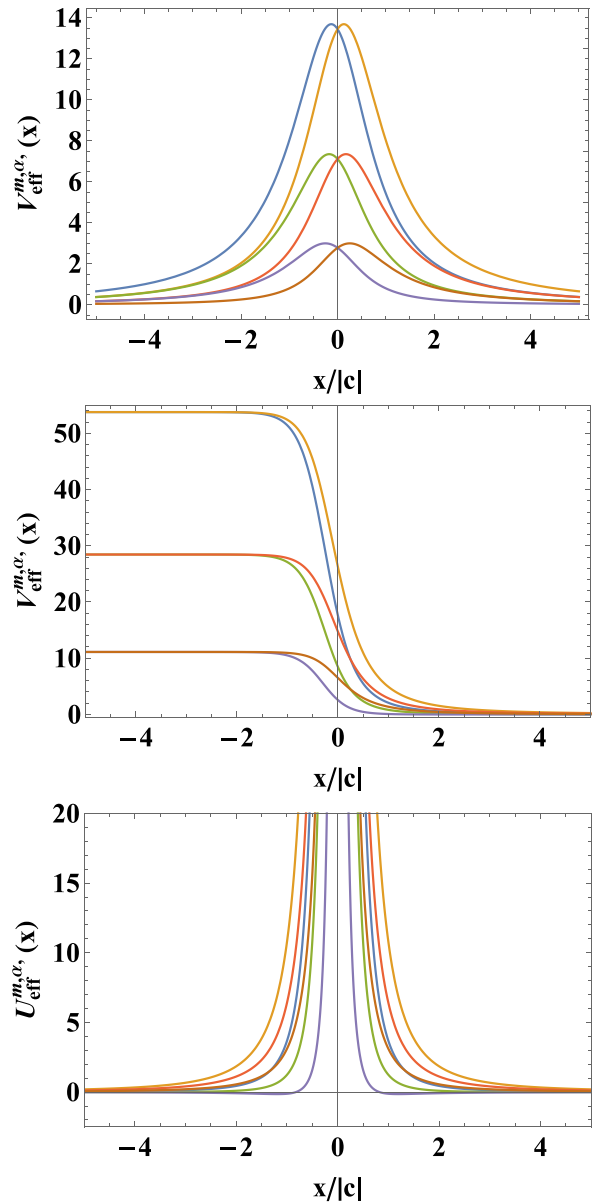


FIG. 3. Effective potential [Eq. (25)] vs coordinate x . Top for the catenoid (helicoid) ($n = 0$), middle for the B_1 -Bour surface, $n = 1$, and down for the classical Enneper ($n = 2$). Each effective potential is plotted for each case $m \in \{-1, 0, 1\}$, $\alpha = \pm$ with an effective gauge flux $\frac{\varphi}{2\pi} = 8/3$.

substitute $V(x)$ in the case of the catenoid (example B_0 above) and take zero topological flux $\varphi = 0$; this means that similar conclusions obtained in Ref. [53] are obtained in the case of the catenoid, at least near the catenoid neck. In Fig. 3, we present the behavior of $V_{\text{eff}}^{m,\alpha}(x)$ for the catenoid, B_1 -Bour, and Enneper surface for the working example of a flux $\frac{\varphi}{2\pi} = \frac{N}{12} = 8/3$. For the catenoid surface and B_1 -Bour, the potential for each m is similar to a potential barrier. In contrast, in the case of Enneper, the potential is a potential barrier except for the cases $m = 1$, where there is a region where bound states could exist. However, note that this region is required for $\epsilon < 0$, which means that E is imaginary, so we associate these states with quasibound states. Remark that the structure of the effective potential

$V_{\text{eff}}^{m,\alpha}(x)$ does not change qualitatively from other values of the flux φ .

C. Asymptotic Dirac states on the Bour's minimal surfaces

The previous analysis allows us to justify that for the asymptotic states, the second term of Eq. (19) can be neglected. Thus, the equation reduces to a 1 + 1-Dirac equation $i\partial_t \Phi^\tau = v_F \sigma_1 \hat{p}_x \Phi^\tau$. For the solutions of this equation, we propose the spinor solution as $\Phi^\tau(x, \theta, t) = e^{ikx - i\frac{Et}{\hbar}} f(\theta)v$, where the function $f(\theta)$ is an arbitrary nonzero periodic function in the azimuthal angle θ , and v is a vector that acquires the pseudospin character of the spinor. These solutions are independent of the valley index τ . By imposing the one-dimensional Dirac equation, the dispersion relation turns out to be $E = \pm \hbar v_F |k|$, and v satisfies the equation $\hat{h}v = \pm \frac{1}{2}v$, where \pm refers to a positive and energy Dirac states, where

$$\hat{h} = \frac{1}{2} \sigma_1 \frac{k}{|k|} \quad (26)$$

is the one-dimensional analog of the helicity operator. For positive energy value, the pseudospin states are given by v_\uparrow (v_\downarrow) for positive (negative) helicity $k > 0$ ($k < 0$), whereas for negative energy values the pseudospin states are interchanged themselves, $v_\uparrow \rightarrow v_\downarrow$, where the normalized states $\{v_\uparrow, v_\downarrow\}$ are given by

$$v_\uparrow = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} \quad \text{and} \quad v_\downarrow = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}. \quad (27)$$

For positive energy values, one has the following two independent solutions: $\Phi_{+,+}(x, \theta, t) = e^{ikx - i\frac{Et}{\hbar}} f(\theta)v_\uparrow$ and $\Phi_{+,-}(x, \theta, t) = e^{ikx - i\frac{Et}{\hbar}} f(\theta)v_\downarrow$ for positive and negative helicity, $k > 0$ and $k < 0$, respectively. Similarly, for negative values of energy, one has $\Phi_{-,+}(x, \theta, t) = e^{ikx + i\frac{Et}{\hbar}} f(\theta)v_\downarrow$ and $\Phi_{-,-}(x, \theta, t) = e^{ikx + i\frac{Et}{\hbar}} f(\theta)v_\uparrow$ for positive and negative helicity, $k > 0$ and $k < 0$, respectively. These four states can be cast together as follows: $\Phi_{\mu,\sigma}^\tau(x, \theta, t) = \Phi_{\mu,\sigma}(x, \theta) e^{-i\mu \frac{Et}{\hbar}}$, being

$$\Phi_{\mu,\sigma}(x, \theta) = e^{i\sigma|k|x} f(\theta)v_{\mu,\sigma}, \quad (28)$$

where we have introduced a mnemonic rule for $\mu \cdot \sigma$ as $+\cdot + = \uparrow$, $-\cdot + = \downarrow$, $+\cdot - = \downarrow$ and $-\cdot - = \uparrow$, where $\mu = \text{sgn}(E)$. Finally, let us recall that the transformation performed above, $\Psi = \Phi/\sqrt{r\Lambda}$, thus the asymptotic Dirac state far away from the scattered center is given by

$$\Psi_{\mu,\sigma}^\tau(x, \theta, t) = \sqrt{V(x)} e^{i\sigma|k|x - i\mu \frac{Et}{\hbar}} f(\theta)v_{\mu,\sigma}, \quad (29)$$

which vanishes for $x \rightarrow \infty$. In addition, as a consequence of the periodicity of the function $f(\theta) = f(\theta + 2\pi)$, one can write the following series representation: $f(\theta) = \sum_{m \in \mathbb{Z}} f_m e^{im\theta}$.

V. SCATTERING ANALOG ON THE BOUR'S SURFACES

A. Outscattering states by Lippmann-Schwinger equation

In this section, we introduce the LS equation [66,67] to study how the states propagate along the surface considered. In particular, we are interested in describing the manner in

which the initial states, found above, are scattered due to the effective potential $V(x)$. Let us consider the Hamiltonian $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}$ split between a free Hamiltonian \hat{H}_0 and a perturbed potential \hat{V} . Now, the LS equation is given by

$$|\Phi\rangle = |\Phi_{\text{in}}\rangle + \frac{1}{E - \hat{H}_0 + i\epsilon} \hat{V} |\Phi\rangle, \quad (30)$$

where $|\Phi_{\text{in}}\rangle$ is the initial state and $|\Phi\rangle$ is the out scattering state. Note that, in general, we are considering that \hat{H}_0 and \hat{V} are differential matrix operators acting on spinors. Thus, the states $\{|\Phi\rangle\}$ acquire spinorial components.

The Born approximation is obtained by substituting $|\Phi_{\text{in}}\rangle$ instead of $|\Phi\rangle$ in the second term of the LS Eq. (30). To go further to higher-order approximation, it is standard to introduce the transition operator \hat{T} defined using the equation $\hat{T}|\Phi_{\text{in}}\rangle = \hat{V}|\Phi\rangle$. In fact, multiplying the LS equation by \hat{V} , one arrives at the well-known self-consistent recursive operator equation for the transition operator \hat{T} :

$$\hat{T} = \hat{V} + \hat{V} \frac{1}{E - \hat{H}_0 + i\epsilon} \hat{T}. \quad (31)$$

A series solution for \hat{T} can be gotten using this equation through a usual iterative procedure

$$\hat{T} = \hat{V} + \hat{V} \frac{1}{E - \hat{H}_0 + i\epsilon} \hat{V} + \hat{V} \frac{1}{E - \hat{H}_0 + i\epsilon} \hat{V} \frac{1}{E - \hat{H}_0 + i\epsilon} \hat{V} + \dots, \quad (32)$$

where the first approximation $\hat{T} \simeq \hat{V}$ corresponds to the so-called Born approximation.

To determine the out scattering states, one can follow two common procedures that are to project $\{|\Phi\rangle\}$ along space states $\{|\mathbf{x}\rangle\}$ or momentum states $\{|\mathbf{p}\rangle\}$. For the projection along the space states, one obtains the spinorial wave function $\Psi(\mathbf{x}) = \langle \mathbf{x} | \Phi \rangle$, where $\mathbf{x} = (x_1, x_2)$ are certain coordinates associated with a local patch on the surface. Thus, using the transition operator, the LS equation can be rewritten as

$$\Phi(\mathbf{x}) = \Phi_{\text{in}}(\mathbf{x}) + \int_{\mathcal{D}} d^2 \mathbf{x}' \mathbb{G}(\mathbf{x}, \mathbf{x}') \langle \mathbf{x}' | \hat{T} | \Phi_{\text{in}} \rangle, \quad (33)$$

where the Green's function satisfies the Green's equation defined by

$$(E - \hat{H}_0) \mathbb{G}(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = \mathbb{1} \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}'). \quad (34)$$

Now, when we project the outscattering states along the momentum states, one obtains the spinorial wave function in the momentum space, which we have abusively written with the same notation $\Phi(\mathbf{p}) = \langle \mathbf{p} | \Phi \rangle$. Assuming that \hat{H}_0 is an operator that depends exclusively on the momentum operator, thus the LS equation can be written as

$$\Phi(\mathbf{p}) = \Phi_{\text{in}}(\mathbf{p}) + \frac{1}{E - H_0(\mathbf{p}) + i\epsilon} \langle \mathbf{p} | \hat{T} | \Phi_{\text{in}} \rangle, \quad (35)$$

where $H_0(\mathbf{p})$ is the matrix free Hamiltonian evaluated at the momentum value \mathbf{p} .

B. Out scattering states on the Bour surfaces

In this section, we study the electronic states on the Bour surfaces starting from Eq. (19). Noticeably, the second term

of this equation can be thought of as a barrier potential. This potential energy is crucial in the behavior of the Dirac particle states on the Bour surface. Now, to implement the LS Eq. (30) we identify the free Hamiltonian $\hat{H}_0 = v_F \sigma_1 \hat{p}_x$ and the perturbed Hamiltonian by $\hat{V} = v_F \sigma_2 U(x) \hat{J}_{\theta, \tau}$, where we recall $U(x)$ as the symmetrized form of the effective potential $V(x)$. In the following, we carry out the Born and higher-order Born approximations to determine the outscattering states on the curved surface.

