



UNIVERSIDAD DE CHILE
FACULTAD DE CIENCIAS FÍSICAS Y MATEMÁTICAS
DEPARTAMENTO DE INGENIERÍA MATEMÁTICA

PROBLEMAS ESPECTRALES EN EL GRAFENO

TESIS PARA OPTAR AL GRADO DE
DOCTOR EN CIENCIAS DE LA INGENIERÍA
CON MENCIÓN EN MODELACIÓN MATEMÁTICA

VIVIANA SOLANO PALMA

PROFESOR GUÍA:
CARLOS CONCA ROSENDE

PROFESOR GUÍA:
JORGE SAN MARTÍN HERMOSILLA

MIEMBROS DE LA COMISIÓN:
LEONARDO BAFFICO HARAMOTO
RAÚL GORMAZ ARANCIBIA
CLAUDIO MUÑOZ CERÓN

Este trabajo ha sido parcialmente financiado por Becas CONICYT, el Centro de Modelamiento Matemático (CMM) y el Instituto de Ciencias Matemáticas (ICMAT).

SANTIAGO DE CHILE
2017

TESIS PARA OPTAR AL GRADO DE
DOCTOR EN CIENCIAS DE LA INGENIERÍA
CON MENCIÓN EN MODELACIÓN MATEMÁTICA
POR: VIVIANA SOLANO PALMA
FECHA: 2017
PROF. GUÍA: CARLOS CONCA ROSENDE
PROF. GUÍA: JORGE SAN MARTÍN HERMOSILLA

PROBLEMAS ESPECTRALES EN EL GRAFENO

El objetivo de esta Tesis es analizar el espectro de un operador Hamiltoniano definido en la red hexagonal del grafeno. Se describen completamente las regiones donde las soluciones son acotadas y no acotadas, se define una base que permite determinar las soluciones en toda la red hexagonal y se estudia el soporte de ciertas funciones definidas en esta red.

*Al profesor Jorge San Martín, con profundo agradecimiento y admiración.
A mi madre y a mis dos hermanos, por el apoyo incondicional de siempre.*

Tabla de Contenido

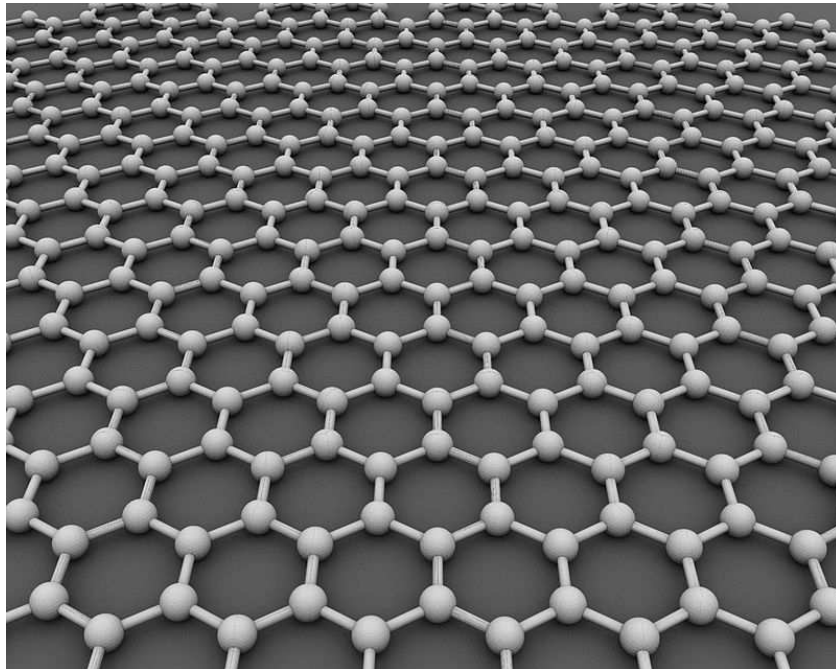
Tabla de Contenido	VI
Introducción	1
Motivación general	1
Contenido de la Tesis	4
1 EDOs de segundo orden con coeficientes periódicos	9
1.1 Teoría de Floquet	9
1.2 Ecuación de Hill	14
1.2.1 Acotación y periodicidad de las soluciones	18
1.2.2 Sistemas de ecuaciones diferenciales	19
1.2.3 Intervalos de estabilidad y de inestabilidad	20
1.2.4 Problemas periódicos y semi-periódicos de valores propios	21
1.2.5 La función $\mathcal{D}(\lambda)$	22
1.3 Estructura de bandas en la Ecuación de Hill	28
1.3.1 El espectro de Bloch	28
1.3.2 El espectro exponencial	31
2 El operador Hamiltoniano en el grafeno	36
2.1 El grafeno	36
2.2 El Hamiltoniano en el grafeno	39
2.3 Condiciones de Kirchhoff	40
2.3.1 Demostración del Teorema 2.1	41
2.3.2 Demostración del Teorema 2.2	43
2.4 Teoría espectral en el grafeno	45
2.4.1 Soluciones acotadas	46
2.4.2 Soluciones no acotadas	48
3 Bases para el Grafeno	54
3.1 Una base canónica del grafeno	54
3.2 Propiedades de la base canónica	59
3.3 Base con soporte en el semi-plano	70
Conclusión	85
A Apéndice A: Artículo 1	87

A.1	Introduction	87
A.2	Theoretical framework	88
	A.2.1 The Bloch spectrum	89
	A.2.2 The exponential spectrum	91
A.3	The graphene	92
A.4	The Hamiltonian of graphene	95
A.5	Kirchhoff's conditions	96
	A.5.1 Proof of Theorem A.1	97
	A.5.2 Proof of Theorem A.2	99
A.6	Spectral Theory in the Graphene	101
	A.6.1 Bounded solutions	103
	A.6.2 Unbounded solutions	104
A.7	Conclusions	109
B	Apéndice B: Artículo 2	110
B.1	Introduction	110
	B.1.1 Survey of the previous results	111
	B.1.2 Presentation of new results	115
B.2	Proof of the main results	121
	B.2.1 A canonical basis for the graphene	121
	B.2.2 Properties of the canonical basis	123
B.3	Basis with support in the semi-plane	133
B.4	Conclusions	145
	Bibliografía	147

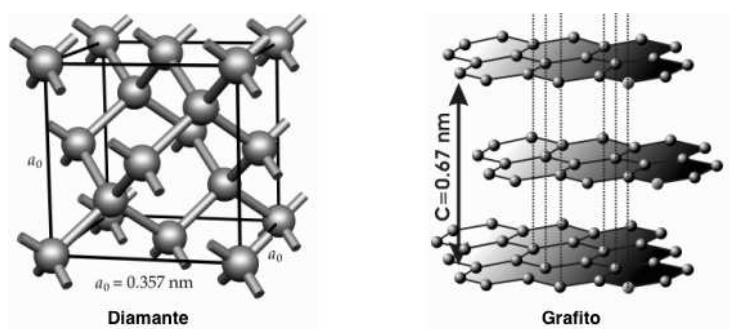
Introducción

Motivación general

El grafeno, compuesto únicamente por carbono, se encuentra dispuesto en una estructura laminar plana de un solo átomo de grosor y con un empaquetamiento cristalino de panal de abeja. Las nanoestructuras de carbono, en especial el grafeno, han atraído mucho la atención de los investigadores en los últimos años, debido a sus particulares propiedades físico-químicas y sus aplicaciones (ver, por ejemplo, [28, 32, 53]). Tales estructuras han sido modeladas, en particular, por redes cuánticas (ver, por ejemplo, [5, 33, 34, 41]), también llamadas grafos cuánticos, que nos llevan a modelos de gráficos cuánticos en química [51, 52] y en física [2, 8, 19, 45, 47] (ver también [37, 38] y sus referencias). El Premio Nobel de Física del año 2010 se le otorgó a los científicos Andréy Gueim y Konstantín Novosiólov por sus revolucionarios descubrimientos acerca de este material [40].



La composición química del grafeno (es decir los átomos que lo conforman) es la misma que la del diamante (conformado por átomos de carbono organizados en un enmarañado tridimensional) o el grafito (los mismo átomos de carbono pero dispuestos en forma de capas, como una torta de milhojas). El grafeno es sencillamente una capa de grafito aislada. Es un material intrínsecamente bidimensional con sólo una capa atómica [49]. Luego de años en que la búsqueda sistemática de grafeno en una superficie de un tamaño de milímetros parecía una tarea condenada al fracaso debido a la extensión del área implicada, el gran mérito del equipo de científicos rusos de la Universidad de Manchester (Reino Unido) para ser merecedores del Premio Nobel fue concebir la idea de depositar delgadas capas de grafito sobre óxido de silicio (material básico en la formación de los transistores que componen los computadores) desde donde podían distinguirse las capas de grafeno mediante un simple contraste óptico perceptible al ojo humano. De esta forma, Novosiólov y Geim descubrieron que era posible encontrar zonas con una capa atómica de carbono y actuar sobre ellas conectando cables y estudiando sus propiedades.



El hecho de que las propiedades encontradas fueran maravillosamente extravagantes no fue una completa sorpresa. El material grafeno había sido objeto de extensos análisis teóricos durante el siglo XX y en todos ellos se le habían atribuido diversas propiedades, por lo que se intuía que el compuesto escondía un universo de fenómenos sin parangón en comparación con los demás materiales y que esta característica se mantendría vigente hasta hoy, especialmente al momento de analizar sus propiedades electrónicas [15]. La principal de estas propiedades apunta al hecho de que el grafeno aparece como un material que no es ni metal ni aislante (semiconductor), en un sentido clásico, una particularidad que ha motivado incluso la reescritura de textos clásicos de física electrónica. Los electrones en grafeno se mueven de una manera especial - que sólo tiene una analogía en el estudio de partículas de altas energías - y similar a los neutrinos, partículas subatómicas que se mueven a la velocidad de la luz, sin importar su energía debido a que no tienen masa. Estas propiedades están condensadas en la llamada ecuación de Dirac, formulada por Paul Dirac en 1928 y que describe la dinámica de partículas reconciliando la mecánica cuántica con la teoría de Einstein de relatividad especial. Esto quiere decir que, en grafeno, los electrones se mueven obedeciendo a la misma ecuación de Dirac, sin masa, pero con dos distinciones no menores: su velocidad constante pero unas 300 veces menor que la de la luz y, por supuesto, su capacidad para moverse en sólo dos dimensiones. Esta analogía ha permitido observar diversos efectos sólo reservados para sistemas muy energéticos en el grafeno. Las curiosas propiedades del grafeno prometen, por lo tanto, un gran potencial tecnológico.

Algunos avances ya se han registrado a través de la creación del primer nanotransistor construido con grafeno y el desarrollo de óxido de grafeno. Sin embargo, para lograr que el potencial de este particular material se concrete será necesario dominar la técnica de crecimiento del grafeno a niveles que permitan su uso industrial. Por esta razón, los esfuerzos de investigación actual en el tema continúan enfocándose en problemas como el crecimiento, la estructura y la dinámica de las capas de grafeno.

Mencionaremos a continuación sólo algunas de las muchas cualidades que tiene este material.

- Propiedades mecánicas.

El grafeno es de los materiales más duros y fuertes existentes, incluso supera la dureza del diamante y es doscientas veces más resistente que el acero. Es altamente rígido, soporta grandes fuerzas sin apenas deformarse. Se trata de un material ligero con una densidad de tan solo 0,77 miligramos por metro cuadrado (densidad indicada en unidades de superficie como causa de su estructura laminar). También cabe destacar que soporta grandes fuerzas de flexión, es decir, se puede doblar sin que se rompa. Para hacerse una idea de la capacidad de estas propiedades mecánicas, el premio Nobel hizo una comparación con una hamaca de grafeno de un metro cuadrado de superficie y un solo átomo de espesor. Esta hamaca de grafeno podría soportar hasta 4 kg antes de romperse (equivalente al peso de un gato). En total esta hamaca pesaría lo mismo que uno de los pelos del bigote del gato, menos de un miligramo.

- Aplicaciones en electrónica.

Las propiedades del grafeno son ideales para utilizarlo como componente de circuitos integrados. Está dotado de alta movilidad de portadores, así como de bajo nivel de “ruido”. Ello permite que se le utilice como canal en transistores de efecto campo (FET). La dificultad de utilizar grafeno radica en la producción del mismo material en el sustrato adecuado. Investigadores están indagando métodos tales como transferencia de hojas de grafeno desde grafito (exfoliación) o crecimiento epitaxial (como la grafitización térmica de la superficie del carburo de silicio: SiC).

En diciembre de 2008, IBM anunció que habían fabricado y caracterizado transistores que operaban a frecuencias de 26 gigahercios (GHz). En febrero de 2010, la misma empresa anunció que la velocidad de estos nuevos transistores alcanzó los 100 GHz. En septiembre de 2010 se alcanzaron los 300 GHz.

Las publicaciones especializadas rebosan de artículos en los que se atribuye a esta estructura de carbono cualidad de “remedio universal” en la tecnología para reemplazo de dispositivos de silicio por grafeno. Pero no toda la comunidad científica comparte este optimismo. El célebre físico holandés Walter de Heer afirma: “El grafeno nunca reemplazará al silicio. Nadie que conozca el mundillo puede decir esto seriamente. Simplemente, hará algunas cosas que el silicio no puede hacer. Es como con los barcos y los aviones. Los aviones nunca han reemplazado a los barcos”.

Además, el grafeno carece de una banda de resistividad, propiedad esencial que le es inherente al silicio. Eso implica que el grafeno no puede dejar de conducir electricidad: no se puede apagar.

- Cables de alta velocidad.

Investigadores de la Universidad de Cambridge lograron que el grafeno fuera capaz de captar una gran cantidad de luz, lo que se puede utilizar en la creación de cables de fibra óptica muy veloces que se benefician de otra de las propiedades del material: los electrones se desplazan rápidamente en él. Así, se prometen cables de grafeno que podrían mover información cientos de veces más rápido que uno actual, lo que podría implementarse en el área de las telecomunicaciones para la instalación de redes más veloces, aumentando así la capacidad y rapidez de internet, la telefonía móvil y en definitiva, todas las comunicaciones que se llevan a cabo sobre nuestro planeta.

Contenido de la Tesis

Capítulo 1

En las tres primeras secciones del primer capítulo, se resume parte de la teoría de ecuaciones diferenciales de segundo orden con coeficientes periódicos explicada en el libro de Eastham [22]. En particular, nos centramos en el análisis de la ecuación con coeficientes reales conocida como *ecuación de Hill*, que ha sido investigada por muchos matemáticos en los últimos años. Gran parte de esta teoría está en el libro [42] de Magnus and Winkler. Otros resultados relacionados con la teoría de funciones propias están dados por Titchmarsh en [58] y por Burnat en [14].

El nombre ecuación de Hill es dado a la ecuación

$$(P(x)u'(x))' + Q(x)u(x) = 0,$$

donde P y Q son funciones a valores reales y tienen el mismo periodo T , $T > 0$. Además, se asume que P es continua y nunca cero y que P' y Q son continuas por tramos.

Denotaremos por φ_1 y φ_2 a dos soluciones linealmente independientes de la ecuación de Hill que satisfacen

$$\varphi_1(0) = 1, \varphi_1'(0) = 0, \varphi_2(0) = 0, \varphi_2'(0) = 1.$$

Así, toda solución u de dicha ecuación se puede escribir como

$$u(x) = u(0)\varphi_1(x) + u'(0)\varphi_2(x).$$

Se describe con detalle cuándo la ecuación de Hill tiene soluciones acotadas y no acotadas.

A continuación, se estudia el caso particular

$$Q(x) = \lambda w(x) - V(x),$$

donde w y V son continuas por partes, tienen periodo T y existe una constante $w_0 > 0$ tal que $w \geq w_0$. Si escribimos p en lugar de P , la ecuación de Hill es ahora

$$(p(x)u'(x))' + (\lambda w(x) - V(x))u(x) = 0$$

y, para señalar la dependencia de λ , escribiremos las soluciones φ_1 y φ_2 como $\varphi_1(\cdot; \lambda)$ y $\varphi_2(\cdot; \lambda)$.

La teoría de estabilidad y de funciones propias están analizadas en varios libros, como Arscott [6], Erdelyi [9], McLachlen [43], Meixner y Schafke [44], y Strutt [55], por mencionar algunos.

Las dos últimas secciones de este capítulo, son una recopilación de algunos resultados del artículo [3]. En él los autores se centran en el problema de encontrar los intervalos de estabilidad e inestabilidad de una ecuación de segundo orden en la recta real con coeficientes periódicos, que en este caso es la Ecuación de Hill. Es bien sabido que los intervalos estables corresponden al espectro de la familia de operadores de Bloch definidos en un sólo periodo (ver [1, 18]), pero en [3] proponen la caracterización de los intervalos inestables, introduciendo una nueva familia de operadores no autoadjuntos formalmente equivalentes a los de Bloch aunque con un parámetro de Bloch imaginario, que es llamado *exponencial*. Los autores prueban que esta familia admite un número contable infinito de valores propios que, cuando son reales, caracterizan completamente los intervalos de inestabilidad de la Ecuación de Hill. Este resultado se establece en el Teorema 1.24.

Capítulo 2

En el segundo capítulo, se describe el grafeno G geoméricamente, con sus respectivos componentes: los vértices en \mathcal{V} y las aristas en \mathcal{A} . Además, identificaremos cada arista del grafeno con el segmento $[0, 1] \subseteq \mathbb{R}$, ya que cada arista es biyectiva con dicho segmento. En efecto, basta con considerar la parametrización σ , orientada de \mathbf{v} a \mathbf{w} , definida por:

$$\begin{aligned} \sigma : [0, 1] \times \mathbb{R}^2 \times \mathbb{R}^2 &\rightarrow \mathbb{R}^2 \\ (t; \mathbf{v}, \mathbf{w}) &\mapsto \sigma(t; \mathbf{v}, \mathbf{w}) = \mathbf{v} + t(\mathbf{w} - \mathbf{v}). \end{aligned}$$

De este modo, cada arista $[\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2] \in \mathcal{A}$ puede escribirse como $\sigma([0, 1]; \mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2)$. La función inversa es tal que

$$\mathbf{x} \in [\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2] \mapsto \sigma^{-1}(\mathbf{x}; \mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2) = \frac{\|\mathbf{x} - \mathbf{v}_1\|}{\|\mathbf{v}_2 - \mathbf{v}_1\|}.$$

Usando la parametrización σ , para cada arista $[\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2] \in \mathcal{A}$ se puede definir el espacio $L^2(\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2)$ como sigue:

$$L^2(\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2) = \left\{ \tilde{\Psi} \circ \sigma^{-1}(\cdot; \mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2) : \tilde{\Psi} \in L^2(0, 1) \right\},$$

dotado de la norma $\|\tilde{\Psi} \circ \sigma^{-1}(\cdot; \mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2)\|_{L^2(\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2)} = \|\tilde{\Psi}\|_{L^2(0, 1)}$. Con esto, se define $L^2(\mathcal{A})$ del modo siguiente:

$$L^2(\mathcal{A}) = \left\{ (\Psi_a)_{a \in \mathcal{A}} \in \bigotimes_{a \in \mathcal{A}} L^2(a) : \sum_{a \in \mathcal{A}} \|\Psi_a\|_{L^2(a)}^2 < \infty \right\}.$$

Este espacio tambien suele llamarse $L^2(G)$.

Análogamente, para cada arista $[\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2] \in \mathcal{A}$ se puede definir el espacio de Sobolev $H^2(\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2)$ como sigue:

$$H^2(\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2) = \left\{ \tilde{\Psi} \circ \sigma^{-1}(\cdot; \mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2) : \tilde{\Psi} \in H^2(0, 1) \right\},$$

dotado de la norma $\|\tilde{\Psi} \circ \sigma^{-1}(\cdot; \mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2)\|_{H^2(\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2)} = \|\tilde{\Psi}\|_{H^2(0,1)}$. Con esto, se define el espacio de Sobolev $H^2(G)$ como el subconjunto de funciones $(\Psi_a)_{a \in \mathcal{A}} \in \bigotimes_{a \in \mathcal{A}} H^2(a)$ que cumplen las tres condiciones siguientes:

- (i) $\sum_{a \in \mathcal{A}} \|\Psi_a\|_{H^2(a)}^2 < \infty$.
- (ii) Para todo $\mathbf{v} \in \mathcal{V}$, para todo $a_1, a_2 \in \mathcal{A}$, $[\mathbf{v} \in a_1 \cap a_2 \Rightarrow \Psi_{a_1}(\mathbf{v}) = \Psi_{a_2}(\mathbf{v})]$, que corresponde a la condición de continuidad en cada vértice al pasar de una arista a otra.
- (iii) Para todo $\mathbf{v} \in \mathcal{V}$, $\sum_{\substack{v_2 \in \mathcal{V} \\ [\mathbf{v}, v_2] \in \mathcal{A}}} D\Psi_{[\mathbf{v}, v_2]}(\mathbf{v}; \mathbf{v}_2 - \mathbf{v}) = 0$, donde $D\Psi_{[\mathbf{v}, v_2]}(\mathbf{v}; \mathbf{v}_2 - \mathbf{v})$ denota la derivada direccional de la función $\Psi_{[\mathbf{v}, v_2]}$ en el punto \mathbf{v} en la dirección $[\mathbf{v}_2 - \mathbf{v}]$, condición que establece que la suma de flujos que salen del vértice \mathbf{v} debe ser nula.

Las condiciones (ii)–(iii) se suelen llamar condiciones de Kirchhoff.

Con estos conceptos previos, definimos a continuación el *Hamiltoniano del grafeno* como el operador $\mathcal{H} : H^2(G) \subset L^2(G) \rightarrow L^2(G)$ de modo que a cada $\Psi = (\Psi_a)_{a \in \mathcal{A}} \in H^2(G)$ le asocia $\mathcal{H}\Psi \in L^2(G)$, $\mathcal{H}\Psi = ((\mathcal{H}\Psi)_a)_{a \in \mathcal{A}}$, tal que

$$(\mathcal{H}\Psi)_a(\mathbf{x}) = \left(-\tilde{\Psi}_a'' + V\tilde{\Psi}_a \right) \circ \sigma^{-1}(\mathbf{x}; a),$$

donde para cada arista $a \in \mathcal{A}$, $\tilde{\Psi}_a = \Psi_a \circ \sigma(\cdot; a) \in H^2(0, 1)$. La función $V(t)$ es una función potencial en $L^2(0, 1)$ que satisface $V(t) = V(1 - t)$.

El objetivo de este capítulo es analizar el espectro del operador \mathcal{H} , es decir, estudiaremos el parámetro λ en la ecuación

$$\mathcal{H}\Psi = \lambda\Psi.$$

Nos interesa estudiar las funciones $\Psi = (\Psi_a)_{a \in \mathcal{A}}$ que satisfacen las condiciones de continuidad y flujo (i)–(ii), la ecuación

$$-\tilde{\Psi}_a''(t) + V(t)\tilde{\Psi}_a(t) = \lambda\tilde{\Psi}_a(t), \quad \forall a \in \mathcal{A}, \quad \forall t \in (0, 1),$$

y además cumplen las propiedades de cuasiperiodicidad

$$\Psi(\mathbf{x} + \mathbf{e}_1) = R_1\Psi(\mathbf{x}), \quad \Psi(\mathbf{x} + \mathbf{e}_2) = R_2\Psi(\mathbf{x}), \quad \forall \mathbf{x} \in G.$$

Determinaremos para qué valores del parámetro λ estas soluciones son acotadas o no acotadas, analizando la correspondiente relación de dispersión. Nos interesa obtener un resultado análogo al escrito en [3], donde se caracterizan completamente las bandas permitidas y las no permitidas

utilizando valores propios de un problema en \mathbb{R} , pero esta vez con valores propios de un problema definido en la red hexagonal G .

Primero, notamos que es importante distinguir los casos $\varphi_2(1; \lambda) \neq 0$ y $\varphi_2(1; \lambda) = 0$, donde $\varphi_2(\cdot; \lambda)$ es la función descrita en el capítulo anterior. La importancia de esta separación es que en el segundo caso λ está incluido en el espectro de Dirichlet. Así, en la Sección 2.3, se muestra el resultado principal en dos teoremas: el Teorema 2.1 y el Teorema 2.2.

Después, en la última sección de este capítulo, se caracterizan completamente las regiones donde la función $\Psi = (\Psi_a)_{a \in \mathcal{A}}$ es acotada y no acotada. En la Subsección 2.4.1 se obtiene como resultado el Lema 2.5, que es también mencionado en [39].

Finalmente, en la Subsección 2.4.2, caracterizamos completamente las regiones

$$\begin{aligned} \mathcal{R}_S &= \left\{ (R_1, R_2) \in \mathbb{R}^2 : 0 \leq (1 + R_1 + R_2)(1 + R_1^{-1} + R_2^{-1}) < 9 \right\} \\ \mathcal{R}_U &= \left\{ (R_1, R_2) \in \mathbb{R}^2 : 9 \leq (1 + R_1 + R_2)(1 + R_1^{-1} + R_2^{-1}) \right\} \end{aligned}$$

demostrando el Teorema 2.9.

Capítulo 3

En el último capítulo, estudiaremos en forma más detallada la estructura del espacio de funciones $\Psi = (\Psi_a)_{a \in \mathcal{A}}$ que satisfacen las condiciones de Kirchhoff (ii)–(iii) y las ecuaciones $-\tilde{\Psi}_a''(t) + V(t)\tilde{\Psi}_a(t) = \lambda\tilde{\Psi}_a(t)$, para todo $a \in \mathcal{A}$, $t \in (0, 1)$. En todo el capítulo consideraremos que el parámetro λ es tal que $\varphi_2(1; \lambda) \neq 0$, donde $\varphi_2(\cdot; \lambda)$ es la función descrita en el primer capítulo.

Consideramos funciones u tales que $H\Psi \equiv \lambda\Psi$. Se define el *perfil*

$$L_q = \{ \mathbf{v}_{2k}^{q-k}, \hat{\mathbf{v}}_{2k}^{q-k}, \mathbf{v}_{2k+1}^{q-k}, \hat{\mathbf{v}}_{2k+1}^{q-k} : k \in \mathbb{Z} \}$$

para estudiar si es posible obtener el valor de la solución Ψ en todo G a partir de L_q . Obtenemos así el resultado establecido en la Proposición 3.3, que nos permite afirmar que el perfil L_q es una base del grafeno G , pues toda función Ψ definida en G se puede generar a partir de los valores de Ψ en cada vértice de L_q .

En la Sección 3.2 se estudian las propiedades de la base canónica encontrada, que en particular son funciones que tiene soporte no acotado y son no acotadas.

Después, en la Sección 3.3, se cambia de estrategia buscando funciones base que sean de soporte compacto. Encontramos así una estructura polinómica al interior del grafeno, la familia

$(P_n)_n \in \mathbb{N}$, que está dada por la recurrencia:

$$\begin{aligned} P_0(s) &= -s \\ P_n(s) &= P_{n-1}(s) + s \sum_{k=0}^{n-1} P_k(s) P_{n-1-k}(s) \quad \text{para } n \geq 1. \end{aligned}$$

y permite definir bases cuyo soporte está restringido a un semiplano. Obtenemos así el resultado principal de este capítulo: el Teorema 3.13.

Capítulo 1

Ecuaciones diferenciales de segundo orden con coeficientes periódicos

Las ecuaciones diferenciales con coeficientes periódicos constituyen una parte muy estudiada de la teoría de ecuaciones diferenciales ordinarias [7, 22, 42, 58, 60]. Muchos problemas teóricos y aplicados conducen a analizar estas ecuaciones. Podemos mencionar, por ejemplo, la mecánica cuántica [4, 11, 12, 13, 21, 24, 27], la hidrodinámica [31], la teoría de elasticidad [59], la teoría de ondas guiadas [20, 46], la teoría de homogenización [10, 50, 54], la dispersión directa e inversa [29, 35, 36, 48, 57], la teoría de resonancia paramétrica [26] y la geometría espectral [23, 56].

Como podemos notar, existe una literatura muy extensa sobre este tema. De entre toda ella queremos resaltar el libro de Eastham [22], que será la principal referencia de este capítulo. Además, en él se pueden encontrar abundantes referencias adicionales.

1.1. Teoría de Floquet

La herramienta principal de la teoría de ecuaciones diferenciales con coeficientes periódicos es llamada *Teoría de Floquet* [22, 25, 42].

Consideremos la ecuación de segundo orden

$$a_0(x)u''(x) + a_1(x)u'(x) + a_2(x)u(x) = 0, \quad (1.1.1)$$

donde los coeficientes a_i son a valores complejos, continuos por tramos y periódicos, con el mismo periodo $T \in \mathbb{R}$, $T > 0$. Así, para todo $x \in \mathbb{R}$,

$$a_i(x + T) = a_i(x), \quad i = 0, 1, 2.$$

Supongamos también que los límites por la izquierda y por la derecha de a_0 en todo punto

son no nulos, de manera que la teoría usual de las ecuaciones diferenciales lineales sin puntos singulares se aplica [30].

La ecuación (1.1.1) no cambia si reemplazamos x por $x + T$. Si $\psi(x)$ es solución de (1.1.1) para $x \in \mathbb{R}$, entonces $\psi(x + T)$ también lo es. Sin embargo, en general $\psi(x) \neq \psi(x + T)$, incluso (1.1.1) no necesariamente tiene una solución no trivial con periodo T . Por ejemplo, las soluciones de $u''(x) - u(x) = 0$ son combinaciones lineales de e^x y e^{-x} , y ninguna solución no trivial tiene como periodo algún real T .

Teorema 1.1. *Existe una constante ρ , $\rho \neq 0$, y una solución no trivial ψ de (1.1.1) tal que*

$$\psi(x + T) = \rho \psi(x). \quad (1.1.2)$$

Antes de probar este resultado, introduciremos dos funciones que serán de gran utilidad de aquí en adelante.

Definición 1.2. *Denotaremos por φ_1 y φ_2 a dos soluciones linealmente independientes de (1.1.1) que satisfacen*

$$\varphi_1(0) = 1, \varphi_1'(0) = 0, \varphi_2(0) = 0, \varphi_2'(0) = 1. \quad (1.1.3)$$

Lema 1.3. *Toda solución u de (1.1.1) se puede escribir como*

$$u(x) = u(0)\varphi_1(x) + u'(0)\varphi_2(x). \quad (1.1.4)$$

DEMOSTRACIÓN. Es claro que, para cualquier α y β , la función $u(x) = \alpha\varphi_1(x) + \beta\varphi_2(x)$ es solución de (1.1.1), ya que φ_1 y φ_2 también lo son. Así, el conjunto de soluciones de la ecuación (1.1.1) es un espacio vectorial. No es difícil ver que es de dimensión dos.

Dado que φ_1 y φ_2 son linealmente independientes, el conjunto $\{\varphi_1, \varphi_2\}$ es una base de soluciones de la ecuación (1.1.1). Luego, existen constantes c_1 y c_2 tales que

$$u(x) = c_1\varphi_1(x) + c_2\varphi_2(x). \quad (1.1.5)$$

De (1.1.3), si hacemos $t = 0$ en la ecuación (1.1.5) y en la derivada de la ecuación (1.1.5), se tiene

$$u(0) = c_1 \quad \text{y} \quad u'(0) = c_2.$$

Se concluye así el resultado. □

DEMOSTRACIÓN DEL TEOREMA 1.1. Ya que $\varphi_1(x + T)$ y $\varphi_2(x + T)$ son también soluciones linealmente independientes de (1.1.1), existen constantes A_{ij} , $1 \leq i, j \leq 2$, tales que

$$\begin{aligned} \varphi_1(x + T) &= A_{11}\varphi_1(x) + A_{12}\varphi_2(x) \\ \varphi_2(x + T) &= A_{21}\varphi_1(x) + A_{22}\varphi_2(x), \end{aligned} \quad (1.1.6)$$

donde la matriz $A = (A_{ij})$ es no singular. Toda solución ψ de (1.1.1) tiene la forma

$$\psi(x) = c_1 \varphi_1(x) + c_2 \varphi_2(x),$$

con c_1, c_2 constantes. Luego, podemos escribir (1.1.2) como

$$c_1 \varphi_1(x+T) + c_2 \varphi_2(x+T) = \rho (c_1 \varphi_1(x) + c_2 \varphi_2(x)).$$

De (1.1.6), esto es equivalente a

$$c_1 (A_{11} \varphi_1(x) + A_{12} \varphi_2(x)) + c_2 (A_{21} \varphi_1(x) + A_{22} \varphi_2(x)) = \rho (c_1 \varphi_1(x) + c_2 \varphi_2(x)),$$

es decir,

$$\varphi_1(x) ((A_{11} - \rho) c_1 + A_{21} c_2) + \varphi_2(x) (A_{12} c_1 + (A_{22} - \rho) c_2) = 0.$$

Dado que φ_1 y φ_2 son linealmente independientes, obtenemos el sistema

$$\begin{aligned} (A_{11} - \rho) c_1 + A_{21} c_2 &= 0 \\ A_{12} c_1 + (A_{22} - \rho) c_2 &= 0. \end{aligned} \tag{1.1.7}$$

Estas ecuaciones se satisfacen para c_1 y c_2 no ambos cero si ρ es tal que

$$\begin{vmatrix} A_{11} - \rho & A_{21} \\ A_{12} & A_{22} - \rho \end{vmatrix} = 0,$$

esto es,

$$\rho^2 - (A_{11} + A_{22}) \rho + \det(A) = 0. \tag{1.1.8}$$

Esta es una ecuación cuadrática para ρ y se satisface para al menos un valor de ρ , que no puede ser cero ya que $\det(A) \neq 0$. \square

Sigue de (1.1.3) y (1.1.6) que

$$A_{11} = \varphi_1(T), \quad A_{12} = \varphi_1'(T), \quad A_{21} = \varphi_2(T), \quad A_{22} = \varphi_2'(T). \tag{1.1.9}$$

Por otro lado, si denotamos por $W(\varphi_1, \varphi_2)$ al Wronskiano de φ_1 y φ_2 , tenemos

$$W(\varphi_1, \varphi_2)(T) = \begin{vmatrix} \varphi_1(T) & \varphi_2(T) \\ \varphi_1'(T) & \varphi_2'(T) \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} A_{11} & A_{21} \\ A_{12} & A_{22} \end{vmatrix} = \det(A).$$

Además, de la Fórmula de Liouville,

$$W(\varphi_1, \varphi_2)(x) = C \exp\left(-\int_0^x \frac{a_1(t)}{a_0(t)} dt\right),$$

donde C es una constante. Ya que $W(\varphi_1, \varphi_2)(0) = 1$, podemos concluir que $C = 1$ y se tiene que el Wronskiano de (1.1.1) está dado por

$$W(\varphi_1, \varphi_2)(x) = \exp\left(-\int_0^x \frac{a_1(t)}{a_0(t)} dt\right). \tag{1.1.10}$$

Así, (1.1.8) puede ser escrita como

$$\rho^2 - (\varphi_1(T) + \varphi_2'(T)) \rho + \exp\left(-\int_0^T \frac{a_1(t)}{a_0(t)} dt\right) = 0. \tag{1.1.11}$$

Observación 1.4. *La matriz*

$$A = \begin{pmatrix} A_{11} & A_{21} \\ A_{12} & A_{22} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \varphi_1(T) & \varphi_2(T) \\ \varphi_1'(T) & \varphi_2'(T) \end{pmatrix}$$

descrita anteriormente es llamada matriz fundamental de la ecuación (1.1.1).