1. Born approximation

Now, to determine the outscattering states $\Psi(\mathbf{x})$, we consider the initial states $\Phi_{\text{in}, \sigma}(x)$ far away from the scattering center, which in our case correspond to $x \simeq 0$. In particular, the states that are considered here are $\Phi_{\text{in}}(\mathbf{x}) = \Phi_{\mu, \sigma}(x, \theta)$ found in the last section [see states given by Eq. (28)]. Since the free Hamiltonian \hat{H}_0 is independent of θ , thus the Green's function acquires the expression $\mathbb{G}(\mathbf{x}, \mathbf{x}'; E) = \mathbb{G}(x - x'; E) \delta(\theta - \theta')$, where $\mathbf{x} = (x, \theta)$. Now, the LS equation, in this case, can be written as

$$\begin{aligned} \Phi^\tau(x, \theta) &= \Phi_{\text{in}}(x, \theta) \\ &+ v_F \int_{-\infty}^{\infty} dx' \mathbb{G}(x - x'; E) U(x') \sigma_2 \hat{J}_{\theta, \tau} \Phi^\tau(x', \theta), \end{aligned} \quad (36)$$

where $\mathbb{G}(x - x'; E)$ is the Green's function for the one-dimensional operator $E - v_F \sigma_1 \hat{p}_x$, that is, a function that satisfies $(E - v_F \sigma_1 \hat{p}_x) \mathbb{G}(x - x'; E) = \delta(x - x') \mathbb{1}$. Following the standard procedure (see Appendix A), it is not difficult to show that

$$\mathbb{G}(x - x'; E) = \frac{1}{2i\hbar v_F} [\text{sgn}(E) + \text{sgn}(x - x') \sigma_1] e^{i \frac{|E|}{\hbar v_F} |x - x'|}, \quad (37)$$

where we recall that $E = \pm \hbar v_F |k|$. In the following, as a consequence of the polar geometry of the surface, the states $\Phi^\tau(x, \theta)$ are periodic in the angular variable θ . Thus, it can be written in the next expansion $\Phi^\tau(x, \theta) = \sum_{m \in \mathbb{Z}} \Phi_m(x) e^{im\theta}$. Now, using the orthonormal relation of the basis $\{e^{im\theta}\}$ one has the following integral equation for $\Phi_m^{(\mu)}(x)$, that is:

$$\begin{aligned} \Phi_m^{(\mu)}(x) &= e^{i\sigma|k|x} f_m v_{\mu, \sigma} \\ &+ \hbar v_F m_\tau \int_{-\infty}^{\infty} dx' \mathbb{G}(x - x'; E) U(x') \sigma_2 \Phi_m^{(\mu)}(x'), \end{aligned} \quad (38)$$

where we have introduced the labeled μ to distinguish the positive and energy outscattering states; also recall that $\mu = \text{sgn}(E)$. At the Born approximation, it is enough to make the substitution $\Phi_m^{(\mu)}(x')$ by $e^{i\sigma p x'} f_m v_{\mu, \sigma}$ in the second term of the last equation, where we have defined the magnitude of the momentum $|k| = p$. Let us choose an initial wave with $\sigma = -$, that is, a left wave with $k < 0$ going to the scattering center. Noticeably, after a straightforward calculation, the states are given by

$$\Phi_m^{(\mu)}(x) \simeq f_m [e^{-ipx} v_{-\mu} + m_\tau \tilde{U}(2p) e^{ipx} v_\mu], \quad (39)$$

where we have found that negative energy states with pseudospin up \uparrow propagating along the scattering center reflecting into a pseudospin down \downarrow . The amplitude of the reflection is given by $m_\tau \tilde{U}(2p)$, where \tilde{U} is the Fourier transform of the effective potential $U(x)$. To have a better understanding of this scattering phenomenon, we proceed to carry out a higher-order Born approximation in the following section.

2. Higher-order Born approximation

For the higher-order Born approximation, we found the momentum representation useful for the states. The starting point is the equation for the outscattering states Eq. (35), where the term $\langle \mathbf{p} | \hat{T} | \Phi_{\text{in}} \rangle$ is determined approximately by using the series approximation of the recursive equation for the transition operator Eq. (32), that is,

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{p} | \hat{T} | \Phi_{\text{in}} \rangle &= \langle \mathbf{p} | \hat{V} | \Phi_{\text{in}} \rangle + \langle \mathbf{p} | \hat{V} \hat{G} \hat{V} | \Phi_{\text{in}} \rangle + \dots \\ &+ \langle \mathbf{p} | \hat{V} \hat{G} \hat{V} \dots \hat{V} \hat{G} \hat{V} | \Phi_{\text{in}} \rangle + \dots, \end{aligned} \quad (40)$$

where we have defined the resolvent operator $\hat{G} := 1/(E - \hat{H}_0 + i\epsilon)$. Now, for each term of \hat{G} of the last expansion, one introduces two completeness relations in momentum space $\mathbb{1} = \sum_{\mathbf{q}} |\mathbf{q}\rangle \langle \mathbf{q}|$, where $\sum_{\mathbf{q}} = \frac{1}{2\pi} \sum_m \int \frac{dq}{2\pi}$ and $|\mathbf{q}\rangle := |q, m\rangle$. These completeness relations are introduced before and after the operator \hat{G} . Thus, one has the first term $\tau_1(p) := \langle \mathbf{p} | \hat{V} | \Phi_{\text{in}} \rangle$ and the $(n + 1)$ th term, with $n \geq 1$, has the following structure:

$$\begin{aligned} \tau_{n+1}(p) &:= \sum_{\mathbf{q}^{(1)}, \dots, \mathbf{q}^{(2n)}} \langle \mathbf{p} | \hat{V} | \mathbf{q}^{(1)} \rangle \langle \mathbf{q}^{(1)} | \hat{G} | \mathbf{q}^{(2)} \rangle \\ &\times \langle \mathbf{q}^{(2)} | \hat{V} \dots \hat{V} | \mathbf{q}^{(2n-1)} \rangle \langle \mathbf{q}^{(2n-1)} | \hat{G} | \mathbf{q}^{(2n)} \rangle \\ &\times \langle \mathbf{q}^{(2n)} | \hat{V} | \Phi_{\text{in}} \rangle. \end{aligned} \quad (41)$$

Now, one can reduce half of the integrals since for each term $\langle \mathbf{q}^{(i)} | \hat{G} | \mathbf{q}^{(j)} \rangle = \mathbb{G}(q^i) \delta_{\mathbf{q}^i, \mathbf{q}^j}$, where $\mathbb{G}(q^j) = 1/(E - H_0(\mathbf{q}) + i\epsilon)$. Thus, $(n + 1)$ - th can be simplified as follows:

$$\begin{aligned} \tau_{n+1}(p) &= \sum_{\mathbf{q}^{(1)}, \dots, \mathbf{q}^{(n)}} \langle \mathbf{p} | \hat{V} | \mathbf{q}^{(1)} \rangle \left(\prod_{\ell=1}^{n-1} \mathbb{G}(q^\ell) \langle \mathbf{q}^{(\ell)} | \hat{V} | \mathbf{q}^{(\ell+1)} \rangle \right) \\ &\times \mathbb{G}(q^{(n)}) \langle \mathbf{q}^{(n)} | \hat{V} | \Phi_{\text{in}} \rangle, \end{aligned} \quad (42)$$

where the state $|\mathbf{q}^\ell\rangle = |q^\ell, m^\ell\rangle$ for $\ell = 1, 2, \dots, n$. To simplify the last expression, it is necessary to find the following two generic expressions: (a) $\langle \mathbf{p} | \hat{V} | \mathbf{q} \rangle$ and (b) $\langle \mathbf{p} | \hat{V} | \Phi_{\text{in}} \rangle$. The momentum states are expressed by $|\mathbf{p}\rangle = |p, m\rangle$ and, similarly, $|\mathbf{q}\rangle = |q, m'\rangle$. Thus, for the terms, type (a) can be written as $\langle \mathbf{p} | \hat{V} | \mathbf{q} \rangle = (2\pi) \hbar v_F \sigma_2 m_\tau \delta_{mm'} \langle p | \hat{U}(x) | q \rangle$, where we have acted the total angular momentum operator $\hat{J}_{\theta, \tau} |m\rangle = \hbar m_\tau |m\rangle$ and introduced the orthogonal relation $\langle m | m' \rangle = 2\pi \delta_{mm'}$. Now, we introduce the completeness relation $\mathbb{1} = \int dx |x\rangle \langle x|$ and we use $\langle x | p \rangle = e^{ipx}$, thus one has

$$\langle \mathbf{p} | \hat{V} | \mathbf{q} \rangle = (2\pi) \hbar v_F \sigma_2 m_\tau \delta_{mm'} \tilde{U}(p - q); \quad (43)$$

$\tilde{U}(q) := \int dx e^{-iqx} U(x)$ being the Fourier transform of the potential. Now, for the type-(b) terms, one introduces a completeness relation in the momentum space such that $\langle \mathbf{p} | \hat{V} | \Phi_{\text{in}} \rangle = \sum_{\mathbf{q}} \langle \mathbf{p} | \hat{V} | \mathbf{q} \rangle \langle \mathbf{q} | \Phi_{\text{in}} \rangle$. Now, it is necessary to calculate the term $\Psi_{\text{in}}(\mathbf{q}) = \langle \mathbf{q} | \Phi_{\text{in}} \rangle$, which is the

Fourier transform of the initial wave $e^{i\sigma|k|x} f_m v_{\mu,\sigma}$, that is, $\Psi_{\text{in}}(\mathbf{q}) = 2\pi\delta(q - \sigma|k|) f_m v_{\mu,\sigma}$, thus one has

$$\langle \mathbf{p} | \hat{V} | \Phi_{\text{in}} \rangle = \hbar v_F \sigma_2 v_{\mu,\sigma} f_m m_\tau \tilde{U}(p - \sigma|k|). \quad (44)$$

Notice that the right-hand side of the last equation corresponds to the first term in the series Eq. (40), that is,

$$\tau_1(p) = \hbar v_F f_m(i\mu m_\tau) \tilde{U}(p + |k|) v_\mu, \quad (45)$$

where we have put $\sigma = -1$ since we have an initial left wave, and where we have used the identity $\sigma_2 v_{-\mu} = i\mu v_\mu$. Now, we introduce the terms types (a) Eq. (43) and (b) Eq. (44) in the $(n+1)$ th term $\tau_{n+1}(p)$ (42). Now, again one has to put $\sigma = -1$, and following the straightforward calculation developed in Appendix B, one is able to find

$$\tau_{n+1} = \hbar v_F f_m(i\mu m_\tau)^n m_\tau \tilde{U}(p - |k|) \tilde{U}(2|k|) |\tilde{U}(2|k|)|^{n-1} v_{-\mu} \quad (46)$$

for odd n , whereas

$$\tau_{n+1} = \hbar v_F f_m(i\mu m_\tau)^{n+1} \tilde{U}(p + |k|) |\tilde{U}(2|k|)|^n v_\mu \quad (47)$$

for even n , where $|\cdot|$ is the complex norm. In this manner, the series (40) is $\langle \mathbf{p} | \hat{T} | \Phi_{\text{in}} \rangle = \sum_{n=0}^{\infty} \tau_{n+1}(p)$. This expectation value must be introduced in the LS Eq. (35). Afterward, one needs to compute the Fourier transform to find an expression of the Dirac wave

$$\Phi_m^{\tau(\mu)}(x) = e^{-i|k|x} f_m v_{-\mu} + \sum_{n=0}^{\infty} C_{n+1}(x), \quad (48)$$

where one has still to compute the inverse Fourier transform $C_{n+1}(x) = \int \frac{dp}{2\pi} e^{ipx} \mathbb{G}(p) \tau_{n+1}(p)$. See Appendix B for detailed integral calculations. Thus, the result for $C_{n+1}(x)$ is the following, for odd integers $n = 2j + 1$:

$$C_{2j+2}(x) = (-1)^{j+1} (m_\tau^2 |\tilde{U}(2|k|)|^2)^{j+1} f_m e^{-i|k|x} v_{-\mu}, \quad (49)$$

while for even integers $n = 2j$,

$$C_{2j+1}(x) = (-1)^{j+1} m_\tau \tilde{U}(2|k|) (m_\tau^2 |\tilde{U}(2|k|)|^2)^j f_m e^{i|k|x} v_\mu \quad (50)$$

for $j \in \mathbb{N} \cup \{0\}$. Now, after inserting these expressions in Eq. (48), it is noticeable that each of the factors appearing in front of the ongoing ($e^{-i|k|x}$) and incoming ($e^{i|k|x}$) terms can be cast as a geometric series that can be summed up as $\sum_{\ell=0}^{\infty} (-1)^\ell a^\ell (m_\tau, k) = 1/(1 + a(m_\tau, k))$ while $a(m_\tau, k) < 1$, where $a(m_\tau, k) = m_\tau^2 |\tilde{U}(2|k|)|^2$. Thus, the final expression for the Dirac wave is

$$\Phi_m^{\tau(\mu)}(x) = f_m [\mathcal{F}(m_\tau, k) e^{-i|k|x} v_{-\mu} + \mathcal{G}(m_\tau, k) e^{i|k|x} v_\mu], \quad (51)$$

where the coefficients $\mathcal{F}(m_\tau, k)$ and $\mathcal{G}(m_\tau, k)$ are given by

$$\mathcal{F}(m_\tau, k) = \frac{1}{1 + m_\tau^2 |\tilde{U}(2|k|)|^2}, \quad (52)$$

$$\mathcal{G}(m_\tau, k) = m_\tau \tilde{U}(2|k|) \mathcal{F}(m_\tau, k). \quad (53)$$

The Born approximation Eq. (39) is recovered when $\mathcal{F}(m_\tau, k) \approx 1$. This is expected to be achieved for large values of momenta $|k|$.

Since one can prepare an initial Dirac wave with values of m and k such that $a(m, k) \geq 1$, here we consider an analytical continuation of the geometric series to take into account values of m and k under the last condition. This analytical continuation means that the factors $\mathcal{F}(m, k)$ and $\mathcal{G}(m, k)$ have the same function for values of (m, k) in a region where $a(m, k) \geq 1$.

VI. TRANSMISSION OF THE DIRAC WAVES THROUGH THE GEOMETRY OF A BOUR SURFACE

In this section, using the LS formalism developed above, we carry out a transmission analysis of the Dirac waves on the geometry of Bour surfaces, considering the propagation, taking into account each valley.

A. Nöether current J^μ on the curved nanostructured material

We introduce the Nöether current J^μ of the Dirac Eq. (10) as the probability current density. This quantity is introduced to study how the initial Dirac wave is propagated along the surface. In particular, we can determine the transmission and reflection coefficients using the current J^μ . This conserved quantity is given by [57]

$$J^\mu = \bar{\chi} \Gamma^\mu \chi, \quad (54)$$

even in the presence of a gauge field \mathbb{A}_μ , where $\bar{\chi} = \chi^\dagger \Gamma^0$. Considering both Dirac fields, the Nöether current is given by [57]

$$J^\mu = \sum_{\tau=\pm} \bar{\Psi}^\tau \underline{\gamma}^\mu \Psi^\tau, \quad (55)$$

where $\bar{\Psi}^\tau = \Psi^{\tau\dagger} \underline{\gamma}^0$. Also, we recall that $\underline{\gamma}^\mu$ are given in terms of the vielbeins and the Dirac matrices γ^A introduced above in Sec. III A. Also, recall that $\Psi^\tau(x) = r^{-1/2} \Lambda^{-1/2} \Phi^\tau$, where Λ is the conformal factor introduced above. The zero component of the current, $J^0(x)$, allows us to determine the probability density function, whereas the spatial components of the current allow us to determine how the Dirac wave propagates through the space geometry, that is, using the spatial components one can define the reflection coefficient as

$$\mathcal{R} = \left| \frac{J_{\text{ref}}^a n_a}{J_{\text{inc}}^b n_b} \right| \quad (56)$$

and the transmission coefficient by its complement $\mathcal{T} = 1 - \mathcal{R}$, where \mathbf{n} is a tangent vector on the surface that is normal to a curve γ embedded on the surface. In particular, for the Bour surface, we choose γ to be an r -constant curve; thus \mathbf{n} is a tangent vector along the θ direction. See Fig. 4 to see level curves with the r constant and θ constant on the catenoid, B_1 , and Enneper surfaces.

In the following, we focus on determining the general expressions for the probability density J^0 , transmission coefficient \mathcal{T} , reflection coefficient \mathcal{R} , and conductance G for the Bour surfaces, where particular emphasis is made on the catenoid/helicoid, B_1 -Bour, and classical Enneper surface.

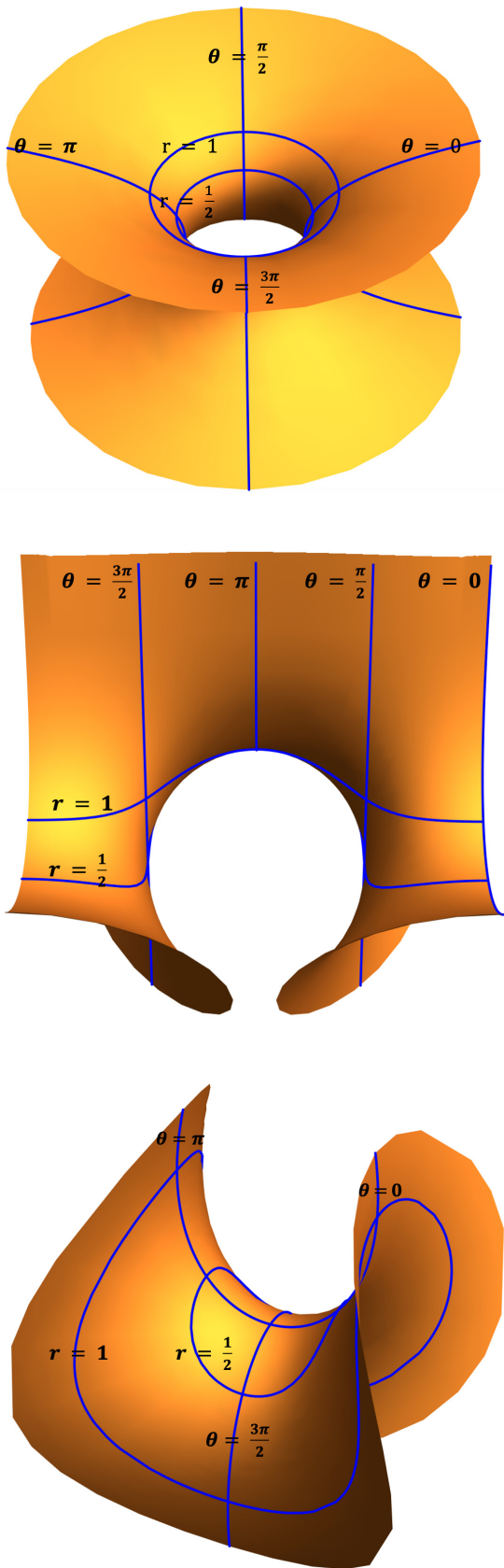


FIG. 4. Catenoid, B_1 -Bour, and classical Enneper minimal surface, from the top to the bottom, drawn with the parametrizations (D1), (D4), and (D3). Each of the surfaces includes examples of level curves with r and θ constant.

B. Probability density function J^0

Before presenting the result for the probability density function, let us obtain normalization factors \mathcal{N}_0 , for the free wave Eq. (29), and \mathcal{N} for the scattered wave Eq. (51). For this purpose, consider a large portion of the area of the surface, and let us impose the condition $\int_{\mathcal{D}} dA J^0 = 1$, where $dA = r\Lambda(r)drd\theta$ is the area element in the surface. This condition guarantees that a Dirac fermion is surely, at some point, $(r, \theta) \in \mathcal{D} = [0, L] \times [0, 2\pi]$, from the domain \mathcal{D} .

Now, the zero component of the Nöther current is the probability density function given for our particular space-time geometry [see Eq. (12)] by $J^0(r) = \frac{1}{v_F} \sum_{\tau=\pm} \Psi_m^{\tau\dagger(\mu)} \Psi_m^{\tau(\mu)}$. Thus, for the free initial wave one has the density $J^0(r) = \frac{2\mathcal{N}_0^2 |f_m|^2}{v_F r \Lambda}$, thus the normalization factor is easily obtained as $\mathcal{N}_0 = (v_F / (2\pi L))^{\frac{1}{2}} / \sqrt{2} |f_m|$, while for the scattered wave $J^0(r) = \frac{\mathcal{N}^2 |f_m|^2}{v_F r \Lambda} \sum_{\tau=\pm} \mathcal{F}(m_\tau, k)$ the normalization factor is given by $\mathcal{N} = \mathcal{N}_0 / \sqrt{\sum_{\tau=\pm} \mathcal{F}(m_\tau, k)}$. Now, the probability density function is given for both waves the probability density by the expression

$$J^0(r, \theta) = \frac{1}{2\pi L r \Lambda(r)}, \quad (57)$$

which means that it is most probable to find Dirac particles near the scattering center on the Bour surface. It is noteworthy to mention that the scattering point ($x \simeq 0$) corresponds to the point where the curvature attains its maximum value [see Fig. 1)].

C. Transmittance and conductance on the Bour geometries

Now we want to determine the reflection and the transmission coefficients. We choose γ as the r -constant curve on a Bour surface; thus, the normal vector to γ is tangent to a θ -constant curve. Notice that $J^\theta = -\frac{1}{r^2 \Lambda^2} \sum_{\tau=\pm} \Phi_m^{\tau\dagger(\mu)} \sigma_1 \Phi_m^{\tau(\mu)}$ after using $\underline{\gamma}^\theta = \gamma^2 e_1^\theta$, where the vielbein in this case is $e_1^\theta = 1/\Lambda$. Now, recalling that $\sigma_1 v_\mu = \mu v_\mu$ and $v_\mu^\dagger v_\mu = 1$, we compute the incidence current J_{inc}^θ using the initial wave $\mathcal{N}_0 e^{-i|k|x} f_m v_{-\mu}$,

$$J_{\text{inc}}^\theta = \frac{v_F \mu}{(2\pi L) r^2 \Lambda^2}, \quad (58)$$

and compute J_{ref}^θ using the reflection wave $\mathcal{N} f_m \mathcal{G}(m, k) e^{i|k|x} v_\mu$, getting

$$J_{\text{ref}}^\theta = -\frac{v_F \mu}{(2\pi L) r^2 \Lambda^2} \frac{\sum_{\tau=\pm} |\mathcal{G}(m_\tau, k)|^2}{\sum_{\tau=\pm} \mathcal{F}(m_\tau, k)}.$$

where recall that $m_\tau = m + \frac{\tau\varphi}{2\pi}$, φ being the non-Abelian flux, and $\mathcal{G}(m_\tau, k)$ and $\mathcal{F}(m_\tau, k)$ are given by Eqs. (53) and (52). Now, using the reflection coefficient definition Eq. (56), it is not difficult to get

$$\mathcal{R} = \frac{|\mathcal{G}(m_+, k)|^2 + |\mathcal{G}(m_-, k)|^2}{\mathcal{F}(m_+, k) + \mathcal{F}(m_-, k)}. \quad (59)$$

Both coefficients \mathcal{R} and \mathcal{T} can be expressed in terms of the Fourier transform $\tilde{U}(p) = \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-ipx} U(x)$, thus it is convenient to make further simplifications. Since the potential is proportional to $1/|c|$, it is convenient to perform the following

change of variable $\tilde{x} = x/|c|$, thus let us define the function

$$\mathcal{U}(\xi) = \int_{-\infty}^{\infty} d\tilde{x} e^{-i\xi\tilde{x}} |c| U(|c|\tilde{x}). \quad (60)$$