Teorema 1.5. *Existen dos soluciones de (1.1.1) linealmente independientes, ψ_1 y ψ_2 , tales que*

(i) $\psi_1(x) = e^{\theta_1 x} p_1(x)$, $\psi_2(x) = e^{\theta_2 x} p_2(x)$, con θ_1, θ_2 constantes no necesariamente distintas y p_1, p_2 periódicas con periodo T ; o bien,

(ii) $\psi_1(x) = e^{\theta x} p_1(x)$, $\psi_2(x) = e^{\theta x} (x p_1(x) + p_2(x))$, con θ constante y p_1, p_2 periódicas con periodo T .

DEMOSTRACIÓN. Supongamos primero que (1.1.8) tiene dos soluciones distintas ρ_1 y ρ_2 . Gracias al Teorema 1.1, sabemos que existen ψ_1 y ψ_2 tales que

$$\psi_i(x + T) = \rho_i \psi_i(x), \quad i = 1, 2. \quad (1.1.12)$$

Notemos que ψ_1 y ψ_2 son linealmente independientes. Ya que ρ_1 y ρ_2 son no nulas, podemos definir θ_1 y θ_2 de la siguiente manera:

$$e^{\theta_i T} = \rho_i. \quad (1.1.13)$$

Sea $p_i(x) = e^{-\theta_i x} \psi_i(x)$, para $i = 1, 2$. Entonces,

$$p_i(x + T) = e^{-\theta_i(x+T)} \psi_i(x + T) = e^{-\theta_i(x+T)} \rho_i \psi_i(x) = p_i(x).$$

Así, $\psi_i(x) = e^{\theta_i x} p_i(x)$, con p_i periódica de periodo T , $i = 1, 2$.

Supongamos ahora que (1.1.8) tiene una solución repetida ρ . Definamos θ como sigue:

$$e^{\theta T} = \rho.$$

Del Teorema 1.1, existe Ψ_1 solución no trivial de (1.1.1) tal que

$$\Psi_1(x + T) = \rho \Psi_1(x). \quad (1.1.14)$$

Sea Ψ_2 una solución de (1.1.1), linealmente independiente de Ψ_1 . Dado que $\Psi_2(x+T)$ también satisface (1.1.1), existen d_1, d_2 constantes tales que

$$\Psi_2(x + T) = d_1 \Psi_1(x) + d_2 \Psi_2(x). \quad (1.1.15)$$

Calculemos d_2 . De (1.1.14) y (1.1.15), tenemos

$$\begin{aligned}
W(\Psi_1, \Psi_2)(x+T) &= \begin{vmatrix} \Psi_1(x+T) & \Psi_2(x+T) \\ \Psi_1'(x+T) & \Psi_2'(x+T) \end{vmatrix} \\
&= \begin{vmatrix} \rho \Psi_1(x) & d_1 \Psi_1(x) + d_2 \Psi_2(x) \\ \rho \Psi_1'(x) & d_1 \Psi_1'(x) + d_2 \Psi_2'(x) \end{vmatrix} \\
&= \rho \begin{vmatrix} \Psi_1 & d_2 \Psi_2 \\ \Psi_1' & d_2 \Psi_2' \end{vmatrix} \\
&= \rho d_2 W(\Psi_2(x), \Psi_2(x)).
\end{aligned}$$

Así, de la Fórmula de Liouville,

$$\exp\left(-\int_0^{x+T} \frac{a_1(t)}{a_0(t)} dt\right) = \rho d_2 \exp\left(-\int_0^x \frac{a_1(t)}{a_0(t)} dt\right),$$

y dado que la integral tiene periodo T ,

$$\rho d_2 = \exp\left(-\int_x^{x+T} \frac{a_1(t)}{a_0(t)} dt\right) = \exp\left(-\int_0^T \frac{a_1(t)}{a_0(t)} dt\right).$$

El término de la derecha es igual a ρ^2 , pues ρ es solución repetida de la ecuación (1.1.11). De aquí, $\rho d_2 = \rho^2$, es decir,

$$d_2 = \rho.$$

Luego, de (1.1.15), podemos escribir

$$\Psi_2(x+T) = d_1 \Psi_1(x) + \rho \Psi_2(x). \quad (1.1.16)$$

Se tienen entonces dos casos:

1. Si $d_1 = 0$, entonces $\Psi_2(x+T) = \rho \Psi_2(x)$. Además, tenemos (1.1.14), por lo tanto estamos en la misma situación que antes, es decir, se tiene (1.1.12) con $\rho_1 = \rho_2 = \rho$.

Así, como en la primera parte de la demostración, este caso está incluido en (i) del Teorema 1.5, con $\Psi_i \equiv \psi_i$ y $\theta_i = \theta$, $i = 1, 2$.

2. Si $d_1 \neq 0$, definamos $P_1(x) = e^{-\theta x} \Psi_1(x)$ y $P_2(x) = e^{-\theta x} \Psi_2(x) - \frac{d_1}{T\rho} x P_1(x)$.

De (1.1.14) y (1.1.16), P_1 y P_2 tienen periodo T . Si hacemos

$$\Psi_1(x) = e^{\theta x} P_1(x) \quad \text{y} \quad \Psi_2(x) = e^{\theta x} \left(\frac{d_1}{T\rho} x P_1(x) + P_2(x) \right),$$

se tiene (ii) con $\psi_1 \equiv \Psi_1$ y $\psi_2 \equiv \frac{T\rho}{d_1} \Psi_2$.

□

Observemos que (i) del Teorema 1.5 ocurre si hay dos soluciones linealmente independientes de (1.1.1) que satisfacen (1.1.2), con diferentes o iguales valores de ρ , mientras que tenemos (ii) cuando sólo una de estas soluciones cumple dicha propiedad.

Por otro lado, (1.1.2) surge de (1.1.7), que establece que el vector columna $(c_1, c_2)^t$ es un vector propio de A^t . Así, (i) y (ii) del Teorema 1.5 ocurren si A^t , y por lo tanto A , tienen dos vectores propios linealmente independientes o sólo un vector propio.

En particular, cuando (1.1.11) tiene una solución repetida ρ , tendremos (i) si el rango de $A - \rho I$ es igual a cero, y tendremos (ii) si el rango de $A - \rho I$ es igual a uno.

Las soluciones ρ_1 y ρ_2 de (1.1.8) o (1.1.11), distintas de cero o no, se llaman *multiplicadores característicos* de (1.1.1) y θ_1, θ_2 definidos en (1.1.13) son los *exponentes característicos* de (1.1.1).

1.2. Ecuación de Hill

Cualquier ecuación diferencial homogénea de segundo orden con coeficientes periódicos puede ser reducida a una ecuación del tipo Hill. Una pregunta específica que surge en la teoría de la ecuación de Hill es el problema de la existencia de soluciones periódicas. Este problema tiene muchas características en común con los problemas ordinarios de Sturm-Liouville, y en determinados casos puede ser reducido a un problema del tipo Sturm-Liouville con condiciones de borde [42]. Sin embargo, en general, tal reducción no es posible. Así, la ecuación diferencial puede tener dos soluciones periódicas linealmente independientes, pero no puede tener dos soluciones linealmente independientes que satisfagan las mismas condiciones de borde homogéneas. Además, el valor del periodo de la solución (que es un múltiplo del periodo T de los coeficientes) juega un rol importante en el análisis de soluciones periódicas.

El nombre *ecuación de Hill* es dado a la ecuación

$$(P(x)u'(x))' + Q(x)u(x) = 0, \quad (1.2.1)$$

donde P y Q son funciones a valores reales y tienen el mismo periodo T , $T > 0$. Además, se asume que P es continua y nunca cero y que P' y Q son continuas por tramos.

Mencionaremos aquí dos circunstancias en las cuales (1.1.1) con coeficientes reales puede ser transformada en una ecuación del tipo (1.2.1).

Primero, supongamos

$$\int_0^T \frac{a_1(t)}{a_0(t)} dt = 0. \quad (1.2.2)$$

Si multiplicamos (1.1.1) por $a_0^{-1} \exp A$, con

$$A(x) = \int_0^x \frac{a_1(t)}{a_0(t)} dt,$$

la ecuación toma la forma de (1.2.1) con

$$P(x) = \exp A(x) \quad \text{y} \quad Q(x) = \frac{a_2(x)}{a_0(x)} \exp A(x).$$

De (1.2.2), A tiene periodo T y, por lo tanto, P y Q también.

Segundo, en lugar de (1.2.2), supongamos que $\frac{a_1}{a_0}$ tiene derivada continua por tramos y hagamos en (1.1.1) la sustitución

$$u(x) = z(x) \exp \left(-\frac{1}{2} \int_0^x \frac{a_1(t)}{a_0(t)} dt \right).$$

La ecuación queda

$$z''(x) + \left(a_2(x) - \frac{1}{2} \left(\frac{a_1(x)}{a_0(x)} \right)' - \frac{1}{4} \left(\frac{a_1(x)}{a_0(x)} \right)^2 \right) z(x) = 0.$$

Dado que el coeficiente de z es periódico, esta ecuación tiene la forma (1.2.1) con $P \equiv 1$ y z en lugar de u . La ecuación (1.2.1) tendrá mucha importancia en este trabajo. Analizaremos ahora con más detalle las soluciones ψ_1 y ψ_2 dadas por el Teorema 1.2.1, pero aplicado a la ecuación (1.2.1).

Reemplazando los coeficientes de (1.2.1) en (1.1.10), es decir, haciendo $a_0(x) = P(x)$ y $a_1(x) = P'(x)$, se tiene que

$$W(\varphi_1, \varphi_2)(T) = 1. \tag{1.2.3}$$

Así, la ecuación cuadrática (1.1.11) queda

$$\rho^2 - (\varphi_1(T) + \varphi_2'(T))\rho + 1 = 0. \tag{1.2.4}$$

Luego, los multiplicadores característicos ρ_1 y ρ_2 satisfacen

$$\rho_1 \rho_2 = 1. \tag{1.2.5}$$

Las soluciones φ_1 y φ_2 de (1.2.1) que satisfacen (1.1.3) son a valores reales porque P y Q son a valores reales.

Definición 1.6. *El número real \mathcal{D} es llamado discriminante de (1.2.1) y está dado por*

$$\mathcal{D} = \varphi_1(T) + \varphi_2'(T). \tag{1.2.6}$$

Notemos que, de (1.2.4),

$$\mathcal{D} = \rho_1 + \rho_2. \quad (1.2.7)$$

Dado que la ecuación cuadrática (1.2.4) tiene soluciones dadas por

$$\rho = \frac{\mathcal{D} \pm \sqrt{\mathcal{D}^2 - 4}}{2},$$

consideraremos los siguientes cinco casos.

Caso 1: $\mathcal{D} > 2$. De (1.2.4), ρ_1 y ρ_2 son reales y distintas. También son positivas y no iguales a uno. Así, de (1.2.5), existe $\theta \in \mathbb{R} \setminus \{0\}$ tal que

$$\rho_1 = e^{\theta T} \quad , \quad \rho_2 = e^{-\theta T}$$

(ver (1.1.13)). Luego, por parte (i) del Teorema 1.5,

$$\psi_1(x) = e^{\theta x} p_1(x) \quad , \quad \psi_2(x) = e^{-\theta x} p_2(x), \quad (1.2.8)$$

donde p_1 y p_2 tienen periodo T .

Caso 2: $\mathcal{D} < -2$. La situación es la misma que en el Caso 1, excepto que ρ_1 y ρ_2 son ahora negativos y no iguales a -1 . Así, θ debe ser reemplazado por $\theta + \frac{i\pi}{T}$ en (1.2.8).

Caso 3: $-2 < \mathcal{D} < 2$. Por (1.2.4), ρ_1 y ρ_2 son no-reales y distintos. Dado que son complejos conjugados, (1.2.5) muestra que sus módulos son iguales a uno. Así, existe θ , $0 < \theta T < \pi$ (o $-\pi < \theta T < 0$), tal que

$$\rho_1 = e^{i\theta T} \quad , \quad \rho_2 = e^{-i\theta T}.$$

De (i) del Teorema 1.5,

$$\psi_1(x) = e^{i\theta x} p_1(x) \quad , \quad \psi_2(x) = e^{-i\theta x} p_2(x), \quad (1.2.9)$$

donde p_1 y p_2 tienen periodo T .

Caso 4: $\mathcal{D} = 2$. De (1.2.4), $\rho_1 = \rho_2 = 1$. Para decidir si aplicamos (i) o (ii) del Teorema 1.5, necesitamos determinar el rango de $A - I$, que denotaremos $R(A - I)$, con $A = (A_{ij})$ dada en (1.1.9). Consideremos dos subcasos.

Caso 4.1: $\varphi_2(T) = \varphi_1'(T) = 0$. De (1.1.8) y (1.2.4), $\det(A) = 1$; es decir, $W(\varphi_1, \varphi_2)(T) = \varphi_1(T)\varphi_2'(T) = 1$. Además, $\mathcal{D} = \varphi_1(T) + \varphi_2'(T) = 2$. Así, $\varphi_1(T) = \varphi_2(T) = 1$ y, por lo tanto, $R(A - I) = 0$. Se aplica entonces (i) del Teorema 1.5. Dado que $\rho_1 = \rho_2 = 1$, los exponentes característicos θ_1 y θ_2 son ambos cero y tenemos simplemente

$$\psi_1(x) = p_1(x) \quad , \quad \psi_2(x) = p_2(x),$$

donde p_1 y p_2 tienen periodo T . Notar que, en este caso, podemos concluir que todas las soluciones tienen periodo T .

Caso 4.2. $\varphi_2(T)$ y $\varphi_1'(T)$ no ambos cero. Aquí, $R(A - I) \neq 0$ y se aplica (ii) del Teorema 1.5, nuevamente con $\theta = 0$. Así,

$$\psi_1(x) = p_1(x) \quad y \quad \psi_2(x) = x p_1(x) + p_2(x),$$

con p_1 y p_2 de periodo T .

Caso 5. $\mathcal{D} = -2$. De (1.2.4), $\rho_1 = \rho_2 = -1$. Consideraremos los mismos subcasos que antes.