Now, instead of using the wave number k , we use the energy dispersion relation $E = \pm \hbar v_F |k|$. Also, notice that the Bour material introduces a natural scale of energy given by $E_0 = \hbar v_F / |c|$ in terms of the characteristic length, $|c|$, associated to each Bour surface. Therefore, the reflection and transmission coefficients in terms of the energy E are given for any Bour surface within the present approximation as

$$\mathcal{R}(E) = 1 - \mathcal{T}(E), \quad (61)$$

$$\mathcal{T}(E) = \frac{\frac{1+m_-^2}{1+m_+^2} |\tilde{U}(2E_*)|^2}{2 + (m_-^2 + m_+^2) |\tilde{U}(2E_*)|^2} + \frac{1+m_+^2}{1+m_-^2} \frac{|\tilde{U}(2E_*)|^2}{|\tilde{U}(2E_*)|^2}. \quad (62)$$

where $E_* = |E|/E_0$ is a dimensionless parameter. The conductance can be computed using the simple expression $G(E) = \frac{e^2}{\pi \hbar} \mathcal{T}(E)$. Notice that each Bour material with typical characteristic length $|c|$ introduces a natural scale of energy $E_0 = \hbar v_F / |c|$; for surfaces with $|c| \sim 1$ nm the characteristic scale energy is $E_0 \sim 8.27$ eV. Note that for big values of energy, that is, $|E| \gg E_0$, the above result Eqs. (61) and (62) reduces to the Born approximation since in this parameter region one has $\mathcal{R}(E) \simeq \frac{m_+^2 + m_-^2}{2} |\mathcal{U}(2E_*)|^2$ and $\mathcal{T}(E) \simeq 1 - \frac{m_+^2 + m_-^2}{2} |\mathcal{U}(2E_*)|^2$, which is the Born approximation result. In addition, in the case $|m| \gg \varphi/2\pi$ ($|m| \ll \varphi/2\pi$), the reflection and transmission are given by

$$\mathcal{R}(E) \simeq \frac{\underline{m}^2 |\mathcal{U}(2E_*)|^2}{1 + \underline{m}^2 |\mathcal{U}(2E_*)|^2}, \quad (63)$$

$$\mathcal{T}(E) \simeq \frac{1}{1 + \underline{m}^2 |\mathcal{U}(2E_*)|^2}, \quad (64)$$

where $\underline{m} = \max(|m|, \frac{\varphi}{2\pi})$. In the case $\underline{m} = |m|$, the topological defects do not affect the reflection and transmission behavior. In the opposite case, $\underline{m} = \varphi/2\pi$, topological defects dominate the reflection and transmission coefficients; in particular, they scatter out the Dirac particles such that for a large N number of defects $\mathcal{T} \propto N^{-2}$ and $\mathcal{R} \propto 1 + O(N^{-1})$, while energy E_* such that $\mathcal{U}(2E_*) \neq 0$.

Now, we still need to compute the Fourier transform of the effective potential. Conspicuously, for any Bour surface, it is useful to go back to the original radial coordinate instead of x since $dx = \Lambda(r)dr$ and the effective potential $V(r) = 1/(r\Lambda(r))$, thus the Fourier transform is

$$\mathcal{U}(\xi) = \int_0^\infty \frac{dr}{r} \exp\left[-i\xi \frac{x_n(r)}{|c|}\right], \quad (65)$$

where for each Bour surface labeled with n , $x_n(r)$ is the change of variable introduced above [see, for instance, Eq. (18) for $n \neq 1$].

1. Transmission on the catenoid/helicoid

In this case, one has $x_0(r) = |c|(r - r^{-1})$. Here, it is convenient to make the change of variable $y = \log r \in \mathbb{R}$, thus the argument of the exponential in Eq. (65) turns out to be the odd function $\sinh(y)$, meaning that the Fourier transform

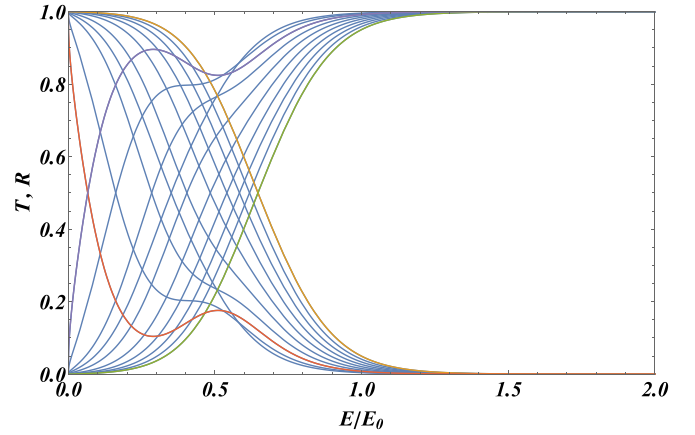


FIG. 5. Family of transmission and reflection coefficients [Eqs. (61) and (62)] versus reduced energy $E_* = E/E_0$ using the Fourier transform Eq. (66) corresponding to the catenoidal/helicoidal geometry. The set of curves was obtained for cases with $m = 1, \dots, 10$, and for the effective gauge flux $\frac{\varphi}{2\pi} = \frac{8}{3}$. The orange and green curves are guides for the eyes to identify the $m = 10$ case.

is simplified to $\mathcal{U}(\xi) = \int_{-\infty}^{\infty} dy \cos[2\xi \sinh(y)]$. This integral can be expressed in terms of a modified Bessel function [68]:

$$\mathcal{U}(\xi) = 2K_0(2\xi). \quad (66)$$

Figure 5 shows the reflection and transmission coefficient for a propagation wave through the catenoid, where we have used Eq. (66). In addition, one can see that the value of $E_* = E_x$, where the transmission and reflection have the same value, is translated to the right as long as the value of m increases. The interception value of energy is E_x , where the transcendental equation is satisfied, $\mathcal{T}(E_x) = \frac{1}{2}$, as can appreciate in Fig. 5.

2. Transmission on B_1 -Bour

In this case, one has $x_1(r) = |c|(\log r + \frac{1}{2}r^2)$. Let us substitute $i\xi \rightarrow z$, where z is a complex value with $\text{Re} z < 0$. Additionally, it is convenient to make the change of variable $y = r^2 \in \mathbb{R}^+$, thus the integral Eq. (65) turns out to be $\mathcal{U}(\xi) = 2 \int_0^\infty \frac{dy}{y} y^{-\frac{z}{2}} e^{-\frac{z}{2}y}$, which can be related to a gamma function [68] as

$$\mathcal{U}(\xi) = \lim_{z \rightarrow i\xi} 2 \left(\frac{z}{2}\right)^{\frac{z}{2}} \Gamma\left(-\frac{z}{2}\right). \quad (67)$$

Since we need the complex norm of $\mathcal{U}(\xi)$, we use the identity $|\Gamma(iy)|^2 = \pi/(y \sinh(\pi y))$ for $y \in \mathbb{R}$ [68], and it remains to compute the complex norm of the factor in Eq. (67); by straightforward elementary calculation one has $(\frac{z}{2})^{\frac{z}{2}} = e^{i\frac{\xi}{2} \log \frac{\xi}{2}} e^{-\frac{\xi\pi}{4}}$. Therefore,

$$|\mathcal{U}(\xi)|^2 = \frac{4}{\xi(e^{\pi\xi} - 1)}. \quad (68)$$

Figure 6 shows the reflection and transmission coefficient for a propagation wave through the B_1 -Bour surface, where we have used Eq. (68). The structure of these curves is very similar to the previous case. The principal difference corresponds to that the total transmission occurs to a bigger value

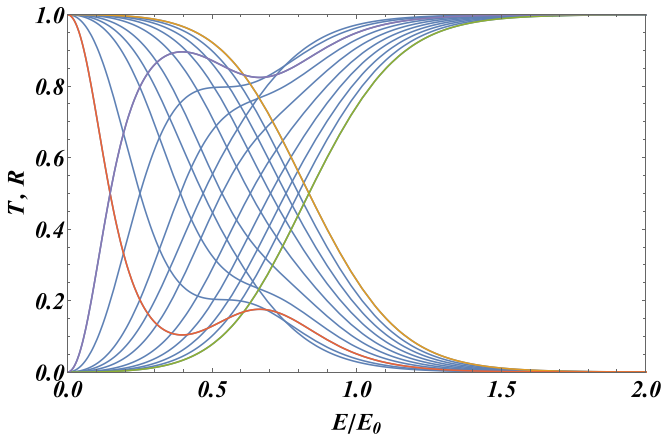


FIG. 6. Family of transmission and reflection coefficients [Eqs. (61) and (62)] versus reduced energy $E_* = E/E_0$ using the Fourier transform Eq. (67) corresponding to the B_1 geometry. The set of curves was obtained for cases with $m = 1, \dots, 10$, and for the non-Abelian flux $\frac{\varphi}{2\pi} = \frac{8}{3}$. The orange and green curves guide the eyes to identify the $m = 10$ case.

of E_* . In addition, how the curves are moving to the left is given according to the transcendental equation $\mathcal{T}(E_K) = 1/2$.

3. Transmission on the classical Enneper surface and $n > 2$ Bour surfaces

In this case, one has $x_n(r) = |c|(r^{\frac{n-1}{n-1}} + \frac{r^{n+1}}{n+1})$ with $n \geq 2$, thus the Fourier transform reduces to the integral

$$U(\xi) = 2 \int_0^\infty \frac{dr}{r} \cos\left(\xi \left(\frac{r^{n-1}}{n-1} + \frac{r^{n+1}}{n+1}\right)\right). \quad (69)$$

This integral is strictly divergent due to the singularity at $r = 0$. The integral is regularized, introducing an inferior cutoff such that $r \geq \epsilon$.

Classical Enneper case. To isolate the singular part, let us consider the next approximation. First, let us focus on the classical Enneper surface $n = 2$. One can argue that the most important contribution to the integral is near $r = \epsilon$, where the cubic term of the cosine argument may be neglected since $r^3 \simeq \epsilon^3$; moreover, for large r value, the contributions to the integral decay to zero as r^{-1} . Using this rationale, let us ignore the cubic term inside the argument of the cosine function; thus, the integral reduces to the cosine integral

$$U(\xi) \simeq 2 \int_\epsilon^\infty \frac{dr}{r} \cos(\xi r) := -2\text{Ci}(\epsilon\xi), \quad (70)$$

where $\text{Ci}(x)$ is the cosine integral that has the series expansion $\text{Ci}(x) = \gamma + \log x + \sum_{n=1}^\infty (-1)^n x^{2n} / (2n(2n!))$ [68]. Thus, one has

$$U(\xi) \simeq -2(\gamma + \log(\xi)) + 2 \log(1/\epsilon) + O(\epsilon^2), \quad (71)$$

where γ is the Euler-Mascheroni constant. Therefore, the singular part is given by $2 \log(1/\epsilon)$. Now, we performed a numerical evaluation of Eq. (69), subtracting the singular part and comparing it with the previous result Eq. (71) [see Fig. 7]. The main error is close to $k \simeq 0$, while for the rest of the values, the error is around 1%.

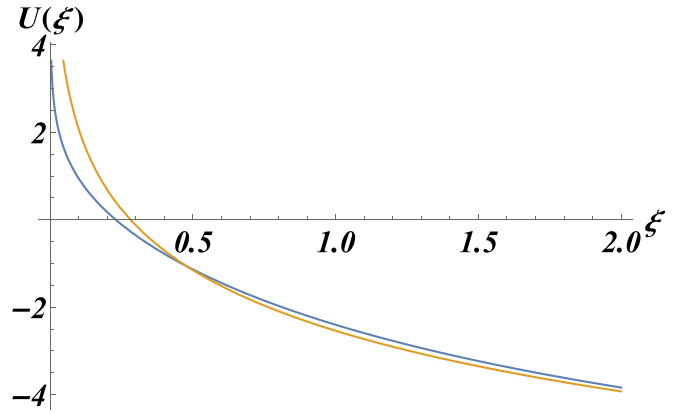


FIG. 7. Fourier transform Eq. (69) versus argument ξ for the classical Enneper geometry with $n = 2$ (blue color curve). It also shows a comparison between the numerical calculation of Eq. (69), and analytical approximation Eq. (71), corresponding to blue and orange curves, respectively.