Caso 5.1: $\varphi_2(T) = \varphi_1'(T) = 0$. Tenemos $R(A + I) = 0$ y, de (i) del Teorema 1.5 con $\theta_1 = \theta_2 = \frac{i\pi}{T}$,

$$\psi_1(x) = e^{\frac{i\pi}{T}} p_1(x) \quad y \quad \psi_2(x) = e^{\frac{i\pi}{T}} p_2(x), \quad (1.2.10)$$

donde p_1 y p_2 tienen periodo T . Notemos que, de (1.2.10), $\psi_i(x + T) = -\psi_i(x)$, $i = 1, 2$. Luego, toda solución de (1.2.1) satisface

$$\psi(x + T) = \psi(x).$$

Caso 5.2. $\varphi_2(T)$ y $\varphi_1'(T)$ no ambos cero. Aquí, $R(A + I) \neq 0$ y, de (ii) del Teorema 1.5, con $m = \frac{i\pi}{T}$. Así,

$$\psi_1(x) = P_1(x) \quad y \quad \psi_2(x) = x P_1(x) + P_2(x),$$

con $P_k = e^{\frac{i\pi}{T}} p_k$, $k = 1, 2$. Observemos que P_k es tal que $P_k(x + T) = -P_k(x)$.

Una función f con la propiedad $f(x + T) = -f(x)$ para todo x , se dice *semi-periódica*, con semi-periodo T . Claramente, tal función tiene periodo $2T$.

Proposición 1.7. *Si las funciones P y Q de la ecuación (1.2.1) satisfacen la siguiente relación de simetría:*

$$P(T - x) = P(x) \quad y \quad Q(T - x) = Q(x), \quad (1.2.11)$$

entonces se cumple

$$\varphi_2'(T) = \varphi_1(T) \quad y \quad (1.2.12)$$

$$\mathcal{D} = 2\varphi_1(T) \quad (1.2.13)$$

DEMOSTRACIÓN. Notemos que, gracias a (1.2.11), $\varphi_1(T - t)$ y $\varphi_2(T - t)$ son soluciones de (1.2.1) y, por lo tanto, se pueden escribir como combinación lineal de φ_1 y φ_2 como sigue

$$\varphi_1(T - t) = \varphi_1(T)\varphi_1(t) - \varphi_1'(T)\varphi_2(t) \quad (1.2.14)$$

$$\varphi_2(T - t) = \varphi_2(T)\varphi_1(t) - \varphi_2'(T)\varphi_2(t). \quad (1.2.15)$$

Si hacemos $t = T$ en la ecuación (1.2.14) y derivamos la ecuación (1.2.15) para luego evaluarla en $t = T$, se tiene

$$\begin{aligned} 1 &= \varphi_1(T)^2 - \varphi_1'(T)\varphi_2(T) \\ -1 &= \varphi_2(T)\varphi_1'(T) - \varphi_2'(T)^2, \end{aligned}$$

es decir,

$$\varphi_1'(T)\varphi_2(T) = \varphi_1(T)^2 - 1 \quad (1.2.16)$$

$$\varphi_1'(T)\varphi_2(T) = \varphi_2'(T)^2 - 1. \quad (1.2.17)$$

Pero de (1.2.3), sabemos que

$$W(\varphi_1, \varphi_2)(T) := \varphi_1(T)\varphi_2'(T) - \varphi_1'(T)\varphi_2(T) = 1. \quad (1.2.18)$$

Luego, reemplazando (1.2.16) y (1.2.17) en (1.2.18), se tiene

$$\begin{aligned} \varphi_1(T)\varphi_2'(T) - \varphi_1(T)^2 &= \varphi_1(T)(\varphi_2'(T) - \varphi_1(T)) = 0 \\ \varphi_1(T)\varphi_2'(T) - \varphi_2'(T)^2 &= \varphi_2'(T)(\varphi_2'(T) - \varphi_1(T)) = 0. \end{aligned}$$

Restando estas dos últimas ecuaciones, llegamos finalmente a la expresión

$$(\varphi_2'(T) - \varphi_1(T))^2 = 0$$

y podemos concluir (1.2.12). Con esto, de (1.2.6), se tiene además que

$$\mathcal{D} = 2\varphi_1(T),$$

es decir, (1.2.13). □

1.2.1. Acotación y periodicidad de las soluciones

Teorema 1.8. (i) Si $|\mathcal{D}| < 2$, todas las soluciones de (1.2.1) están acotadas en $(-\infty, \infty)$.

(ii) Si $|\mathcal{D}| > 2$, todas las soluciones no triviales de (1.2.1) son no-acotadas en $(-\infty, \infty)$.

DEMOSTRACIÓN. Si $|\mathcal{D}| < 2$, estamos en el Caso 3 anterior y (1.2.9). Así, $|\psi_i(x)| = |p_i(x)|$ para todo x , $i = 1, 2$. Dado que p_1 y p_2 son periódicas, están acotadas en $(-\infty, \infty)$. Luego, ψ_1 y ψ_2 están acotadas en $(-\infty, \infty)$ y, por lo tanto, también todas sus combinaciones lineales.

Si $\mathcal{D} > 2$, estamos en el Caso 1 y (1.2.8). Es claro que toda combinación lineal no trivial de $\psi_1(x)$ y $\psi_2(x)$ es no-acotada cuando $x \rightarrow \infty$ o cuando $x \rightarrow -\infty$ (o ambos).

El argumento para $\mathcal{D} < -2$ (Caso 2) es similar. □

Definición 1.9. La ecuación (1.2.1) se dice

- estable si todas sus soluciones son acotadas en $(-\infty, \infty)$.
- condicionalmente estable si hay una solución no-trivial que es acotada en $(-\infty, \infty)$.
- inestable si toda solución no trivial está no-acotada en $(-\infty, \infty)$.

Así, una ecuación que no es estable es condicionalmente estable y puede o no ser estable.

Del Teorema 1.8 , la ecuación (1.2.1) es estable si $|\mathcal{D}| < 2$ y es inestable si $|\mathcal{D}| > 2$. Dado que las funciones periódicas y semi-periódicas están acotadas en $(-\infty, \infty)$, los casos 4.1 y 5.1 muestran que (1.2.1) es también estable si $|\mathcal{D}| = 2$ y $\varphi_1'(T) = \varphi_2(T) = 0$. Finalmente, si $|\mathcal{D}| = 2$ y $\varphi_1'(T)$ y $\varphi_2(T)$ no son ambas cero, los casos 4.2 y 5.2 muestran que (1.2.1) es condicionalmente estable, pero no estable.

De los casos 4 y 5 anteriores, tenemos el siguiente teorema de existencia de soluciones periódicas y semi-periódicas de (1.2.1).

Teorema 1.10. *La ecuación (1.2.1) tiene soluciones no triviales con periodo T si y sólo si $\mathcal{D} = 2$, y con semi-periodo T si y sólo si $\mathcal{D} = -2$.*

Toda solución de (1.2.1) tiene periodo T o semi-periodo T si y sólo si, además, $\varphi_1'(T) = \varphi_2(T) = 0$.

1.2.2. Sistemas de ecuaciones diferenciales

La teoría de Floquet de la Sección 1.1 se puede extender a sistemas lineales

$$u'(x) = C(x)u(x), \quad (1.2.19)$$

donde C es una matriz de orden $n \times n$ a valores complejos, continua por tramos y tal que

$$C(x + T) = C(x),$$

con T constante diferente de cero.

En esta sección, las funciones denotadas con letras minúsculas serán funciones vectoriales con n componentes, mientras que las letras mayúsculas denotarán matrices.

Teorema 1.11. *Existe una constante no nula ρ y una solución no trivial ψ de (1.2.19) tal que*

$$\psi(x + T) = \rho\psi(x). \quad (1.2.20)$$

DEMOSTRACIÓN. Es análoga a la del Teorema 1.1. Sea φ la matriz fundamental (ver Observación 1.4) de soluciones de (1.2.19) tal que

$$\varphi(0) = I, \quad (1.2.21)$$

donde I denota la matriz identidad de orden $n \times n$.

Dado que $\varphi(x + T)$ es también una matriz fundamental de soluciones de (1.2.19), existe una matriz A constante y no singular tal que

$$\varphi(x + T) = \varphi(x) A. \quad (1.2.22)$$

Toda solución ψ de (1.2.19) tiene la forma

$$\psi(x) = \varphi(x)c,$$

donde c es un vector constante.

De (1.2.22), se tiene (1.2.20) si

$$Ac = \rho c.$$

Esta ecuación tiene solución para c distinto de cero si

$$\det(A - \rho I) = 0. \tag{1.2.23}$$

Este es un polinomio de grado n para ρ y se satisface para al menos un valor de ρ , que es diferente de cero ya que A es no singular. Queda así demostrado el Teorema 1.11. \square

1.2.3. Intervalos de estabilidad y de inestabilidad

La teoría de las secciones 1.2 y 1.2.1 toma un nuevo sentido cuando Q involucra un nuevo parámetro λ de la forma

$$Q(x) = \lambda w(x) - V(x)$$

donde w y V son continuas por partes, tienen periodo T y existe una constante $w_0 > 0$ tal que $w \geq w_0$.

Si escribimos p en lugar de P , (1.2.1) es ahora

$$(p(x)u'(x))' + (\lambda w(x) - V(x))u(x) = 0. \tag{1.2.24}$$

Para señalar la dependencia de λ en la ecuación (1.2.24), escribiremos sus soluciones que satisfacen la condiciones iniciales (1.1.3) como

$$\varphi_1(\cdot; \lambda) \quad \text{y} \quad \varphi_2(\cdot; \lambda). \tag{1.2.25}$$

Así, de (1.2.6), definimos el discriminante como

$$\mathcal{D}(\lambda) = \varphi_1(T; \lambda) + \varphi_2'(T; \lambda). \tag{1.2.26}$$

Aunque el parámetro λ aquí es considerado real, a veces es necesario permitir que sea complejo. Sin importar si λ es real o complejo, $\varphi_1(\cdot; \lambda)$, $\varphi_2(\cdot; \lambda)$ y sus derivadas en x son, para x fijo, funciones analíticas en λ . Por ende, de (1.2.26), $\mathcal{D}(\lambda)$ es una función analítica de λ . A menos que se establezca lo contrario, λ será considerado como un real.

Ya que, en particular, $\mathcal{D}(\lambda)$ es una función continua de λ , los valores de λ tales que $|\mathcal{D}(\lambda)| < 2$ forman un conjunto abierto en \mathbb{R} . Este conjunto, que veremos es no vacío, puede ser expresado

como la unión de una colección contable de intervalos abiertos disjuntos. Así, por parte (ii) del Teorema 1.8, la ecuación (1.2.24) es estable cuando λ está en uno de estos intervalos, y por lo tanto los intervalos son llamados *intervalos de estabilidad* de (1.2.24). Similarmente, los intervalos tales que $|\mathcal{D}(\lambda)| > 2$ son llamados *intervalos de inestabilidad* de (1.2.24). Finalmente, los intervalos formados por la clausura de intervalos de estabilidad son, como veremos, aquellos en los que $\mathcal{D}(\lambda) \leq 2$ y son llamados *intervalos de estabilidad condicional* de (1.2.24).

1.2.4. Problemas periódicos y semi-periódicos de valores propios

Introduciremos aquí dos problemas de valores propios asociados a (1.2.24) y el intervalo $[0, T]$. El parámetro λ es considerado como el valor propio.

Problema 1: Consideremos el problema periódico de valores propios que consta de la ecuación (1.2.24) considerada en $[0, T]$, con las condiciones de borde periódicas

$$u(T) = u(0), \quad u'(T) = u'(0). \quad (1.2.27)$$

Este es un problema autoadjunto y la existencia de infinitos contables valores propios puede ser establecida por el método estándar de construcción de una función de Green y definiendo un operador lineal simétrico compacto en un espacio con producto interior. Aquí, es el espacio funcional $L^2([0, T])$ con el producto interior:

$$(f_1, f_2) = \int_0^T f_1(x) \overline{f_2(x)} w(x) dx.$$

Denotaremos las funciones propias por ψ_n y los valores propios por α_n , $n = 0, 1, \dots$, donde

$$\alpha_0 \leq \alpha_1 \leq \alpha_2 \leq \dots, \quad \text{y} \quad \alpha_n \rightarrow \infty \text{ cuando } n \rightarrow \infty.$$

Todo valor propio doble es contado dos veces. Las funciones ψ_n pueden ser elegidas entonces de manera que sean a valores reales y formen un conjunto ortonormal sobre $[0, T]$ con función peso w . Así,

$$\int_0^T \psi_m(x) \psi_n(x) w(x) dx = \begin{cases} 1, & m = n \\ 0, & m \neq n \end{cases}$$

De (1.2.27), las funciones ψ_n pueden ser extendidas a todo \mathbb{R} como funciones continuamente diferenciables con periodo T . Por lo tanto, los α_n son los valores de λ para los que (1.2.24) tiene una solución no trivial con periodo T . Además, los valores propios dobles (si hay) son los valores de λ para los cuales toda solución de (1.2.24) tienen periodo T . Del Caso 4 de la Sección 1.2 sigue que los α_n son ceros de la función $\mathcal{D}(\lambda) - 2$ y que un α_n dado es un valor propio doble si y sólo si

$$\varphi_2(T, \alpha_n) = \varphi_1'(T, \alpha_n) = 0.$$

Problema 2: Consideremos el problema semi-periódico de valores propios que consta de la ecuación (1.2.24) considerada en $[0, T]$, con las condiciones de borde semi-periódicas

$$u(T) = -u(0), \quad u'(T) = -u'(0). \quad (1.2.28)$$

Este también es un problema autoadjunto. Denotaremos sus funciones propias como ξ_n y sus correspondientes valores propios como β_n , $n = 0, 1, \dots$, donde

$$\beta_0 \leq \beta_1 \leq \beta_2 \leq \dots, \quad \text{y } \beta_n \rightarrow \infty \text{ cuando } n \rightarrow \infty.$$

Nuevamente, todo valor propio doble es contado dos veces y las funciones ξ_n pueden ser escogidas de manera que sean a valores reales y formen un conjunto ortonormal sobre $[0, T]$ con función peso w .

De (1.2.28), las ξ_n pueden ser extendidas a todo \mathbb{R} como funciones continuamente diferenciables con semi-periodo T . Por lo tanto, los β_n son los valores de λ para los que (1.2.24) tiene una solución no trivial con semi-periodo T . Además, los valores propios dobles (si hay) son los valores de λ para los cuales toda solución de (1.2.24) tienen semi-periodo T . Del Caso 5 de la Sección 1.2 sigue que los β_n son ceros de la función $\mathcal{D}(\lambda) + 2$ y que $\beta_n \in \mathbb{R}$ es un valor propio doble si y sólo si

$$\varphi_2(T, \beta_n) = \varphi_1'(T, \beta_n) = 0. \quad (1.2.29)$$

1.2.5. La función $\mathcal{D}(\lambda)$

Ahora usaremos la existencia de los valores propios α_n y β_n del *Problema 1* y del *Problema 2* de la Sección 1.2.4 para examinar la función $\mathcal{D}(\lambda)$.

Teorema 1.12. *Con la notación señalada anteriormente, se tiene*

(i) *Los números α_n y β_n están ordenados:*

$$\dots < \alpha_0 < \beta_0 \leq \beta_1 < \alpha_1 \leq \alpha_2 < \beta_2 \leq \beta_3 < \alpha_3 \leq \alpha_4 < \dots. \quad (1.2.30)$$

(ii) *En los intervalos $[\alpha_{2m}, \beta_{2m}]$, $\mathcal{D}(\lambda)$ decrece de 2 a -2 .*

(iii) *En los intervalos $[\beta_{2m+1}, \alpha_{2m+1}]$, $\mathcal{D}(\lambda)$ crece de -2 a 2.*

(iv) *En los intervalos $(-\infty, \alpha_0)$ y $(\alpha_{2m+1}, \alpha_{2m+2})$, $\mathcal{D}(\lambda) > 2$.*

(v) *En los intervalos $(\beta_{2m}, \beta_{2m+1})$, $\mathcal{D}(\lambda) < -2$.*

DEMOSTRACIÓN. Haremos la demostración en diferentes etapas.

(a) Existe un número $\mathcal{D}(\lambda) > 2$, para todo $\lambda \leq \Lambda$.

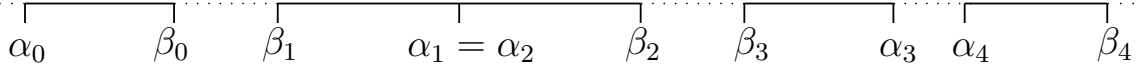


Fig. 1.1: Los números α_n y β_n ordenados en intervalos estables e inestables.

Ya que $w(x) \geq w_0 > 0$, podemos escoger Λ , negativa si es necesario, tal que

$$V(x) - \Lambda w(x) > 0 \quad (1.2.31)$$

en $(-\infty, \infty)$.

Sea u cualquier solución no trivial de (1.2.24) tal que $u(0) \geq 0$ y $u'(0) \geq 0$. Entonces existe un intervalo $(0, \delta)$ en el que u es mayor que cero.