Figure 8 shows the reflection and transmission coefficient for a propagation wave through the classical Enneper surface, where we have used numerical calculation of the Fourier transform $U(\xi)$. The main feature of the transmission curves for the classical Enneper surface is the transmission value $\mathcal{T}(E_K) = 1$ at energy E_K showing the Klein tunneling phenomena in this case [69]. The Klein value E_K corresponds to the value where the Fourier transform $U(\xi)$ vanishes [see Fig. 7]. Using the approximation Eq. (71), one can estimate the value of $E_K \simeq \frac{E_0}{2} e^{-\gamma} \approx 0.28E_0$, with an error of 5% respect to the numerical calculation. However, in contrast to the previous cases, catenoid and B_1 -Bour surfaces, in the present case, show a strong suppression of the transmission for values above the Klein value E_K , giving rise to a total reflection effect

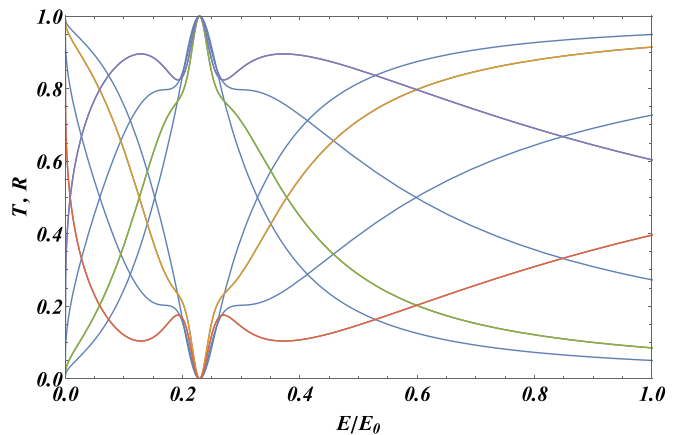


FIG. 8. Family of transmission and reflection coefficients [Eqs. (61) and (62)] versus reduced energy $E_* = E/E_0$ using the numerical evaluation of the Fourier transform Eq. (72) corresponding to the classical Enneper geometry with $n = 2$. The set of curves was obtained for cases with $m = 1, 2, 3, 4$, and for the non-Abelian flux $\frac{\varphi}{2\pi} = \frac{8}{3}$. The purple and green curves guide the eyes to identify the $m = 3$ and $m = 4$ cases, respectively. For all transmission curves, we identify the same single Klein point $E_K \simeq 0.23E_0$, where the transmission is 1 and a clear trend of suppression after such a point.

and thus vanishing conductance $G(E) \rightarrow 0$ for $E \gg E_K$. In addition, one can observe the Fig. 8 oscillations for the modes m near the value of $\varphi/2\pi$, whereas for values of m far from φ the behavior of reflection and transmission follow Eqs. (63) and (64), without changing the conclusion of the existence of the Klein point. Indeed, for $|m| \gg \varphi/2\pi$, there are two interception values, and both values move towards the Klein value as the m value increases. This effect can be explained using the approximation Eq. (71) by making the condition $m^2 |\mathcal{U}(2E_*(m))|^2 = 1$, thus one obtains the values in terms of m by the equation $E_*(m) \simeq E_K e^{\pm \frac{1}{2m}}$, showing the effect just mentioned.

Bn-Bour cases for $n > 2$. In this case, one can follow the same line of argument as in the Enneper case. For instance, let us perform the change of variable $y = \frac{r^{n-1}}{n-1}$, thus Fourier transforms turn out as

$$\mathcal{U}(\xi) = \frac{2}{n-1} \int_{\epsilon}^{\infty} \frac{dy}{y} \cos(\xi(y + \alpha_n y^{\beta_n})), \quad (72)$$

where $\alpha_n = (n-1)^{\beta_n}/(n+1)$ and $\beta_n = \frac{n+1}{n-1}$. Observe $1 < \beta_n \leq 3$, where equality corresponds to the classical Enneper case. Since $\beta_n > 1$, one can attempt to argue that this term is not dominant near the singularity; thus, in this approximation, one has $\mathcal{U}(\xi) \simeq -2\text{Ci}(\epsilon\xi/(n-1))/(n-1)$, thus the difference between the present case and the Enneper case is a factor of $1/(n-1)$. However, in this case, the error increases more than 10%. Thus, we numerically compute the Fourier transform Eq. (69) in this case.

Figure 9 shows the reflection and transmission coefficient for a propagation wave through the B_3 -Bour and B_4 -Bour surfaces. Like in the classical Enneper case, it can be appreciated that for each B_n -Bour surface, there is a single Klein point $E_{K,n}$, where the transmittance is one. The Klein point moves to the right for greater values of n . After the Klein point $E_{K,n}$, the transmission decreases slowly as n increases; however, it is also wholly suppressed for large energy values.

According to Figs. 8 and 9 and Eq. (62), Klein tunneling is achieved for all m cases, including $m = 1$, which we have associated with quasibound states in the above discussion in Sec. IV. Thus, our explanation for the Klein tunneling on the B_n -Bour surfaces with $n \geq 2$ has to do with the fact that the scattered wave is decomposed into a combination of orthogonal components of the pseudospins $v_{-\mu}$ and v_{μ} [see Eq. (51)] for the reflected and transmitted waves in each valley, respectively, and the fact that $V(x)$ behaves as a Coulomb-type potential which is entirely a consequence of the geometry.

VII. CONCLUDING REMARKS

In this paper, we study the electronic degrees of freedom on a curved sheet of graphene based on the Dirac equation. On this occasion, we propose the hypothetical existence of a graphene sheet with the geometry of a Bour surface; examples of these surfaces are the catenoid, the helicoid, and the classical Enneper surface, among other B_n -Bour surfaces that can be labeled using the n parameter. Bour surfaces belong to the large family of minimal surfaces that minimize the area or solutions of the Willmore shape equation. It is conspicuous that the geometry of the minimal surfaces was proposed to model specific carbon structures in Ref. [14].

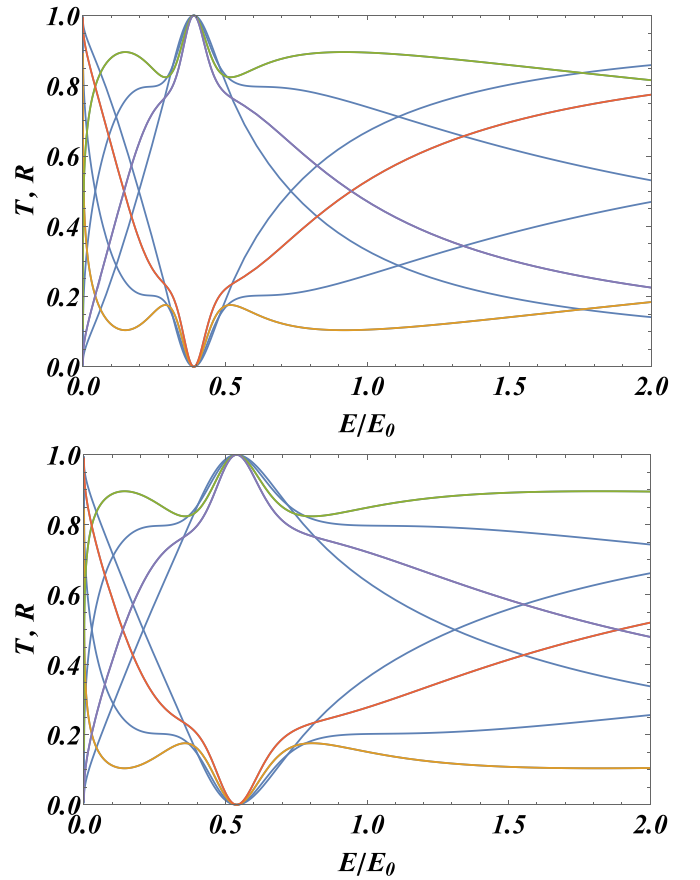


FIG. 9. Family of transmission and reflection coefficients [Eqs. (61) and (62)] versus reduced energy $E_* = E/E_0$ using the numerical evaluation of the Fourier transform Eq. (72) corresponding to the B_3 -Bour surface with $n = 3$ (top) and B_4 -Bour surface with $n = 4$ (bottom). The set of curves was obtained for cases with $m = 1, 2, 3, 4$ and for the non-Abelian flux $\frac{\varphi}{2\pi} = \frac{8}{3}$. The green and purple curves guide the eyes to identify the $m = 3$ and $m = 4$ cases, respectively. For all sets of transmission curves, we identify the same single Klein point $E_K \simeq 0.39E_0$ (top) and $E_K \simeq 0.54E_0$ (bottom), where the transmission is 1, and a clear downward trend in transmission after that point. Moreover, the higher the value of n , the slower the downward trend.

Although there is still no artificial or natural realization of these carbon allotropes in either laboratory or nature, there are good expectations of their existence from numerical and experimental investigations [12,15–17].

Now, for each n , the space-time \mathbb{M} is built with the global structure of $\mathbb{M} = \mathbb{R} \times B_n$ over which we define the Dirac field. In particular, using an elementary change of parameters, it is possible to rewrite the metric of \mathbb{M} as $ds^2 = -v_F^2 dt^2 + dx^2 + (1/V^2(x))d\theta^2$, and the Dirac equation reads

$$i\hbar\partial_t\Phi^\tau = v_F\sigma_1\hat{p}_x\Phi^\tau + v_F V(x)\sigma_2\hat{J}_{\theta,\tau}\Phi^\tau, \quad (73)$$

where v_F is the Fermi velocity and σ_1 and σ_2 are the Pauli matrices. In this equation, $V(x)$ has been interpreted as an effective scattering potential coupled to a pseudospin orbit term of the form $\sigma_2\hat{J}_{\theta,\tau}$, where σ_2 the direction of the pseudospin and $\hat{J}_{\theta,\tau} = \hat{\ell}_\theta + \tau\frac{\varphi}{2\pi}\hat{h}$ is a total angular momentum in two dimensions, φ being the non-Abelian gauge flux due to the

topological defects, and τ the valley index. For each Bour surface, it was found that $V(x)$ decays to zero as $x \rightarrow \infty$, while $V(x)$ works as a potential barrier near $x = 0$. It can be shown that for $n \geq 2$, $V(x)$ approach a repulsive Coulombic-type potential.

The asymptotic behavior of the states in $x \rightarrow \infty$ is determined with Eq. (73), which effectively corresponds to solutions of a Dirac equation in a space-time 1 + 1. These states in terms of x are characterized as plane waves with a pseudospin up \uparrow (or down \downarrow) depending on the positive or negative value of the energy. Furthermore, through the LS formalism, we studied the outscattering states, giving rise to an outscattering state divided into a transmitted and a reflected wave. This is done through the Born and the high-order Born approximation, which can be summed up. In particular, it is observed that the reflected wave transmutes the pseudospin direction, which we coined the spin-orbit interaction.

In addition, through the Nöether current J^μ , the probability density, J^0 , is determined, which allows us to argue that it is more probable to find Dirac fermions near the scattering point, in fact, within this approximation we found that the probability density is proportional to $V(x)$. Now, using the spatial components of J^μ , the incident and scattered currents are determined to find expressions for the reflectance $\mathcal{R}(E)$ and the transmittance $\mathcal{T}(E)$, respectively. As expected [70], $\mathcal{R}(E)$ and $\mathcal{T}(E)$ depend on the number of topological defects, N . It is found that for the Bour surfaces B_0 , catenoid (or helicoid), and B_1 -Bour, there is usual behavior for the transmittance and reflectance, giving rise to the effect of total transmittance for large values of energy. Although the potential barrier in the cases B_0 and B_1 evokes the usual situation where Klein's tunneling arises, the difference lies in the coupling with σ_2 that appears in Eq. (73), which we coin the absence of Klein's tunneling [69]. However, for Bour surfaces B_n with $n \geq 2$, including the classical Enneper surface, we show that there is an energy point E_K for which the transmittance is equal to $\mathcal{T}(E_K) = 1$, giving rise to a manifestation of Klein's tunneling. In contrast, for large values of energy $E \gg E_K$, the transmittance decays to zero, suppressing the conductance completely. Furthermore, it is found that the transmittance $\mathcal{T}(E) \propto N^{-2}$ for large numbers of topological defects on all

surfaces B_n , as long as the energy is different than the Klein point, $E \neq E_K$.

The present paper can be extended as follows. For $n \geq 2$, one can approximate the geometry-induced potential $V(x)$ as a Coulombic potential near the scattering region, where one can attempt to figure out an analytical solution for the states and the electronic spectrum. Following a different direction, through the WE representation, we can propose the study of electronic degrees of freedom on other minimal surfaces, such as simply periodic minimal surfaces, k-noids, or Schwartzites that are much more involved. In particular, for these surfaces, it is found that the conformal factor $\Lambda(r, \theta)$ depends intricately on r and θ , so it is not possible to perform a separation as in the case of Bour surfaces [56]. However, we can implement traditional methods like the finite element to solve the Dirac Eq. (17) to study other electronic properties like the density of states, Kubo conductivity, etc.

ACKNOWLEDGMENTS

The authors acknowledge both reviewers for their valuable comments and suggestions. V.A.G-D. acknowledges the financial support provided by Conahcyt (No. CVU 736886). P.C.-V. would like to thank I. Huet-Hernández and R. de Coss for many valuable discussions. P.C.-V. the financial support provided by SNI-Conahcyt (No. 92896).

APPENDIX A: GREEN'S FUNCTION CALCULATION

Calculation of the one-dimensional Green's function. Let us start with the equation $(E - v_F \sigma_1 \hat{p}_x) \mathbb{G}(x, x', E) = \delta(x - x')$, where the momentum operator $\hat{p}_x = -i\hbar \partial_x$, and let us recall that the dispersion relation is given by $E = \pm \hbar v_F |k|$. Now, let us define the function $g_0(x, x', E)$ such that $\mathbb{G}(x, x', E) = (E + v_F \sigma_1 \hat{p}_x) g_0(x, x', E)$, thus it is not difficult to show that $g_0(x, x', E)$ satisfies the Green's-Helmholtz equation $(\hbar v_F)^2 (-\partial_x^2 + k^2) g_0(x, x', E) = \delta(x - x')$. Now, the solution of this equation is known to be [71]

$$g_0(x, x', E) = \frac{1}{2i(\hbar v_F)^2 |k|} e^{i|k||x-x'|}. \quad (\text{A1})$$

APPENDIX B: CALCULATION OF THE HIGHER-ORDER BORN APPROXIMATION

1. Calculation of $\tau_{n+1}(p)$ terms

We start with the expression Eq. (42),

$$\begin{aligned} \tau_{n+1}(p) &= (\hbar v_F)^{n+1} (2\pi)^n \sum_{\mathbf{q}^{(1)}, \dots, \mathbf{q}^{(n)}} \sigma_2 m_\tau \delta_{m m^{(1)}} \tilde{U}(p - q^{(1)}) \left(\prod_{\ell=1}^{n-1} \mathbb{G}(q^{(\ell)}) \sigma_2 m_\tau^\ell \delta_{m^{(\ell)} m^{(\ell+1)}} \tilde{U}(q^{(\ell)} - q^{(\ell+1)}) \right) \\ &\quad \times \sigma_2 v_{\mu\sigma} f_m^{(n)} m_\tau^{(n)} \tilde{U}(q^{(n)} - \sigma |k|), \end{aligned} \quad (\text{B1})$$

where we have substituted the expression for type (a) Eq. (43) and type (b) Eq. (44). Taking advantage of the Kronecker deltas $\delta_{m^{(\ell)} m^{(\ell+1)}}$, we can simplify the last expression as follows (note that each 2π cancels out with each 2π that appears in $\frac{1}{2\pi} \sum_m$):

$$\begin{aligned} \tau_{n+1}(p) &= (\hbar v_F m_\tau)^{n+1} f_m \int \left(\prod_{\ell=1}^n \frac{dq^{(\ell)}}{2\pi} \right) \sigma_2 \tilde{U}(p - q^{(1)}) \left(\prod_{\ell=1}^{n-1} \mathbb{G}(q^{(\ell)}) \sigma_2 \tilde{U}(q^{(\ell)} - q^{(\ell+1)}) \right) \mathbb{G}(q^{(n)}) \\ &\quad \times \sigma_2 v_{\mu\sigma} \tilde{U}(q^{(n)} - \sigma |k|). \end{aligned} \quad (\text{B2})$$

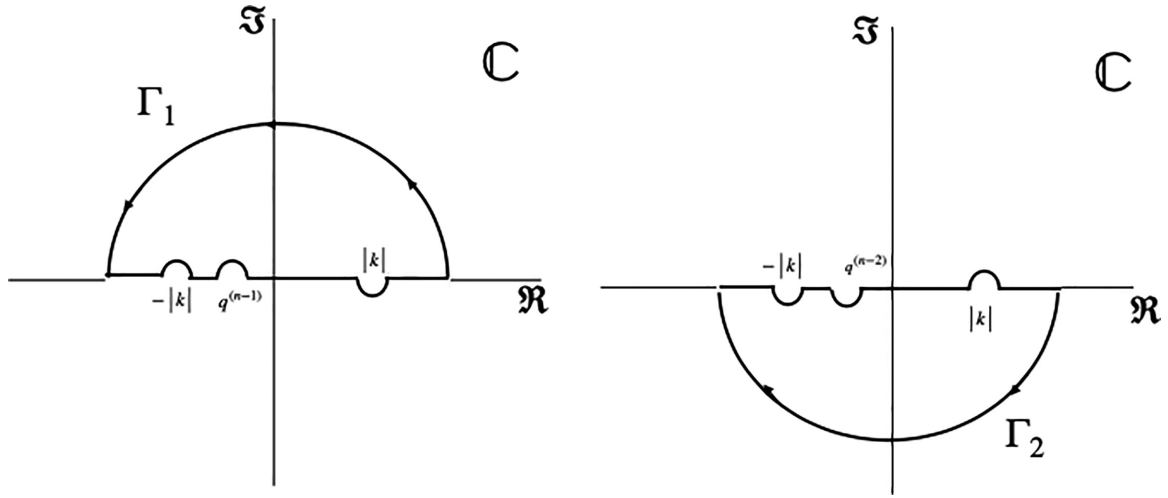


FIG. 10. Contour curves Γ_1 and Γ_2 for the complex integrals in the z plane [Eq. (B4)] and in the q^{n-1} plane [Eq. (B5)], respectively.

Now, we organize the integrals in the following nested structure:

$$\tau_{n+1}(p) = (\hbar v_F m_\tau)^{n+1} f_m \int \frac{dq^{(1)}}{2\pi} \sigma_2 \tilde{U}(p - q^{(1)}) \mathbb{G}(q^{(1)}) \mathcal{U}^{(1)}(q^{(1)}) \sigma_2 v_{\mu,\sigma}, \quad (\text{B3})$$

where $\mathcal{U}^{(1)}(q^{(1)})$ is written in terms of $\mathcal{U}^{(2)}(q^{(2)})$, and so on. In general, one has the following definition:

$$\mathcal{U}^{(\ell)}(q^{(\ell)}) = \int \frac{dq^{(\ell+1)}}{2\pi} \sigma_2 \tilde{U}(q^{(\ell)} - q^{(\ell+1)}) \mathbb{G}(q^{(\ell+1)}) \mathcal{U}^{(\ell+1)}(q^{(\ell+1)}),$$

where $\ell = 1, \dots, n-1$ and $\mathcal{U}^{(n)}(q^{(n)}) = \tilde{U}(q^{(n)} - \sigma|k|)$.

Next, let us proceed to calculate $\mathcal{U}^{(n-1)}(q^{(n-1)})$. The integral involved in this quantity can be performed using complex integration, replacing $q^{(n)}$ by the complex variable z ,

$$\mathcal{U}^{(n-1)}(q^{(n-1)}) = i \int_{\Gamma_1} \frac{dz}{2\pi i} \sigma_2 \tilde{U}(q^{(n-1)} - z) \mathbb{G}(z) \tilde{U}(z + |k|), \quad (\text{B4})$$

where we have put $\sigma = -1$ since we have an initial left wave. The contour complex integration Γ_1 is chosen as shown on the left side of Fig. 10, since we exclude the points where the argument of the Fourier transform is zero. Note that $\tilde{U}(0) = \int_{-\infty}^{\infty} dx U(x)$ is strictly divergent since $U(x)$ is a long-range potential which for all Bour surfaces decay as $1/x$. The Green's function $\mathbb{G}(p)$ in momentum space can be written as

$$\mathbb{G}(p) = \frac{\mu}{\hbar v_F} \frac{|k| + \mu \sigma_1 p}{[p - (|k| + i\epsilon)][p + (|k| + i\epsilon)]},$$

where $\mu = \pm$ represents the positive and negative energy states, and one can identify two poles at $|k| + i\epsilon$ and $-|k| - i\epsilon$. Using the Cauchy integral theorem, it is not difficult to show that

$$\mathcal{U}^{(n-1)}(q^{(n-1)}) = \tilde{U}(q^{(n-1)} - |k|) \frac{i\mu}{\hbar v_F} \tilde{U}(2|k|) \sigma_2 \mathbb{P}_\mu,$$

where $\mathbb{P}_\mu = \frac{1}{2}(1 + \mu \sigma_1)$ is a projector. Now, to be transparent in the calculation, let us insert this result into the integration by the q^{n-1} variable, turning it out as

$$\mathcal{U}^{(n-2)}(q^{(n-2)}) = \int \frac{dq^{(n-1)}}{2\pi} \sigma_2 \tilde{U}(q^{(n-2)} - q^{(n-1)}) \mathbb{G}(q^{(n-1)}) \tilde{U}(q^{(n-1)} - |k|) \frac{i\mu}{\hbar v_F} \tilde{U}(2|k|) \sigma_2 \mathbb{P}_\mu.$$

Although the integration is similar to the previous one, it is convenient to perform the change of variable $q^{(n-1)} \rightarrow -q^{(n-1)}$, thus the integration results in

$$\mathcal{U}^{(n-2)}(q^{(n-2)}) = \int \frac{dq^{(n-1)}}{2\pi} \sigma_2 \tilde{U}(q^{(n-2)} + q^{(n-1)}) \mathbb{G}(-q^{(n-1)}) \tilde{U}^*(q^{(n-1)} + |k|) \frac{i\mu}{\hbar v_F} \tilde{U}(2|k|) \sigma_2 \mathbb{P}_\mu, \quad (\text{B5})$$

where $\tilde{U}^*(k) = \tilde{U}(-k)$ is the complex conjugate. Now, we proceed to calculate this integral again using complex integration as in the previous integration. The result is the same except that \mathbb{P}_μ changes by $\mathbb{P}_{-\mu}$, that is,

$$\mathcal{U}^{(n-2)}(q^{(n-2)}) = \tilde{U}(q^{(n-2)} + |k|) \left(\frac{i\mu}{\hbar v_F} \right)^2 |\tilde{U}(2|k|)|^2 \sigma_2 \mathbb{P}_{-\mu} \sigma_2 \mathbb{P}_\mu,$$

where $|\cdot|$ is the complex norm. Now, by an iterative process, one can conclude that

$$\mathcal{U}^{(1)}(q^{(1)}) = \tilde{U}(q^{(1)} + (-1)^{n-1}|k|) \left(\frac{i\mu}{\hbar v_F} \right)^{n-1} \mathbb{B}_\mu^{(n)},$$

where

$$\mathbb{B}_\mu^{(n)} = \begin{cases} \prod_{j=1}^{(n-1)/2} [|\tilde{U}(2|k|)|^2 \sigma_2 \mathbb{P}_{-\mu} \sigma_2 \mathbb{P}_\mu], & \text{for } n \text{ odd} \\ \tilde{U}(2|k|) \sigma_2 \mathbb{P}_\mu \prod_{j=1}^{(n-2)/2} [|\tilde{U}(2|k|)|^2 \sigma_2 \mathbb{P}_{-\mu} \sigma_2 \mathbb{P}_\mu], & \text{for } n \text{ even.} \end{cases} \quad (\text{B6})$$