Ahora consideremos un intervalo $(0, X)$ en el que $u > 0$. En $(0, X)$, tenemos

$$(p(x)u'(x))' = (V(x) - \lambda w(x))u(x) > 0$$

para todo $\lambda \leq \Lambda$, por (1.2.31). Así, pu' es creciente en $(0, X)$. De aquí, $u' > 0$ en $(0, X)$ y, por lo tanto, u es creciente en $(0, X)$. Sigue que u no tiene un cero en $x = X$ en $(0, \infty)$. Luego, pu' y u son crecientes en $(0, \infty)$. En particular,

$$\varphi_1(T; \lambda) > \varphi_2(0; \lambda) = 1 \quad \text{y} \quad \varphi_2'(T; \lambda) > \varphi_2'(0; \lambda) = 1,$$

dado que $a(T) = a(0)$.

Así, $\mathcal{D}(\lambda) > 2$, para todo $\lambda \leq \Lambda$.

(b) $\mathcal{D}'(\lambda)$ es diferente de cero para valores de λ tales que $|\mathcal{D}(\lambda)| < 2$.

Si derivamos (1.2.24) con respecto a λ , poniendo $u = \varphi_1(\cdot; \lambda)$, obtenemos

$$\frac{d}{dx}p(x) \frac{d}{dx} \left(\frac{\partial \varphi_1}{\partial \lambda}(x; \lambda) \right) + (\lambda w(x) - V(x)) \frac{\partial \varphi_1}{\partial \lambda}(x; \lambda) = -w(x) \varphi_1(x; \lambda). \quad (1.2.32)$$

Además, de (1.1.3) para $\varphi_1(\cdot; \lambda)$,

$$\frac{\partial \varphi_1}{\partial \lambda}(0; \lambda) = \frac{d}{dx} \left(\frac{\partial \varphi_1}{\partial \lambda}(0; \lambda) \right) = 0. \quad (1.2.33)$$

De la variación de fórmulas constantes aplicada a (1.2.32) y (1.2.33),

$$\frac{\partial \varphi_1}{\partial \lambda}(x; \lambda) = (p(x))^{-1} \int_0^x [\varphi_1(x; \lambda) \varphi_2(t; \lambda) - \varphi_2(x; \lambda) \varphi_1(t; \lambda)] w(t) \varphi_1(t; \lambda) dt \quad (1.2.34)$$

pues $pW(\varphi_1, \varphi_2)$ es constante y vale $p(0)$.

Similarmente,

$$\frac{\partial \varphi_2}{\partial \lambda}(x; \lambda) = (p(x))^{-1} \int_0^x [\varphi_1(x; \lambda) \varphi_2(t; \lambda) - \varphi_2(x; \lambda) \varphi_1(t; \lambda)] w(t) \varphi_2(t; \lambda) dt \quad (1.2.35)$$

y derivando (1.2.35) con respecto a x ,

$$\frac{\partial \varphi_2'}{\partial \lambda}(x; \lambda) = (p(x))^{-1} \int_0^x [\varphi_1'(x; \lambda) \varphi_2(t; \lambda) - \varphi_2'(x; \lambda) \varphi_1(t; \lambda)] w(t) \varphi_2(t; \lambda) dt. \quad (1.2.36)$$

De esto junto a (1.2.34), podemos escribir

$$\mathcal{D}'(\lambda) = (p(0))^{-1} \int_0^T [\varphi_1' \varphi_2^2(t; \lambda) + (\varphi_1 - \varphi_2') \varphi_1(t; \lambda) \varphi_2(t; \lambda) - \varphi_2 \varphi_1^2(t; \lambda)] w(t) dt, \quad (1.2.37)$$

haciendo $x = T$. Aquí, $\varphi_i(T; \lambda) = \varphi_i$ y $\varphi_i'(T; \lambda) = \varphi_i'$, $i = 1, 2$.

Ya que $\varphi_1 \varphi_2' - \varphi_2 \varphi_1' = W(\varphi_1, \varphi_2)(T) = \frac{p(0)}{p(1)} = 1$, tenemos

$$\mathcal{D}^2(\lambda) = 4 + (\varphi_1 - \varphi_2')^2 + 4 \varphi_2 \varphi_1'.$$

Por lo tanto, (1.2.37) puede ser escrita como

$$\begin{aligned} 4 \varphi_2 p(0) \mathcal{D}'(\lambda) &= - \int_0^T [2\varphi_2 \varphi_1(t; \lambda) + (\varphi_1 - \varphi_2') \varphi_2(t; \lambda)]^2 w(t) dt \\ &\quad - (4 - \mathcal{D}^2(\lambda)) \int_0^T \varphi_2^2(t; \lambda) w(t) dt. \end{aligned} \quad (1.2.38)$$

Ahora, supongamos que $|\mathcal{D}(\lambda)| < 2$. Entonces, de (1.2.38), $\varphi_2 \mathcal{D}'(\lambda) < 0$ y, en particular, $\mathcal{D}'(\lambda) \neq 0$.

(c) En un cero α_n de $\mathcal{D}(\lambda) - 2$, $\mathcal{D}'(\alpha_n) = 0$ si y sólo si

$$\varphi_2(T, \alpha_n) = \varphi_1'(T, \alpha_n) = 0. \quad (1.2.39)$$

Además, si $\mathcal{D}'(\alpha_n) = 0$, entonces $\mathcal{D}''(\alpha_n) < 0$.

Si son válidas las ecuaciones (1.2.39), también tenemos

$$\varphi_1(T, \alpha_n) = \varphi_2'(T, \alpha_n) = 1, \quad (1.2.40)$$

como en el Caso 4.1 de la Sección 1.2. Entonces, de (1.2.37), $\mathcal{D}'(\alpha_n) = 0$.

Inversamente, si $\mathcal{D}(\alpha_n) = 0$, el primer integrando de la derecha de (1.2.38) es idénticamente cero. Dado que $\varphi_1(t; \lambda)$ y $\varphi_2(t; \lambda)$ son linealmente independientes, esto implica que $\varphi_2(T, \alpha_n) = 0$ y $\varphi_1(T, \alpha_n) = \varphi_2'(T, \alpha_n)$. Así, de (1.2.37), también tenemos que $\varphi_1'(T, \alpha_n) = 0$.

Para probar el resultado relacionado con $\mathcal{D}''(\alpha_n)$, derivamos (1.2.37) con respecto a λ para expresar $\mathcal{D}''(\lambda)$ en términos de λ -derivadas de φ_i y φ_i' , $i = 1, 2$. Luego, hacemos $\lambda = \alpha_n$ y reemplazamos las α_n -derivadas usando (1.2.34) y (1.2.35).

De (1.2.39) y (1.2.40), los cálculos nos dan la ecuación

$$\mathcal{D}''(\alpha_n) = 2(p(0))^{-2} \left[\left(\int_0^T \varphi_1(t, \alpha_n) \varphi_2(t, \alpha_n) w(t) dt \right)^2 - \int_0^T \varphi_1^2(t, \alpha_n) w(t) dt \int_0^T \varphi_2^2(t, \alpha_n) w(t) dt \right]$$

Así, por la desigualdad de Schwarz, $\mathcal{D}''(\alpha_n) \leq 0$. Además, la igualdad es descartada porque $\varphi_1(\cdot; \lambda)$ y $\varphi_2(\cdot; \lambda)$ son linealmente independientes.

Tenemos también un resultado correspondiente a (c) para los ceros β_n de $\mathcal{D}(\lambda) + 2$, la única diferencia es que si $\mathcal{D}'(\beta_n) = 0$, entonces $\mathcal{D}''(\beta_n) > 0$.

Hemos probado que un cero α_n de $\mathcal{D}(\lambda) - 2$ es de orden dos sólo si $\mathcal{D}(\lambda)$ alcanza un máximo en α_n , mientras que un cero β_n de $\mathcal{D}(\lambda) + 2$ es de orden dos sólo si $\mathcal{D}(\lambda)$ alcanza un mínimo en β_n .

(d) Usaremos los resultados anteriores (a)-(c) para determinar el comportamiento de $\mathcal{D}(\lambda)$ cuando λ crece de $-\infty$ a ∞ .

Cuando λ es grande y negativo, $\mathcal{D}(\lambda) > 2$ por (a). Así, como λ crece desde $-\infty$, $\mathcal{D}(\lambda)$ sigue siendo mayor que 2 hasta que λ alcanza el primer cero α_0 de $\mathcal{D}(\lambda) - 2$. Dado que $\mathcal{D}(\lambda)$ no tiene un máximo en α_0 , podemos concluir que α_0 es un cero simple de $\mathcal{D}(\lambda)$ y de esto sigue que $\mathcal{D}(\lambda) < 2$ inmediatamente a la derecha de α_0 . Entonces, cuando λ crece desde α_0 , por (b) $\mathcal{D}(\lambda)$ decrece hasta que λ alcanza el primer cero β_0 de $\mathcal{D}(\lambda) + 2$. Por lo tanto, $\mathcal{D}(\lambda) > 2$ en el intervalo $(-\infty, \alpha_0)$ y $\mathcal{D}(\lambda)$ decrece desde 2 a -2 en el intervalo (α_0, β_0) .

En general, β_0 será un cero simple de $\mathcal{D}(\lambda) + 2$ y entonces $\mathcal{D}(\lambda) < -2$ inmediatamente a la derecha de β_0 . Cuando λ crece desde β_0 , $\mathcal{D}(\lambda)$ permanece menor que -2 hasta que λ alcanza el siguiente cero β_1 de $\mathcal{D}(\lambda) + 2$. Ya que $\mathcal{D}(\lambda)$ no alcanza su mínimo en β_1 , tenemos que β_1 es un cero simple de $\mathcal{D}(\lambda) + 2$, y sigue que $\mathcal{D}(\lambda) > 2$ inmediatamente a la derecha de β_1 . Entonces, cuando λ crece desde β_1 , por (b) $\mathcal{D}(\lambda)$ crece hasta que λ alcanza el siguiente cero α_1 de $\mathcal{D}(\lambda) - 2$. Por lo tanto, $\mathcal{D}(\lambda) < -2$ en el intervalo (β_0, β_1) y $\mathcal{D}(\lambda)$ crece de -2 a 2 en el intervalo (β_1, α_1) .

En general, α_1 será un cero simple de $\mathcal{D}(\lambda) - 2$ y entonces $\mathcal{D}(\lambda) > 2$ inmediatamente a la derecha de α_1 . Cuando λ crece desde α_1 , $\mathcal{D}(\lambda)$ permanece más grande que 2 hasta que λ alcanza el siguiente cero α_2 de $\mathcal{D}(\lambda) - 2$.

El argumento usado arriba, comenzando con α_0 , puede ahora ser repetido comenzando con α_2 y lo mismo continuará repitiéndose cuando $\lambda \rightarrow \infty$.

Esto prueba (i)-(v), excepto cuando $\mathcal{D}(\lambda) \pm 2$ tiene ceros dobles.

Si, por ejemplo, β_0 es un cero doble de $\mathcal{D}(\lambda) + 2$, entonces $\mathcal{D}(\lambda) > -2$ inmediatamente a la derecha de β_0 y el análisis previo para $\mathcal{D}(\lambda)$ sigue siendo válido, con la diferencia que ahora el

intervalo (μ_0, μ_1) no es parte del argumento. Para probar (1.2.30) en esta situación, debemos ver que $\beta_0 = \beta_1$ o, en otras palabras, que β_0 es un valor propio doble en el problema semi-periódico. Este caso sigue inmediatamente de (1.2.29) y la correspondiente condición (1.2.39) para $\mathcal{D}(\lambda) + 2$. \square

El Teorema 1.12 establece que los intervalos de estabilidad de (1.2.24) son $(\alpha_{2m}, \beta_{2m})$ y $(\beta_{2m+1}, \alpha_{2m+1})$, y que los intervalos de estabilidad condicional son las clausuras de estos. Los intervalos de inestabilidad de (1.2.24) son $(-\infty, \alpha_0)$ junto con $(\beta_{2m}, \beta_{2m+1})$ y $(\alpha_{2m+1}, \alpha_{2m+2})$, pero omitiendo cualquier intervalo que desaparezca debido a que $\mathcal{D}(\lambda) \pm 2$ tiene un cero doble. Ningún intervalo de estabilidad estará ausente, ni tampoco el intervalo inestable $(-\infty, \alpha_0)$. Es conveniente llamar $(\beta_{2m}, \beta_{2m+1})$ y $(\alpha_{2m+1}, \alpha_{2m+2})$, sin importar que estén ausentes o no, a los $(2m + 1)$ -ésimos y $(2m + 2)$ -ésimos intervalos de inestabilidad, mientras que $(-\infty, \alpha_0)$ será llamado *intervalo de inestabilidad cero-ésimo*.

Notemos que la ausencia de un intervalo de inestabilidad significa que existe un valor λ para el que todas las soluciones de (1.2.24) tienen periodo T o semi-periodo T ; en otras palabras, la coexistencia de soluciones de (1.2.24) con periodo T o semi-periodo T ocurre para ese valor de λ .

Observación 1.13. *Si las funciones p , w y V de la ecuación (1.2.24) son simétricas, esto es*

$$p(T - x) = p(x), \quad w(T - x) = w(x) \quad \text{y} \quad V(T - x) = V(x), \quad \forall x \in \mathbb{R},$$

entonces, de 1.2.13, para $\phi_1(1; \lambda)$ definida en (1.2.25), se cumple

$$\varphi_1(1; \lambda) = \frac{1}{2}D(\lambda).$$

Así, podemos reescribir (ii)–(v) del Teorema 1.12 como

- *En los intervalos $[\alpha_{2m}, \beta_{2m}]$, $\varphi_1(1; \lambda)$ decrece de 1 a -1 .*
- *En los intervalos $[\beta_{2m+1}, \alpha_{2m+1}]$, $\varphi_1(1; \lambda)$ crece de -1 a 1.*
- *En los intervalos $(-\infty, \alpha_0)$ y $(\alpha_{2m+1}, \alpha_{2m+2})$, $\varphi_1(1; \lambda) > 1$.*
- *En los intervalos $(\beta_{2m}, \beta_{2m+1})$, $\varphi_1(1; \lambda) < -1$.*

Además, del Teorema 1.8,

- *Si $|\varphi_1(1; \lambda)| < 1$, todas las soluciones de (1.2.1) están acotadas en $(-\infty, \infty)$.*
- *Si $|\varphi_1(1; \lambda)| > 1$, todas las soluciones no triviales de (1.2.1) son no-acotadas en $(-\infty, \infty)$.*

Ejemplo 1.14. *Consideremos la Ecuación de Hill*

$$(p(x)u'(x))' + (\lambda - V(x))u(x) = 0, \tag{1.2.41}$$

con coeficientes 1-periódicos y continuos por tramos dados por

$$p(x) = \begin{cases} 1, & 0 \leq x < \frac{3}{10} \\ (\frac{1}{4})^2, & \frac{3}{10} \leq x \leq \frac{7}{10} \\ 1, & \frac{7}{10} < x \leq 1 \end{cases}, \quad V(x) = \begin{cases} 2, & 0 \leq x < \frac{3}{10} \\ 5, & \frac{3}{10} \leq x \leq \frac{7}{10} \\ 2, & \frac{7}{10} < x \leq 1 \end{cases}$$

Notar que $p(x) = p(1-x)$ y $V(x) = V(1-x)$, para todo $x \in \mathbb{R}$. Dependiendo del valor de λ , tendremos diferentes fórmulas para $\varphi_1(1; \lambda) = \frac{1}{2}D(\lambda)$, como se muestra a continuación (ver Figura 1.2).

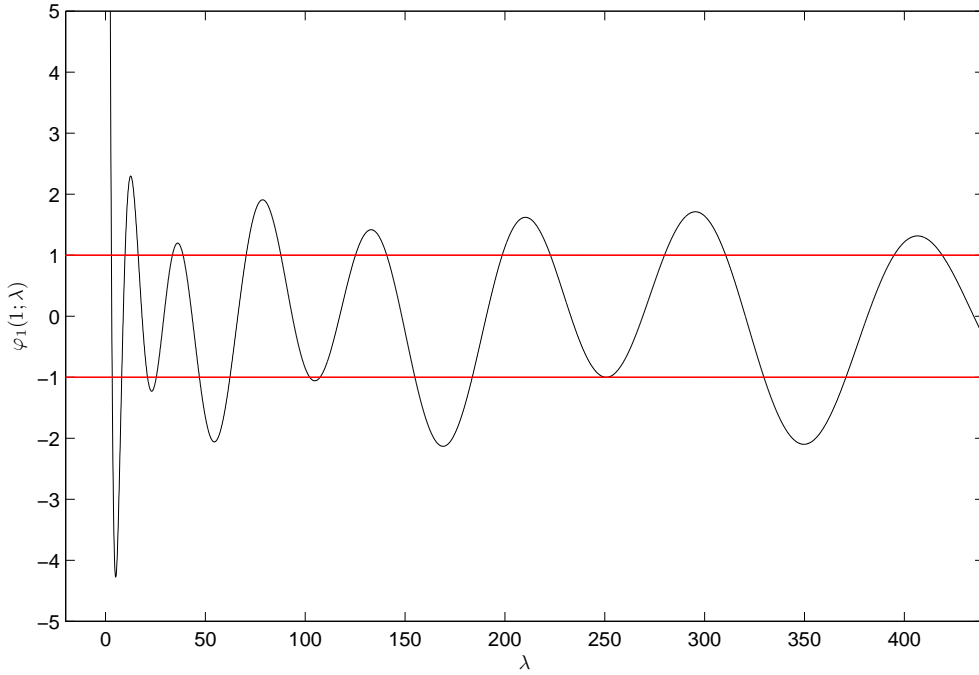


Fig. 1.2: La función $\varphi_1(1; \lambda) = \frac{1}{2}D(\lambda)$, para la ecuación (1.2.41).

- Si $\lambda < 2$,

$$\varphi_1(1; \lambda) = \cosh\left(\frac{8}{5}\omega_2\right) \cosh\left(\frac{3}{5}\omega_1\right) + \frac{1}{2}\left(\frac{\omega_2}{4\omega_1} + \frac{4\omega_1}{\omega_2}\right) \sinh\left(\frac{8}{5}\omega_2\right) \sinh\left(\frac{3}{5}\omega_1\right)$$

$$\text{con } \omega_1 = \sqrt{2-\lambda} \text{ y } \omega_2 = \sqrt{5-\lambda}.$$

- Si $\lambda = 2$,

$$\varphi_1(1; \lambda) = 1 \cosh\left(\frac{8}{5}\omega_2\right) + \frac{3}{40}\omega_2 \sinh\left(\frac{8}{5}\omega_2\right)$$

$$\text{con } \omega_2 = \sqrt{5-\lambda}.$$

- Si $2 < \lambda < 5$,

$$\varphi_1(1; \lambda) = \cosh\left(\frac{8}{5}\omega_2\right) \cos\left(\frac{3}{5}\omega_1\right) + \frac{1}{2}\left(\frac{\omega_2}{4\omega_1} - \frac{4\omega_1}{\omega_2}\right) \sinh\left(\frac{8}{5}\omega_2\right) \sin\left(\frac{3}{5}\omega_1\right)$$

$$\text{con } \omega_1 = \sqrt{\lambda - 2} \text{ y } \omega_2 = \sqrt{5 - \lambda}.$$

- Si $\lambda = 5$,

$$\varphi_1(1; \lambda) = \cos\left(\frac{3}{5}\omega_1\right) - \frac{16}{5}\omega_1 \sin\left(\frac{3}{5}\omega_1\right)$$

$$\text{con } \omega_1 = \sqrt{\lambda - 2}.$$

- Si $\lambda > 5$,

$$\varphi_1(1; \lambda) = \cos\left(\frac{8}{5}\omega_2\right) \cos\left(\frac{3}{5}\omega_1\right) - \frac{1}{2}\left(\frac{\omega_2}{4\omega_1} + \frac{4\omega_1}{\omega_2}\right) \sin\left(\frac{8}{5}\omega_2\right) \sin\left(\frac{3}{5}\omega_1\right)$$

$$\text{con } \omega_1 = \sqrt{\lambda - 2} \text{ y } \text{con } \omega_2 = \sqrt{\lambda - 5}.$$

1.3. Estructura de bandas en la Ecuación de Hill

Nos centraremos ahora en el resultado mostrado por Allaire y Orive en el artículo [3] para retomar el problema de encontrar intervalos de estabilidad e inestabilidad en una ecuación de Hill. Es sabido que los intervalos de estabilidad corresponden al espectro de Bloch [11, 17, 1, 18], lo que se propone en dicho artículo es caracterizar los intervalos de inestabilidad.

La clausura de cada intervalo de estabilidad es llamada *banda de Bloch*, mientras que los intervalos abiertos no vacíos entre dos bandas de Bloch son llamados *gaps* (huecos, espacios).

1.3.1. El espectro de Bloch

Consideremos la ecuación de Hill definida en (1.2.24) con $p \equiv w \equiv 1$, es decir

$$-u''(x) + V(x)u(x) = \lambda u(x). \quad (1.3.1)$$

Aquí, la función V es a valores reales, continua por tramos y de periodo $T = 1$. De la Sección (1.1), sabemos que (1.3.1) tiene una base de dos soluciones linealmente independientes, $\varphi_1(\cdot; \lambda)$ y $\varphi_2(\cdot; \lambda)$, que dependen de λ y satisfacen (1.1.3).

Recordemos también que el discriminante de (1.3.1) está definido en (1.2.6) como

$$\mathcal{D}(\lambda) = \varphi_1(1; \lambda) + \varphi_2'(1; \lambda).$$

Además, es posible clasificar la solución de (1.3.1): diremos que una solución es *estable* si es uniformemente acotada e *inestable* si es no acotada. Del Teorema 1.12, sabemos que existe una sucesión infinita contable $\{\alpha_n\}_{n \in \mathbb{N}}$ de raíces de $\mathcal{D}(\lambda) = 2$ y una sucesión finita contable $\{\beta_n\}_{n \in \mathbb{N}}$ de raíces de $\mathcal{D}(\lambda) = -2$ tales que

$$\cdots < \alpha_0 < \beta_0 \leq \beta_1 < \alpha_1 \leq \alpha_2 < \beta_2 \leq \beta_3 < \alpha_3 \leq \alpha_4 < \cdots$$

(ver Figura 1.1). Los intervalos abiertos disjuntos de la colección

$$] \alpha_0, \beta_0[,] \beta_1, \alpha_1[,] \alpha_2, \beta_2[,] \beta_3, \alpha_3[, \cdots$$

son llamados *intervalos de inestabilidad* de (1.3.1) y la unión

$$S =] \alpha_0, \beta_0[\cup] \beta_1, \alpha_1[\cup] \alpha_2, \beta_2[\cup] \beta_3, \alpha_3[\cup \cdots$$

es llamada *región de estabilidad*. Análogamente,

$$U =] -\infty, \alpha_0[\cup] \beta_0, \beta_1[\cup] \alpha_1, \alpha_2[\cup] \beta_2, \beta_3[\cup \cdots$$

es llamada *región de inestabilidad*. Por lo tanto, se tiene que $|\mathcal{D}(\lambda)| < 2$ para $\lambda \in S$, y $|\mathcal{D}(\lambda)| > 2$ para $\lambda \in U$.

De los casos 1, 2 y 3 analizados en la Sección 1.2, se tiene el siguiente teorema.

Teorema 1.15. (i) Para $\lambda \in U$, existe $\theta \in \mathbb{R} \setminus \{0\}$ tal que (1.3.1) tiene dos soluciones linealmente independientes del tipo $e^{\theta x} p_1(x)$ y $e^{-\theta x} p_2(x)$, con p_1, p_2 1-periódicas y multiplicadores característicos $\rho_1 = e^\theta$ y $\rho_2 = e^{-\theta}$; o bien, con p_1, p_2 semi-periódicas y multiplicadores característicos $\rho_1 = -e^\theta$ y $\rho_2 = -e^{-\theta}$.

(ii) Para $\lambda \in S$, existe $\theta \in]0, \pi[$, o bien $\theta \in]-\pi, 0[$, tal que (1.3.1) tiene dos soluciones linealmente independientes del tipo $e^{i\theta x} p_1(x)$ y $e^{-i\theta x} p_2(x)$, con p_1, p_2 1-periódicas y multiplicadores característicos $\rho_1 = e^{i\theta}$ y $\rho_2 = e^{-i\theta}$.

De los casos 4 y 5 de la Sección 1.2, podemos enunciar el siguiente teorema.

Teorema 1.16. (i) Si $\alpha_{2k+1} = \alpha_{2k+2}$, entonces para $\lambda = \alpha_{2k+1} = \alpha_{2k+2}$ la ecuación (1.3.1) tiene dos soluciones linealmente independientes p_1 y p_2 1-periódicas. Si $\alpha_{2k+1} < \alpha_{2k+2}$, entonces para $\lambda = \alpha_{2k+1}$ y para $\lambda = \alpha_{2k+2}$ la ecuación (1.3.1) tiene dos soluciones linealmente independientes del tipo $p_1(x)$ y $x p_1(x) + p_2(x)$, con p_1 y p_2 1-periódicas.

(ii) Si $\beta_{2k} = \beta_{2k+1}$, entonces para $\lambda = \beta_{2k} = \beta_{2k+1}$ la ecuación (1.3.1) tiene dos soluciones linealmente independientes p_1 y p_2 semi-periódicas. Si $\beta_{2k} < \beta_{2k+1}$, entonces para $\lambda = \beta_{2k}$ y para $\lambda = \beta_{2k+1}$ la ecuación (1.3.1) tiene dos soluciones linealmente independientes del tipo $p_1(x)$ y $x p_1(x) + p_2(x)$, con p_1 y p_2 semi-periódicas.

En esta sección, expondremos resultados clásicos de una teoría relacionada con la estructura de valores propios de la ecuación (1.3.1), conocida como *Teoría de Descomposición de Bloch* [1, 18]. Si consideramos (1.3.1) como un problema espectral de $L^2(\mathbb{R})$, es natural preguntarse cuál es su espectro y tratar de definirlo. Para este fin, consideremos el siguiente problema espectral de Bloch parametrizado por $\theta \in \mathbb{R}$:

$$\begin{cases} \text{Encontrar } \lambda = \lambda(\theta) \in \mathbb{R} \text{ y } \Psi = \Psi(x, \theta); \\ -\Psi''(x, \theta) + V(x)\Psi(x, \theta) = \lambda(\theta)\Psi(x, \theta) \text{ en } \mathbb{R} \\ \Psi(x+1, \theta) = e^{i\theta}\Psi(x, \theta), \quad \forall x. \end{cases} \quad (1.3.2)$$

Es claro de (1.3.2) que la condición de periodicidad no se altera si reemplazamos θ por $\theta + m$, con $m \in \mathbb{Z}$, y por lo tanto, θ puede ser reducido a la celda dual $\theta \in Y' =]-\pi, \pi]$. Sabemos que para cada $\theta \in]-\pi, \pi]$, el problema espectral (1.3.2) admite una sucesión discreta de valores propios tal que

$$0 \leq \lambda_1(\theta) \leq \dots \leq \lambda_m(\theta) \leq \dots \rightarrow \infty,$$

para todo $m \geq 1$, $\lambda_m(\theta)$ es una función de Lipschitz de $\theta \in Y'$.

Podemos escribir $\Psi(x, \theta) = e^{i\theta x}\xi(x, \theta)$, con ξ 1-periódica en x . Así, (1.3.2) es equivalente a

$$\begin{cases} \text{Encontrar } \lambda = \lambda(\theta) \in \mathbb{R} \text{ y } \xi = \xi(x, \theta); \\ -\left(\frac{d}{dx} + i\theta\right)\left(\frac{d}{dx} + i\theta\right)\xi(x, \theta) + V(x)\xi(x, \theta) = \lambda(\theta)\xi(x, \theta) \text{ en } \mathbb{R} \\ \xi(x+1, \theta) = \xi(x, \theta), \quad \forall x. \end{cases} \quad (1.3.3)$$

Tomando el conjugado en (1.3.3), es claro que $\lambda_m(\theta) = \lambda_m(-\theta)$, $\forall m \geq 1$.

Definimos el *espectro de Bloch* como

$$\sigma_B = \{\lambda_m(\theta) : \theta \in Y', m \geq 1\} = \bigcup_{m \geq 1} \left[\min_{\theta \in Y'} \lambda_m(\theta), \max_{\theta \in Y'} \lambda_m(\theta) \right].$$

El siguiente resultado relaciona el espectro de Bloch con los intervalos de estabilidad de (1.3.1).

Proposición 1.17. *Para todo $k \geq 1$, $\alpha_k = \lambda_k(0)$, $\beta_k = \lambda_k(\pi)$ y*

$$\sigma_B = [\alpha_0, \beta_0] \cup [\beta_1, \alpha_1] \cup [\alpha_2, \beta_2] \cup [\beta_3, \alpha_3] \cup \dots$$

En particular,

- (i) $\lambda_{2k-1}(0)$ es el mínimo de $\lambda_{2k-1}(\theta)$, mientras que $\lambda_{2k-1}(\pi)$ es el máximo de $\lambda_{2k-1}(\theta)$.
- (ii) $\lambda_{2k}(0)$ es el máximo de $\lambda_{2k}(\theta)$, mientras que $\lambda_{2k}(\pi)$ es el mínimo de $\lambda_{2k}(\theta)$.

Esta proposición nos da una caracterización para las regiones estables S de la ecuación de Hill (1.3.1). La clausura de los intervalos de estabilidad son precisamente las llamadas *bandas de Bloch*, es decir,

$$[\alpha_m, \beta_m] = \left[\min_{\theta \in Y'} \lambda_m(\theta), \max_{\theta \in Y'} \lambda_m(\theta) \right].$$

Los intervalos abiertos no vacíos entre dos bandas de Bloch son llamados *gaps*. Su unión, junto con el intervalo abierto no acotado que pertenece a la primera banda de Bloch, es exactamente la región inestable U .

DEMOSTRACIÓN PROPOSICIÓN 1.17. Para $\theta = 0$, el par $(\lambda_m(0), \xi_m(x, 0))$ satisface (1.3.1), con $\lambda = \lambda_m(0)$ y $u(x) = \xi_m(x, 0)$. Notar que $\xi_m(\cdot, 0)$ es 1-periódica. Gracias a la parte (i) de Teorema 1.16, se tiene

$$\alpha_m = \lambda_m(0), \quad \forall m \geq 1.$$

Por otro lado, para $\theta = \pi$, el par $(\lambda_m(\pi), e^{i\pi x} \xi_m(x, \pi))$ satisface (1.3.1), con $\lambda = \lambda_m(\pi)$ y $u(x) = e^{i\pi x} \xi_m(x, \pi)$, que es semi-periódica. De (ii) del Teorema 1.16,

$$\beta_m = \lambda_m(\pi), \quad \forall m \geq 1.$$

Ahora, consideremos $\lambda \in]\alpha_{2k+1}, \beta_{2k+1}[$, $k \in \mathbb{N}$, un intervalo de estabilidad cualquiera. Para intervalos estables de la forma $]\beta_{2k}, \alpha_{2k}[$ el siguiente razonamiento es análogo. Gracias a (ii) del Teorema 1.15, existe $\theta \in]0, \pi[$, o bien $\theta \in]-\pi, 0[$, tal que (1.3.1) tiene dos soluciones linealmente independientes del tipo $e^{i\theta x} p_1(x)$ y $e^{-i\theta x} p_2(x)$, con p_1, p_2 1-periódicas. De aquí, p_1 y p_2 satisfacen (1.3.3) con $\lambda(\theta) = \lambda$ y $\lambda(-\theta) = \lambda$, respectivamente.

Así, como $\lambda_{2k+1}(0) = \alpha_{2k+1}$, $\lambda_{2k+1}(\pi) = \beta_{2k+1}$ y $\lambda_{2k+1}(\theta)$ es una función de Lipschitz de $\theta \in Y'$, se tiene

$$[\alpha_{2k+1}, \beta_{2k+1}] = \{\lambda_{2k+1}(\theta) : \theta \in Y'\}, \quad k = 0, 1, \dots$$

Análogamente, se tiene

$$[\beta_{2k}, \alpha_{2k}] = \{\lambda_{2k+1}(\theta) : \theta \in Y'\}, \quad k = 1, 2, \dots$$

□

1.3.2. El espectro exponencial

En esta sección, definiremos el espectro exponencial de la ecuación (1.3.1). Consideremos los siguientes problemas espectrales parametrizados por $\theta \in \mathbb{R}$.

$$\begin{cases} \text{Encontrar } \mu = \mu(\theta) \in \mathbb{R} \text{ y } \Psi = \Psi(x, \theta); \\ -\Psi''(x, \theta) + V(x)\Psi(x, \theta) = \mu(\theta)\Psi(x, \theta) \\ \Psi(x+1, \theta) = e^\theta \Psi(x, \theta), \quad \forall x. \end{cases} \quad (1.3.4)$$

$$\begin{cases} \text{Encontrar } \nu = \nu(\theta) \in \mathbb{R} \text{ y } \Psi = \Psi(x, \theta); \\ -\Psi''(x, \theta) + V(x)\Psi(x, \theta) = \nu(\theta)\Psi(x, \theta) \\ \Psi(x+1, \theta) = -e^\theta \Psi(x, \theta), \quad \forall x. \end{cases} \quad (1.3.5)$$

Haciendo $\Psi(x, \theta) = e^{\theta x} \xi(x, \theta)$, estos problemas son equivalentes a

$$\begin{cases} \text{Encontrar } \mu = \mu(\theta) \in \mathbb{C} \text{ y } \xi = \xi(x, \theta); \\ -\left(\frac{d}{dx} + \theta\right) \left(\frac{d}{dx} + \theta\right) \xi(x, \theta) + V(x)\xi(x, \theta) = \mu(\theta)\xi(x, \theta) \text{ en } \mathbb{R} \\ \xi(x+1, \theta) = \xi(x, \theta), \quad \forall x. \end{cases} \quad (1.3.6)$$

$$\begin{cases} \text{Encontrar } \nu = \nu(\theta) \in \mathbb{C} \text{ y } \Psi = \Psi(x, \theta); \\ -\left(\frac{d}{dx} + \theta\right) \left(\frac{d}{dx} + \theta\right) \xi(x, \theta) + V(x)\xi(x, \theta) = \nu(\theta)\xi(x, \theta) \text{ en } \mathbb{R} \\ \xi(x+1, \theta) = -\xi(x, \theta), \quad \forall x. \end{cases} \quad (1.3.7)$$

La existencia del primer valor propio del problema (1.3.6) está dada en el siguiente lema, cuya demostración está basada en el Teorema de Krein-Rutman.