Note that Eq. (B6) can be simplified further as a consequence of the following algebra: $\sigma_2 \mathbb{P}_\mu = \mathbb{P}_{-\mu} \sigma_2$, thus $\sigma_2 \mathbb{P}_{-\mu} \sigma_2 \mathbb{P}_\mu = \mathbb{P}_\mu \sigma_2^2 \mathbb{P}_\mu = \mathbb{P}_\mu^2 = \mathbb{P}_\mu$. Using this algebra and the property $\mathbb{P}_\mu^2 = \mathbb{P}_\mu$, one obtains

$$\mathbb{B}_\mu^{(n)} = \begin{cases} |\tilde{U}(2|k|)|^{n-1} \mathbb{P}_\mu, & \text{for } n \text{ odd} \\ \tilde{U}(2|k|) |\tilde{U}(2|k|)|^{n-2} \sigma_2 \mathbb{P}_\mu, & \text{for } n \text{ even.} \end{cases}$$

Now, we substitute $\mathcal{U}^{(1)}(q^{(1)})$ inside the expression for $\tau_{n+1}(p)$ in Eq. (B3). We proceed to perform the calculation for n odd and even cases using the same strategy used to calculate the integrals on the variables $q^{(n)}$ and $q^{(n-1)}$. Additionally, we use the property $\mathbb{P}_\mu v_\mu = v_\mu$ and $\sigma_2 v_{-\mu} = i\mu v_\mu$. Thus, the result of the $n+1$ -th term corresponds to the expressions in Eqs. (46) and (47).

2. Calculation of $C_{n+1}(x)$ terms

The starting point to calculate the terms $C_{n+1}(x)$ corresponds to the Fourier integral

$$C_{n+1}(x) = \int \frac{dp}{2\pi} e^{ipx} \mathbb{G}(p) \tau_{n+1}(p)$$

in the cases even n and odd n . For odd n , we use Eq. (46), make the change of variable $p \rightarrow -p$, and perform the complex integration using the contour Γ_2 . In contrast, for even n , we use Eq. (47), and the complex integration is performed using the contour Γ_1 . In this manner, we obtain the desired expressions Eqs. (49) and (50), respectively.

APPENDIX C: ALTERNATIVE SET OF LOCAL COORDINATES

1. Cartesian coordinates

The metric of the space-time \mathbb{M} written through the square of the line element considered here is

$$ds^2 = -v_F^2 dt^2 + \Lambda^2(\omega) |d\omega|^2, \quad (\text{C1})$$

where $\Lambda^2(\omega)$ is the conformal factor introduced above for the minimal surfaces and $|d\omega|^2 = du^2 + dv^2$. The local indices, in this case, can be split as $\alpha = t, u, v$. From the metric Eq. (C1), one can easily read $\hat{\theta}^0 = v_F dt$, $\hat{\theta}^1 = \Lambda du$, and $\hat{\theta}^2 = \Lambda dv$, from where one can extract the components of the vielbeins e_μ^A . Now, from the Maurer-Cartan Eq. (1) and the torsionless condition, one can obtain $d\hat{\theta}^0 = 0$, and

$$d\hat{\theta}^1 + \frac{\Lambda_v}{\Lambda^2} \hat{\theta}^1 \wedge \hat{\theta}^2 = 0, \quad (\text{C2})$$

$$d\hat{\theta}^2 + \frac{\Lambda_u}{\Lambda^2} \hat{\theta}^2 \wedge \hat{\theta}^1 = 0. \quad (\text{C3})$$

Now, from Eq. (C2) one can deduce $\omega_0^1 = 0$ and $\omega_2^1 = \frac{\Lambda_v}{\Lambda^2} \hat{\theta}^1 + X \hat{\theta}^2$ for some local function X , whereas from Eq. (C3) one can deduce that $\omega_0^2 = 0$ and $\omega_1^2 = \frac{\Lambda_u}{\Lambda^2} \hat{\theta}^2 + \tilde{X} \hat{\theta}^1$. Now we use the metric condition $\omega^{AB} = -\omega^{BA}$; thus one can determine X and

\tilde{X} , turning that the only nonzero components of the connection one-form are

$$\omega^{12} = -\omega^{21} = \frac{\Lambda_v}{\Lambda^2} \hat{\theta}^1 - \frac{\Lambda_u}{\Lambda^2} \hat{\theta}^2. \quad (\text{C4})$$

These components expressed in local coordinates are given by $\omega_u^{12} = -\omega_u^{21} = \partial_v \log \Lambda(\omega)$ and $\omega_v^{12} = -\omega_v^{21} = -\partial_u \log \Lambda(\omega)$. Consequently, the spin connection Ω_α is given simply as $\Omega_t = 0$, $\Omega_u = \frac{i}{2} \partial_v \log \Lambda(\omega) \sigma_3$, and $\Omega_v = -\frac{i}{2} \partial_u \log \Lambda(\omega) \sigma_3$.

Now we use all this information to write an explicit expression for the Dirac equation in these space-times. Denoting the $2+1$ Dirac spinor by Ψ and making the transformation $\Psi = \Lambda^{-\frac{1}{2}} \Phi$, we can show that the Dirac equation is given by

$$i\hbar \partial_t \Phi = -i \frac{\hbar v_F}{\Lambda} (\sigma_1 \partial_u \Phi + \sigma_2 \partial_v \Phi). \quad (\text{C5})$$

In the simplest case, when $\Lambda = 1$, the above equations correspond to the Dirac equation in Minkowski's space-time. The Dirac equation in these coordinates u, v is particularly useful when the conformal factor Λ depends on one of the coordinates. Noticeably, Eq. (C5) is valid for any conformally flat space metric [22].

2. Natural coordinates for the catenoid

In this section, we write the Dirac equation in the most natural coordinates of the catenoid before considering the WE representation Eq. (3). Indeed, let us consider the parametrization of the catenoid obtained from the 2π -rotation of the catenary, that is,

$$\mathbf{X}(z, \varphi) = (R(z) \cos \varphi, -R(z) \sin \varphi, z), \quad (\text{C6})$$

where $\mathbf{R}(z) = R_0 \cosh(z/R_0)$, with R_0 the radius of the neck of the catenoid, where $z \in (-\infty, \infty)$, and $\varphi \in [0, 2\pi)$. The metric square line, in this case, is given by

$$ds^2 = R_0^2 \cosh^2 \left(\frac{z}{R_0} \right) \left(\frac{1}{R_0^2} dz^2 + d\varphi^2 \right). \quad (\text{C7})$$

Clearly, one can identify the coordinates $u \rightarrow \zeta = z/R_0$ and $v \rightarrow \varphi$, and the conformal factor $\Lambda(\omega) \rightarrow \lambda(\zeta) = R_0 \cosh(z/R_0)$. The expression Eq. (C5) is advantageous since the conformal factor depends on one of the coordinates. Further, it is convenient to define the following change of variables: $x = R_0 \sinh \zeta$, where $x \in (-\infty, \infty)$, thus it is not difficult to show that $\lambda^{-1}(\zeta)\partial_\zeta = \partial_x$. Indeed, the Dirac equation reduces to the equation found above Eq. (19), $i\hbar\partial_t\Phi = v_F\sigma_1\hat{p}_x\Phi + v_F\sigma_2V(x)\hat{\ell}_\varphi\Phi$, where $\hat{p}_x = -i\hbar\partial_x$ and $\hat{\ell}_\varphi = -i\hbar\partial_\varphi$ are linear and angular momentum operators, and the expected effective potential found above $V(x) = 1/\sqrt{x^2 + R_0^2}$. The connection between the natural coordinates and the polar coordinates can be accomplished by using the change of variable $r = e^\zeta$ and identified $\varphi \rightarrow \theta$.

APPENDIX D: EXPLICIT PARAMETRIZATIONS

In this section, we show explicit parametrizations for the catenoid, helicoid, B_1 -Bour, and the classical Enneper surfaces in polar coordinates (r, φ) , following Ref. [55]. For the catenoid

$$\mathbf{X}_c(r, \varphi) = \left(\frac{\alpha}{2} \left(\frac{1}{r} + r \right) \cos \varphi, \frac{\alpha}{2} \left(\frac{1}{r} + r \right) \sin \varphi, -\alpha \log r \right); \quad (\text{D1})$$

for the helicoid

$$\mathbf{X}_h(r, \varphi) = \left(\frac{\beta}{2} \left(r - \frac{1}{r} \right) \sin \varphi, \frac{\beta}{2} \left(r - \frac{1}{r} \right) \cos \varphi; \beta \varphi \right), \quad (\text{D2})$$

for the classical Enneper surface

$$\mathbf{X}_e(r, \varphi) = \left(r \cos \varphi - \frac{r^3}{3} \cos 3\varphi, -r \sin \varphi - \frac{r^3}{3} \sin 3\varphi, r^2 \cos 2\varphi \right), \quad (\text{D3})$$

and for the B_1 -Bour surface

$$\mathbf{X}_b(r, \varphi) = \left(\log r - \frac{r^2}{2} \cos 2\varphi, -\varphi - \frac{r^2}{2} \sin 2\varphi, 2r \cos \varphi \right). \quad (\text{D4})$$

Using these parametrizations, \mathbf{X}_c , \mathbf{X}_h , \mathbf{X}_b , and \mathbf{X}_e , we have drawn the surfaces inside Figs. 1, and 2, 4 with the help of MATHEMATICA.