Lema 1.18. *Para todo $\theta \in \mathbb{R}$, existe un primer valor propio minimal μ_0 de (1.3.6) que es real, simple y tal que*

$\theta \mapsto \mu_0(\theta)$ es analítica, cóncava y par

$$\lim_{\theta \rightarrow +\infty} \mu_0(\theta) = -\infty$$

$$\max_{\theta \in \mathbb{R}} \mu_0(\theta) = \mu_0(0) = \lambda_0(0) = \alpha_0.$$

Este resultado muestra que el primer intervalo inestable es $\{\mu_0(\theta) : \theta \in \mathbb{R} \setminus \{0\}\} =]-\infty, \alpha_0)$, que es así parte del espectro exponencial de (1.3.1).

Para continuar con la descripción de la estructura del espectro exponencial, usaremos el siguiente resultado de continuidad espectral.

Lema 1.19. *Sea $\{K_n\}_{n \geq 1}$ una sucesión de operadores compactos en un espacio de Hilbert H que converge uniformemente a un compacto K . Sea γ un contorno suave que encierra j valores propios de K (contando sus multiplicidades) y tal que todo $\lambda \in \gamma$ no pertenece al espectro de K . Entonces, existe n_0 tal que para todo $n \geq n_0$, γ contiene exactamente j valores propios de K_n .*

Gracias al Lema 1.19, es posible caracterizar los otros intervalos inestables de U , pues nos permite demostrar las siguientes proposiciones. Hay dos tipos diferentes de intervalos de inestabilidad: $(\beta_{2k}, \beta_{2k+1})$ y $(\alpha_{2k+1}, \alpha_{2k+2})$, para $k \geq 0$.

Proposición 1.20. *Supongamos $\beta_{2k} < \beta_{2k+1}$. Entonces existe $\theta_{2k,2k+1} > 0$ tal que, para $\theta \in] - \theta_{2k,2k+1}, \theta_{2k,2k+1}[$, existen $\nu_{2k}(\theta)$, $\nu_{2k+1}(\theta)$ valores propios reales y simples de (1.3.7) que satisfacen*

$\theta \mapsto \nu_{2k}(\theta), \nu_{2k+1}(\theta)$ son analíticas y pares

$\nu_{2k}(\theta), \nu_{2k+1}(\theta)$ son estrictamente monótonas en $[0, \theta_{2k,2k+1}]$

$$\min_{\theta \in [0, \theta_{2k,2k+1}]} \nu_{2k}(\theta) = \nu_{2k}(0) = \lambda_{2k}(\pi) = \beta_{2k}$$

$$\max_{\theta \in [0, \theta_{2k,2k+1}]} \nu_{2k+1}(\theta) = \nu_{2k+1}(0) = \lambda_{2k+1}(\pi) = \beta_{2k+1}$$

$$\lim_{|\theta| \rightarrow \theta_{2k,2k+1}} \nu_{2k}(\theta) = \lim_{|\theta| \rightarrow \theta_{2k,2k+1}} \nu_{2k+1}(\theta) = \nu_{2k,2k+1}$$

$$\{\nu_{2k}(\theta) : \theta \in [0, \theta_{2k,2k+1}]\} = [b_{2k}, \nu_{2k,2k+1}]$$

$$\{\nu_{2k+1}(\theta) : \theta \in [0, \theta_{2k,2k+1}]\} = [\nu_{2k,2k+1}, b_{2k+1}].$$

Observación 1.21. $\beta_{2k} < \beta_{2k+1}$ significa que hay un gap en el espectro. Cuando $\beta_{2k} = \beta_{2k+1}$, es decir, no hay gap aquí, extendemos la notación de la Proposición 1.20 haciendo $\theta_{2k,2k+1} = 0$.

Proposición 1.22. *Supongamos $\alpha_{2k+1} < \alpha_{2k+2}$. Entonces existe $\theta_{2k+1,2k+2} > 0$ tal que, para $\theta \in] - \theta_{2k+1,2k+2}, \theta_{2k+1,2k+2}[$, existen $\mu_{2k+1}(\theta)$, $\mu_{2k+2}(\theta)$ valores propios reales y simples de (1.3.6) que satisfacen*

$\theta \mapsto \mu_{2k+1}(\theta), \mu_{2k+2}(\theta)$ son analíticas y pares

$\mu_{2k+1}(\theta), \mu_{2k+2}(\theta)$ son estrictamente monótonas en $[0, \theta_{2k+1,2k+2}]$

$$\min_{\theta \in [0, \theta_{2k+1,2k+2}]} \mu_{2k+1}(\theta) = \mu_{2k+1}(0) = \lambda_{2k+1}(\pi) = \alpha_{2k+1}$$

$$\max_{\theta \in [0, \theta_{2k+1,2k+2}]} \mu_{2k+2}(\theta) = \mu_{2k+2}(0) = \lambda_{2k+2}(\pi) = \alpha_{2k+2}$$

$$\lim_{|\theta| \rightarrow \theta_{2k+1,2k+2}} \mu_{2k+1}(\theta) = \lim_{|\theta| \rightarrow \theta_{2k+1,2k+2}} \mu_{2k+2}(\theta) = \mu_{2k+1,2k+2}$$

$$\{\mu_{2k+1}(\theta) : \theta \in [0, \theta_{2k+1,2k+2}]\} = [a_{2k+1}, \mu_{2k+1,2k+2}]$$

$$\{\mu_{2k+2}(\theta) : \theta \in [0, \theta_{2k+1,2k+2}]\} = [\mu_{2k+1,2k+2}, a_{2k+2}].$$

Observación 1.23. Si $\alpha_{2k+1} = \alpha_{2k+2}$, es decir, no hay gap aquí, extendemos la notación de la Proposición 1.22 haciendo $\theta_{2k+1,2k+2} = 0$.

DEMOSTRACIÓN PROPOSICIÓN 1.22. (la demostración de la Proposición 1.20 es similar). Estudiaremos primero el problema de valores propios (1.3.6) con $\theta = 0$. Gracias a la parte (i) del Teorema 1.16, el problema (1.3.6) con $\theta = 0$ tiene sólo dos valores propios reales simples en $[\alpha_{2k+1}, \alpha_{2k+2}]$, a saber α_{2k+1} y α_{2k+2} , que denotaremos $\mu_{2k+1}(0)$ y $\mu_{2k+2}(0)$, respectivamente.

Aplicando el Lema 1.19 en una vecindad de $\theta = 0$, el problema (1.3.6) admite un único valor propio simple $\mu_{2k+1}(\theta)$ cerca de $\mu_{2k+1}(0) = \alpha_{2k+1}$. Similarmente, el problema (1.3.6) admite un único valor propio simple $\mu_{2k+2}(\theta)$ cerca de $\mu_{2k+2}(0) = \alpha_{2k+2}$. Si estos valores propios fueran no reales, dado que el problema (1.3.6) tiene coeficientes reales, ellos irán en pares conjugados, $\overline{\mu_{2k+1}(\theta)} \neq \mu_{2k+1}(\theta)$ o $\overline{\mu_{2k+2}(\theta)} \neq \mu_{2k+2}(\theta)$, lo que es una contradicción, pues el Lema 1.19 implica que hay sólo valores propios de (1.3.6) cerca de $\mu_{2k+1}(0)$ o $\mu_{2k+2}(0)$. Así, $\mu_{2k+1}(\theta)$ y $\mu_{2k+2}(\theta)$ son reales y simples para θ cerca de cero.

Gracias a la teoría de perturbación de valores propios en un espacio finito dimensional, los valores propios simples son funciones de θ analíticas. De la parte (i) del Teorema 1.15, es inmediato que $\mu_{2k+1}(\theta) = \mu_{2k+1}(-\theta)$ y $\mu_{2k+2}(\theta) = \mu_{2k+2}(-\theta)$. Además, $\theta \mapsto \mu_{2k+1}(\theta), \mu_{2k+2}(\theta)$ son estrictamente monótonas para $\theta > 0$ o $\theta < 0$, pues de otro modo habríamos obtenido dos valores diferentes θ y $\hat{\theta}$ (del mismo signo) dando el mismo valor propio $\lambda \in]\alpha_{2k+1}, \alpha_{2k+2}[$, lo que es imposible por (i) del Teorema 1.15.

Ahora podemos continuar este argumento de perturbación para valores de θ más grandes hasta que los valores propios $\mu_{2k+1}(\theta)$ y $\mu_{2k+2}(\theta)$ permanezcan simples y reales. La única posibilidad de un cambio en sus multiplicidades es cuando son iguales. Más precisamente, probemos que

$$\{\mu_{2k+1}(\theta) : \theta > 0\} \cup \{\mu_{2k+2}(\theta) : \theta > 0\} =]\alpha_{2k+1}, \alpha_{2k+2}[.$$

Definimos $\theta_{2k+1} = \max\{\theta : \text{existe } \mu_{2k+1}(\theta) \in \mathbb{R}\}$, que satisface $\theta_{2k+1} > 0$, y análogamente definimos $\theta_{2k+2} > 0$. No podemos tener $\mu_{2k+1}(\theta_{2k+1}) < \mu_{2k+2}(\theta_{2k+2})$, pues, para todo $\lambda \in ((\mu_{2k+1}(\theta_{2k+1}), \mu_{2k+2}(\theta_{2k+2}))$, la parte (i) del Teorema 1.15 implica la existencia de $\theta > 0$ tal que $\lambda = \mu_{2k+1}(\theta)$ o $\lambda = \mu_{2k+2}(\theta)$, lo que es una contradicción con la definición de θ_{2k+1} o θ_{2k+2} .

Así, $\mu_{2k+1}(\theta_{2k+1}) = \mu_{2k+2}(\theta_{2k+2})$, y por unicidad del exponente $\theta > 0$ en (i) del Teorema 1.15, también tenemos $\theta_{2k+1} = \theta_{2k+2} < \infty$. Denotamos su valor común por $\theta_{2k+1,2k+2} = \theta_{2k+1} = \theta_{2k+2}$. \square

Como consecuencia de los resultados de la Sección 1.3.1, del Lema 1.18 y de las Proposiciones 1.20 y 1.22, se obtiene el siguiente resultado.

Teorema 1.24 (Caracterización del Espectro Exponencial). *Si σ_e denota el espectro exponencial y σ_B el espectro de Bloch, entonces tenemos*

$$\mathbb{R} = \sigma_B \cup \sigma_e \quad y \quad \sigma_B \cap \sigma_e = \bigcup_{i=0}^{+\infty} \{\alpha_i\} \cup \{\beta_i\},$$

y usando la notación de las Proposiciones 1.20 y 1.22 anteriores,

$$\sigma_e = \{\mu_0(\theta) : \theta \in \mathbb{R}\} \cup \{\mu_{2k+1}(\theta), \mu_{2k+2}(\theta) : \theta \in [0, \theta_{2k+1,2k+2}]\} \cup \{\nu_{2k}(\theta), \nu_{2k+1}(\theta) : \theta \in [0, \theta_{2k,2k+1}]\}.$$

Corolario 1.25. Sean u solución de la ecuación (1.3.1) y $\varphi_1(\cdot; \lambda)$ la función definida en (1.2.25). Entonces existen tres conjuntos, \mathfrak{A} , \mathfrak{B} y \mathfrak{C} , tales que

$$\lambda \in \mathfrak{A} \Leftrightarrow |\varphi_1(t; \lambda)| \leq 1, \quad \forall t \in \mathbb{R} \quad (1.3.8)$$

$$\lambda \in \mathfrak{B} \Leftrightarrow \varphi_1(t; \lambda) > 1, \quad \forall t \in \mathbb{R} \quad (1.3.9)$$

$$\lambda \in \mathfrak{C} \Leftrightarrow \varphi_1(t; \lambda) < -1, \quad \forall t \in \mathbb{R} \quad (1.3.10)$$

DEMOSTRACIÓN. De la Proposición 1.17, se tiene que existe un conjunto \mathfrak{A} tal que

$$\mathfrak{A} = \bigcup_{\theta \in (-\pi, \pi)^*} \{\lambda_i(\theta) : i \in \mathbb{N}\} = [\alpha_0, \beta_0] \cup [\beta_1, \alpha_1] \cup [\alpha_2, \beta_2] \cup [\beta_3, \alpha_3] \cup \dots$$

De (1.2.7) y de la parte (ii) del Teorema 1.15, el discriminante $\mathcal{D}(\lambda) = e^{i\theta} + e^{-i\theta} = 2 \cos \theta$. Así, usando (1.2.13), es posible escribir $\varphi_1(1; \lambda) = \cos \theta$ y se tiene (1.3.8).

Por otro lado, del Teorema 1.24 existen dos conjuntos \mathfrak{B} y \mathfrak{C} tales que

$$\begin{aligned} \mathfrak{B} &= \bigcup_{\theta \geq 0} \{\mu_i(\theta) : i \in \mathbb{N}\} = \{\mu_0(\theta) : \theta \in \mathbb{R}\} \cup \{\mu_{2k+1}(\theta), \mu_{2k+2}(\theta) : \theta \in [0, \theta_{2k+1, 2k+2}]\} \\ &=] - \infty, \alpha_0[\cup] \alpha_1, \alpha_2[\cup] \alpha_3, \alpha_4[\cup] \alpha_5, \alpha_6[\cup \dots, y \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \mathfrak{C} &= \bigcup_{\theta \geq 0} \{\nu_i(\theta) : i \in \mathbb{N}\} = \{\nu_{2k}(\theta), \nu_{2k+1}(\theta) : \theta \in [0, \theta_{2k, 2k+1}]\} \\ &=] \beta_0, \beta_1[\cup] \beta_2, \beta_3[\cup] \beta_4, \beta_5[\cup] \beta_6, \beta_7[\cup \dots \end{aligned}$$

De (1.2.7) y de la parte (i) del Teorema 1.15, el discriminante $\mathcal{D}(\lambda) = e^\theta + e^{-\theta} = 2 \cosh \theta$, o bien $\mathcal{D}(\lambda) = -e^\theta - e^{-\theta} = -2 \cosh \theta$. Así, usando (1.2.13), es posible escribir $\varphi_1(1; \lambda) = \cosh \theta$, o bien $\varphi_1(1; \lambda) = -\cosh \theta$ y se tiene (1.3.9) y (1.3.10). \square

Capítulo 2

El operador Hamiltoniano en el grafeno

En este capítulo se define el grafeno G geoméricamente, con sus respectivos componentes: vértices y aristas. Vemos como actúa el operador Hamiltoniano \mathcal{H} a lo largo de G y la parametrización que nos permite identificar cada arista con el segmento $[0, 1]$. De esta manera, buscamos caracterizar acertadamente las funciones $\Psi = (\Psi_a)_{a \in \mathcal{A}}$ que satisfacen ciertas condiciones de continuidad y flujo. A continuación, para analizar el espectro del grafeno, nos interesa estudiar las funciones Ψ que satisfacen dichas condiciones de continuidad y flujo, la ecuación $\mathcal{H}\Psi = \lambda\Psi$ y además ciertas propiedades de cuasiperiodicidad. Determinaremos para qué valores del parámetro λ estas soluciones son acotadas o no acotadas, analizando la correspondiente relación de dispersión. Nos interesa obtener un resultado análogo al escrito en [3] explicado en la Sección 1.3, donde se caracterizan completamente los intervalos de estabilidad y los de inestabilidad utilizando valores propios de un problema en \mathbb{R} , pero esta vez con valores propios de un problema definido en la red hexagonal G .