-
- [1] K. S. Novoselov, D. Jiang, F. Schedin, T. J. Booth, V. V. Khotkevich, S. V. Morozov, and A. K. Geim, Two-dimensional atomic crystals, *Proc. Natl. Acad. Sci. USA* **102**, 10451 (2005).
- [2] B. Amorim, A. Cortijo, F. de Juan, A. Grushin, F. Guinea, A. Gutiérrez-Rubio, H. Ochoa, V. Parente, R. Roldán, P. San-Jose, J. Schiefele, M. Sturla, and M. Vozmediano, Novel effects of strains in graphene and other two dimensional materials, *Phys. Rep.* **617**, 1 (2016).
- [3] K. S. Novoselov, A. K. Geim, S. V. Morozov, D. Jiang, M. I. Katsnelson, I. V. Grigorieva, S. V. Dubonos, and A. A. Firsov, Two-dimensional gas of massless Dirac fermions in graphene, *Nature (London)* **438**, 197 (2005).
- [4] G. W. Semenoff, Condensed-matter simulation of a three-dimensional anomaly, *Phys. Rev. Lett.* **53**, 2449 (1984).
- [5] D. P. DiVincenzo and E. J. Mele, Self-consistent effective-mass theory for intralayer screening in graphite intercalation compounds, *Phys. Rev. B* **29**, 1685 (1984).
- [6] P. R. Wallace, The band theory of graphite, *Phys. Rev.* **71**, 622 (1947).
- [7] A. H. Castro Neto, F. Guinea, N. M. R. Peres, K. S. Novoselov, and A. K. Geim, The electronic properties of graphene, *Rev. Mod. Phys.* **81**, 109 (2009).
- [8] A. K. Geim and K. S. Novoselov, The rise of graphene, *Nat. Mater.* **6**, 183 (2007).
- [9] H. W. Kroto, J. R. Heath, S. C. O'Brien, R. F. Curl, and R. E. Smalley, c_{60} : Buckminsterfullerene, *Nature (London)* **318**, 162 (1985).
- [10] W. Krätschmer, L. D. Lamb, K. Fostiropoulos, and D. R. Huffman, Solid c_{60} : A new form of carbon, *Nature (London)* **347**, 354 (1990).
- [11] S. Iijima, Helical microtubules of graphitic carbon, *Nature (London)* **354**, 56 (1991).
- [12] H. Terrones and M. Terrones, Curved nanostructured materials, *New J. Phys.* **5**, 126 (2003).
- [13] P. Mélinon, Vitreous carbon, geometry and topology: A hollistic approach, *Nanomaterials* **11**, 1694 (2021).
- [14] H. Terrones and A. Mackay, The geometry of hypothetical curved graphite structures, *Carbon* **30**, 1251 (1992).
- [15] A. L. Mackay, H. Terrones, P. W. Fowler, H. W. Kroto, A. L. Mackay, G. Turner, and D. R. M. Walton, Hypothetical graphite structures with negative Gaussian curvature, *Philos. Trans. R. Soc. London, Ser. A* **343**, 113 (1993).
- [16] E. Braun, Y. Lee, S. M. Moosavi, S. Barthel, R. Mercado, I. A. Baburin, D. M. Proserpio, and B. Smit, Generating carbon schwarzites via zeolite-templating, *Proc. Natl. Acad. Sci. USA* **115**, E8116 (2018).
- [17] Y. Tanabe, Y. Ito, K. Sugawara, M. Koshino, S. Kimura, T. Naito, I. Johnson, T. Takahashi, and M. Chen, Dirac fermion kinetics in 3D curved graphene, *Adv. Mater.* **32**, 2005838 (2020).
- [18] M. Vozmediano, M. Katsnelson, and F. Guinea, Gauge fields in graphene, *Phys. Rep.* **496**, 109 (2010).
- [19] A. Iorio, Graphene: QFT in curved spacetimes close to experiments, *J. Phys.: Conf. Ser.* **442**, 012056 (2013).
- [20] A. Iorio, Graphene and black holes: Novel materials to reach the unreachable, *Frontiers Mater.* **1**, 1 (2015).
- [21] A. Iorio, Weyl-gauge symmetry of graphene, *Ann. Phys.* **326**, 1334 (2011).
- [22] M. Cvetič and G. W. Gibbons, Graphene and the Zermelo optical metric of the BTZ black hole, *Ann. Phys.* **327**, 2617 (2012).
- [23] A. Gallerati, Negative-curvature spacetime solutions for graphene, *J. Phys.: Condens. Matter* **33**, 135501 (2021).
- [24] A. Iorio and G. Lambiase, The Hawking-Unruh phenomenon on graphene, *Phys. Lett. B* **716**, 334 (2012).

- [25] A. Iorio and G. Lambiase, Quantum field theory in curved graphene spacetimes, Lobachevsky geometry, Weyl symmetry, Hawking effect, and all that, *Phys. Rev. D* **90**, 025006 (2014).
- [26] T. Morresi, D. Binosi, S. Simonucci, R. Piergallini, S. Roche, N. M. Pugno, and T. Simone, Exploring event horizons and hawking radiation through deformed graphene membranes, *2D Mater.* **7**, 041006 (2020).
- [27] B. S. Kandemir and d. Ertem, Quasinormal modes of BTZ black hole and hawking-like radiation in graphene, *Ann. Phys.* **529**, 1600330 (2017).
- [28] G. Volovik and M. Zubkov, Emergent Horava gravity in graphene, *Ann. Phys.* **340**, 352 (2014).
- [29] N. A. Shah, A. Contreras-Astorga, F. Fillion-Gourdeau, M. A. H. Ahsan, S. MacLean, and M. Faizal, Effects of discrete topology on quantum transport across a graphene $n-p-n$ junction: A quantum gravity analog, *Phys. Rev. B* **105**, L161401 (2022).
- [30] A. Iorio and P. Pais, Generalized uncertainty principle in graphene, *J. Phys.: Conf. Ser.* **1275**, 012061 (2019).
- [31] F. de Juan, A. Cortijo, and M. A. H. Vozmediano, Charge inhomogeneities due to smooth ripples in graphene sheets, *Phys. Rev. B* **76**, 165409 (2007).
- [32] A. Gallerati, Graphene, Dirac equation and analogue gravity, *Phys. Scr.* **97**, 064005 (2022).
- [33] A. J. Chaves, T. Frederico, O. Oliveira, W. de Paula, and M. C. Santos, Optical conductivity of curved graphene, *J. Phys.: Condens. Matter* **26**, 185301 (2014).
- [34] O. Oliveira, A. J. Chaves, W. de Paula, and T. Frederico, Signature of curved QFT effects on the optical properties of deformed graphene, *Europhys. Lett.* **117**, 27003 (2017).
- [35] D. V. Kolesnikov and V. A. Osipov, The continuum gauge field-theory model for low-energy electronic states of icosahedral fullerenes, *Eur. Phys. J. B* **49**, 465 (2006).
- [36] A. Cortijo and M. A. H. Vozmediano, Effects of topological defects and local curvature on the electronic properties of planar graphene, *Nucl. Phys. B* **763**, 293 (2007).
- [37] F. de Juan, M. Sturla, and M. A. Vozmediano, Space dependent Fermi velocity in strained graphene, *Phys. Rev. Lett.* **108**, 227205 (2012).
- [38] N. Levy, S. A. Burke, K. L. Meaker, M. Panlasigui, A. Zettl, F. Guinea, A. H. Castro Neto, and M. F. Crommie, Strain-induced pseudo-magnetic fields greater than 300 tesla in graphene nanobubbles, *Science* **329**, 544 (2010).
- [39] E. Arias, A. R. Hernández, and C. Lewenkopf, Gauge fields in graphene with nonuniform elastic deformations: A quantum field theory approach, *Phys. Rev. B* **92**, 245110 (2015).
- [40] P. Castro-Villarreal and R. Ruiz-Sánchez, Pseudomagnetic field in curved graphene, *Phys. Rev. B* **95**, 125432 (2017).
- [41] R. C. T. Da Costa, Quantum mechanics of a constrained particle, *Phys. Rev. A* **23**, 1982 (1981).
- [42] P. Schuster and R. Jaffe, Quantum mechanics on manifolds embedded in Euclidean space, *Ann. Phys.* **307**, 132 (2003).
- [43] G. Ferrari and G. Cuoghi, Schrödinger equation for a particle on a curved surface in an electric and magnetic field, *Phys. Rev. Lett.* **100**, 230403 (2008).
- [44] J. D. M. de Lima, E. Gomes, F. F. da Silva Filho, F. Moraes, and R. Teixeira, Geometric effects on the electronic structure of curved nanotubes and curved graphene: The case of the helix, catenary, helicoid, and catenoid, *Eur. Phys. J. Plus* **136**, 551 (2021).
- [45] V. Atanasov, R. Dandoloff, and A. Saxena, Geometry-induced charge separation on a helicoidal ribbon, *Phys. Rev. B* **79**, 033404 (2009).
- [46] Ö. Yeşiltaş, J. Furtado, and J. E. G. Silva, Dirac equation on a catenoid bridge: A supersymmetric approach, *Eur. Phys. J. Plus* **137**, 416 (2022).
- [47] L. N. Monteiro, C. A. S. Almeida, and J. E. G. Silva, Dirac fermions on wires confined to the graphene Möbius strip, *Phys. Rev. B* **108**, 115436 (2023).
- [48] R. Dandoloff, A. Saxena, and B. Jensen, Geometry-induced potential on a two-dimensional section of a wormhole: Catenoid, *Phys. Rev. A* **81**, 014102 (2010).
- [49] R. Dandoloff and T. Truong, Quantum hall-like effect on strips due to geometry, *Phys. Lett. A* **325**, 233 (2004).
- [50] M. S. Morris and K. S. Thorne, Wormholes in spacetime and their use for interstellar travel: A tool for teaching general relativity, *Am. J. Phys.* **56**, 395 (1988).
- [51] J. Silva, J. Furtado, T. Santiago, A. C. Ramos, and D. da Costa, Electronic properties of bilayer graphene catenoid bridge, *Phys. Lett. A* **384**, 126458 (2020).
- [52] B. S. DeWitt, Quantum field theory in curved spacetime, *Phys. Rep.* **19**, 295 (1975).
- [53] V. Atanasov and A. Saxena, Helicoidal graphene nanoribbons: Chiraltronics, *Phys. Rev. B* **92**, 035440 (2015).
- [54] P. Castro-Villarreal and J. Guven, Inverted catenoid as a fluid membrane with two points pulled together, *Phys. Rev. E* **76**, 011922 (2007).
- [55] J. K. Whittemore, Minimal surfaces applicable to surfaces of revolution, *Ann. Math.* **19**, 1 (1917).
- [56] U. Dierkes, S. Hildebrandt, and F. Sauvigny, *Minimal Surfaces* (Springer, Berlin-Heidelberg, 2010), pp. 53–90.
- [57] L. E. Parker and D. J. Toms, *Quantum Field Theory in Curved Spacetime: Quantized Fields and Gravity* (Cambridge University Press, New York, 2009).
- [58] M. Nakahara, *Geometry, Topology and Physics*, Graduate Student Series in Physics (Taylor and Francis, New York, 2003).
- [59] S.-S. Chern, An elementary proof of the existence of isothermal parameters on a surface, *Proc. Am. Math. Soc.* **6**, 771 (1955).
- [60] R. Osserman, Global properties of classical minimal surfaces, *Duke Math. J.* **32**, 565 (1965).
- [61] It is noteworthy to mention that usually the down valley sector, Ψ_{\downarrow} , is coupled with Dirac matrices transposed; however, one always can perform a global pseudospin SU(2) transformation on this sector such that one can use the same matrices as the up valley sector.
- [62] J. González, F. Guinea, and M. Vozmediano, The electronic spectrum of fullerenes from the Dirac equation, *Nucl. Phys. B* **406**, 771 (1993).
- [63] J. Gonzalez and J. Herrero, Graphene wormholes: A condensed matter illustration of dirac fermions in curved space, *Nucl. Phys. B* **825**, 426 (2010).
- [64] P. E. Lammert and V. H. Crespi, Graphene cones: Classification by fictitious flux and electronic properties, *Phys. Rev. B* **69**, 035406 (2004).
- [65] A similar procedure can be done in the Cartesian coordinates (see Appendix C).

- [66] B. A. Lippmann and J. Schwinger, Variational principles for scattering processes. I, *Phys. Rev.* **79**, 469 (1950).
- [67] J. J. Sakurai, *Modern Quantum Mechanics (Revised Edition)*, 1st ed. (Addison-Wesley, New York, 1994).
- [68] I. S. Gradshteyn and I. M. Ryzhik, *Table of Integrals, Series, and Products*, 7th ed., translated from Russian, edited and with a preface by A. Jeffrey and D. Zwillinger (Elsevier/Academic Press, Amsterdam, 2007), pp. xlviii+1171.
- [69] A. S. de Castro, $n+1$ dimensional Dirac equation and the Klein paradox, *Am. J. Phys.* **69**, 1111 (2001).
- [70] J. Fonseca, W. Moura-Melo, and A. Pereira, Scattering of charge carriers in graphene induced by topological defects, *Phys. Lett. A* **374**, 4359 (2010).
- [71] P. M. Morse and H. Feshbach, *Methods of Theoretical Physics Part I and II* (McGraw Hill Book Company, Inc., New York, 1953).