2.1. El grafeno

El grafeno es una sustancia formada por carbono puro, donde los átomos están dispuestos en un patrón regular hexagonal. Por tal motivo, en su descripción matemática estos átomos los consideraremos dispuestos en un conjunto de vértices $\mathcal{V} \subseteq \mathbb{R}^2$ tal como se muestra en la Figura 2.1.

Para una descripción más precisa, se introducen dos vectores \mathbf{e}_1 y \mathbf{e}_2 , mediante las relaciones:

$$\mathbf{e}_1 = \left(\frac{3}{2}, \frac{\sqrt{3}}{2}\right) \quad \text{y} \quad \mathbf{e}_2 = (0, \sqrt{3}). \quad (2.1.1)$$

De este modo, el conjunto de vértices \mathcal{V} está definido por

$$\mathcal{V} = \{\mathbf{v}_i^j, \hat{\mathbf{v}}_i^j : i, j \in \mathbb{Z}\}, \quad (2.1.2)$$

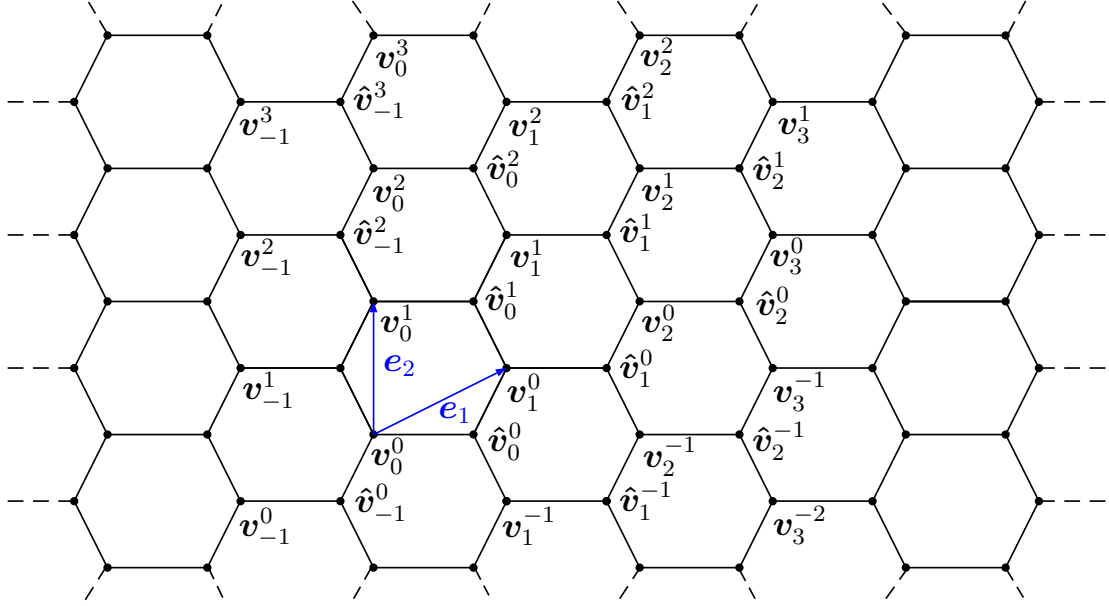


Fig. 2.1: Vértices v_i^j y \hat{v}_i^j en el grafeno G .

donde las familias de vértices $(v_i^j)_{i,j \in \mathbb{Z}}$ y $(\hat{v}_i^j)_{i,j \in \mathbb{Z}}$ están definidas por las relaciones:

$$v_i^j = i e_1 + j e_2 \quad (2.1.3)$$

$$\hat{v}_i^j = v_i^j + (1, 0) \quad (2.1.4)$$

Tal como se muestra en la Figura 2.1, los vértices anteriores están conectados por un conjunto de aristas \mathcal{A} , que forman una red hexagonal, definido por

$$\mathcal{A} = \{a_E^{i,j}, a_N^{i,j}, a_S^{i,j} : a_E^{i,j} = [v_i^j, \hat{v}_i^j], a_N^{i,j} = [v_i^j, \hat{v}_{i-1}^{j+1}], a_S^{i,j} = [v_i^j, \hat{v}_{i-1}^j], i, j \in \mathbb{Z}\}, \quad (2.1.5)$$

como muestra la Figura 2.2.

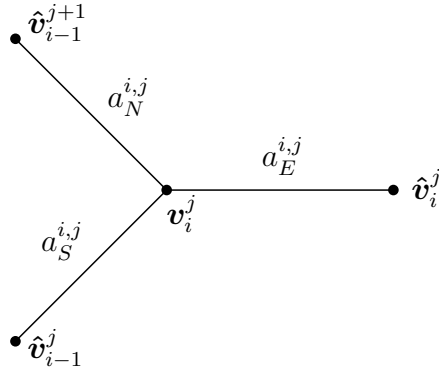


Fig. 2.2: Aristas $a_E^{i,j}$, $a_N^{i,j}$ y $a_S^{i,j}$, y sus respectivos vértices.

Usando esta notación, la estructura del grafeno queda definida por el grafo no orientado G dado por

$$G = (\mathcal{V}, \mathcal{A}).$$

Para realizar cálculos en el grafeno, notamos que cada arista del grafeno es biyectiva con el segmento $[0, 1] \subseteq \mathbb{R}$. En efecto, para visualizar esta biyección, basta con considerar la parametrización σ , orientada de \mathbf{v} a \mathbf{w} , definida por:

$$\begin{aligned} \sigma : [0, 1] \times \mathbb{R}^2 \times \mathbb{R}^2 &\rightarrow \mathbb{R}^2 \\ (t; \mathbf{v}, \mathbf{w}) &\mapsto \sigma(t; \mathbf{v}, \mathbf{w}) = \mathbf{v} + t(\mathbf{w} - \mathbf{v}). \end{aligned} \quad (2.1.6)$$

De este modo, cada arista $[\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2] \in \mathcal{A}$ puede escribirse como $\sigma([0, 1]; \mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2)$. La función inversa es tal que

$$\mathbf{x} \in [\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2] \mapsto \sigma^{-1}(\mathbf{x}; \mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2) = \frac{\|\mathbf{x} - \mathbf{v}_1\|}{\|\mathbf{v}_2 - \mathbf{v}_1\|}. \quad (2.1.7)$$

Usando la parametrización (2.1.6), de inversa de (2.1.7), para cada arista $[\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2] \in \mathcal{A}$ se puede definir el espacio $L^2(\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2)$ como sigue:

$$L^2(\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2) = \left\{ \tilde{\Psi} \circ \sigma^{-1}(\cdot; \mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2) : \tilde{\Psi} \in L^2(0, 1) \right\},$$

dotado de la norma $\|\tilde{\Psi} \circ \sigma^{-1}(\cdot; \mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2)\|_{L^2(\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2)} = \|\tilde{\Psi}\|_{L^2(0, 1)}$. Con esto, se define $L^2(\mathcal{A})$ del modo siguiente:

$$L^2(\mathcal{A}) = \left\{ (\Psi_a)_{a \in \mathcal{A}} \in \bigotimes_{a \in \mathcal{A}} L^2(a) : \sum_{a \in \mathcal{A}} \|\Psi_a\|_{L^2(a)}^2 < \infty \right\}. \quad (2.1.8)$$

Este espacio también suele llamarse $L^2(G)$.

Análogamente, para cada arista $[\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2] \in \mathcal{A}$ se puede definir el espacio de Sobolev $H^2(\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2)$ como sigue:

$$H^2(\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2) = \left\{ \tilde{\Psi} \circ \sigma^{-1}(\cdot; \mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2) : \tilde{\Psi} \in H^2(0, 1) \right\},$$

dotado de la norma $\|\tilde{\Psi} \circ \sigma^{-1}(\cdot; \mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2)\|_{H^2(\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2)} = \|\tilde{\Psi}\|_{H^2(0, 1)}$. Con esto, se define el espacio de Sobolev $H^2(G)$ como el subconjunto de funciones $(\Psi_a)_{a \in \mathcal{A}} \in \bigotimes_{a \in \mathcal{A}} H^2(a)$ que cumplen las tres condiciones siguientes:

$$\sum_{a \in \mathcal{A}} \|\Psi_a\|_{H^2(a)}^2 < \infty, \quad (2.1.9)$$

$$\forall \mathbf{v} \in \mathcal{V}, \forall a_1, a_2 \in \mathcal{A} [\mathbf{v} \in a_1 \cap a_2 \Rightarrow \Psi_{a_1}(\mathbf{v}) = \Psi_{a_2}(\mathbf{v})], \quad (2.1.10)$$

$$\forall \mathbf{v} \in \mathcal{V} \sum_{\substack{\mathbf{v}_2 \in \mathcal{V} \\ [\mathbf{v}, \mathbf{v}_2] \in \mathcal{A}}} D\Psi_{[\mathbf{v}, \mathbf{v}_2]}(\mathbf{v}; \mathbf{v}_2 - \mathbf{v}) = 0. \quad (2.1.11)$$

Las condiciones (2.1.10)–(2.1.11) se suelen llamar condiciones de Neumann en el grafeno o, según algunos autores, condiciones de Kirchhoff. La primera, (2.1.10), corresponde a la condición de continuidad en cada vértice al pasar de una arista a otra. La segunda condición, (2.1.11), en la cual se ha denotado por $D\Psi_{[\mathbf{v}, \mathbf{v}_2]}(\mathbf{v}; \mathbf{v}_2 - \mathbf{v})$ a la derivada direccional de la función $\Psi_{[\mathbf{v}, \mathbf{v}_2]}$ en el punto \mathbf{v} en la dirección $[\mathbf{v}_2 - \mathbf{v}]$, corresponde a que la suma de flujos que salen del vértice \mathbf{v} debe ser nula.

2.2. El Hamiltoniano en el grafeno

Definamos ahora el Hamiltoniano del grafeno en $L^2(G)$. Sea $V(t)$ una función $L^2(0,1)$ tal que

$$V(t) = V(1-t). \quad (2.2.1)$$

El *Hamiltoniano del grafeno* $\mathcal{H} : \mathcal{D}(\mathcal{H}) \subset L^2(G) \rightarrow L^2(G)$ es el operador con dominio $\mathcal{D}(\mathcal{H}) = H^2(G)$ tal que a cada $\Psi = (\Psi_a)_{a \in \mathcal{A}} \in H^2(G)$ le asocia $\mathcal{H}\Psi \in L^2(G)$, $\mathcal{H}\Psi = ((\mathcal{H}\Psi)_a)_{a \in \mathcal{A}}$, tal que

$$(\mathcal{H}\Psi)_a(\mathbf{x}) = \left(-\tilde{\Psi}_a'' + V\tilde{\Psi}_a \right) \circ \sigma^{-1}(\mathbf{x}; a), \quad (2.2.2)$$

donde para cada arista $a \in \mathcal{A}$, $\tilde{\Psi}_a = \Psi_a \circ \sigma(\cdot; a) \in H^2(0,1)$.

El objetivo de este capítulo es analizar el espectro del operador \mathcal{H} , es decir, estudiaremos el parámetro λ en la ecuación

$$\mathcal{H}\Psi = \lambda\Psi.$$

Para ello, caracterizaremos las diferentes funciones Ψ que se clasifican como soluciones acotadas o no acotadas. Para ello buscamos funciones no nulas $\Psi = (\Psi_a)_{a \in \mathcal{A}}$ que cumplan (2.1.10)–(2.1.11) y las ecuaciones diferenciales siguientes

$$-\tilde{\Psi}_a''(t) + V(t)\tilde{\Psi}_a(t) = \lambda\tilde{\Psi}_a(t), \quad \forall a \in \mathcal{A}, \forall t \in (0,1), \quad (2.2.3)$$

donde $\lambda \in \mathbb{R}$ es un parámetro.

Nuestro objetivo es clasificar las soluciones de (2.2.3) de acuerdo a diferentes valores de λ buscando soluciones acotadas y no acotadas en el grafeno. Observemos que la condición (2.1.9) no será satisfecha por nuestras soluciones ya que el operador \mathcal{H} tiene un espectro continuo.

Nos interesa estudiar soluciones de (2.2.3) que cumplan las propiedades

$$\Psi(\mathbf{x} + \mathbf{e}_1) = R_1\Psi(\mathbf{x}), \quad \forall \mathbf{x} \in G \quad (2.2.4)$$

$$\Psi(\mathbf{x} + \mathbf{e}_2) = R_2\Psi(\mathbf{x}), \quad \forall \mathbf{x} \in G \quad (2.2.5)$$

donde R_1 y R_2 son números reales o complejos que pertenecen al conjunto

$$\{R \in \mathbb{C} : |R| = 1 \vee R \in \mathbb{R}^*\}.$$

Notemos que si $|R_1| = |R_2| = 1$ las soluciones buscadas son acotadas en el grafeno, mientras que si alguna de las dos constantes tiene módulo diferente de uno, la solución buscada será no acotada en la dirección $\pm\mathbf{e}_1$ o $\pm\mathbf{e}_2$, según corresponda.

Para estudiar el problema planteado procederemos del siguiente modo: en la Sección 2.3 estudiaremos la forma de imponer las condiciones de Kirchhoff (2.1.10)–(2.1.11) y en la Sección 2.4 la caracterización de los valores de λ para cada caso de las constantes R_1, R_2 .

2.3. Condiciones de Kirchhoff

El objetivo de esta sección es caracterizar apropiadamente las funciones $\Psi = (\Psi_a)_{a \in \mathcal{A}}$ que satisfacen las condiciones de Kirchhoff (2.1.10)–(2.1.11). Para ello, comenzamos observando que cada vértice $v \in \mathcal{V}$ tiene exactamente tres aristas adyacentes, como se muestra en la Figura 2.3. Por este motivo, las condiciones de continuidad y flujo serán escritas explícitamente en los vértices de tipo v_i^j y \hat{v}_i^j de \mathcal{V} , donde $i, j \in \mathbb{Z}$ (ver (2.1.2)).

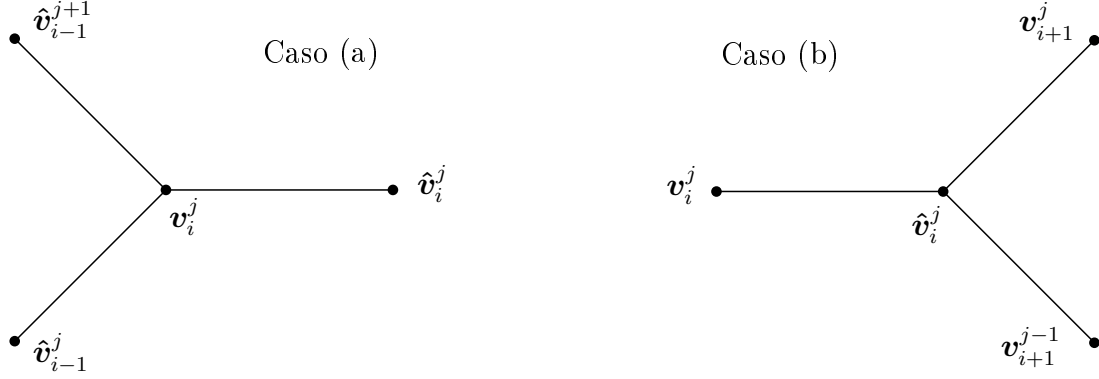


Fig. 2.3: Aristas que concurren a los vértices del tipo v_i^j (Caso (a)) y a los del tipo \hat{v}_i^j (Caso (b)).

El resultado principal de esta sección lo enunciaremos en dos teoremas, que separan los casos $\varphi_2(1; \lambda) \neq 0$ y $\varphi_2(1; \lambda) = 0$, donde $\varphi_2(\cdot; \lambda)$ es la función descrita en (1.2.25). La importancia de esta separación es que en el segundo caso λ está incluido en el espectro de Dirichlet. El primer teorema, caracteriza completamente las funciones que satisfacen las condiciones de continuidad y flujo establecidas en (2.1.10)–(2.1.11).

Teorema 2.1. *Si $\varphi_2(1; \lambda) \neq 0$, toda función $\Psi = (\Psi_a)_{a \in \mathcal{A}}$ que cumpla (2.2.3), satisface las condiciones (2.1.10)–(2.1.11) si y solamente si para todo $i, j \in \mathbb{Z}$ se cumplen las siguientes relaciones:*

$$-3\varphi_1(1; \lambda)\Psi(v_i^j) + \Psi(\hat{v}_i^j) + \Psi(\hat{v}_{i-1}^j) + \Psi(\hat{v}_{i-1}^{j+1}) = 0, \quad (2.3.1)$$

$$-3\varphi_1(1; \lambda)\Psi(\hat{v}_i^j) + \Psi(v_i^j) + \Psi(v_{i+1}^j) + \Psi(v_{i+1}^{j-1}) = 0, \quad (2.3.2)$$

donde $\varphi_1(\cdot; \lambda)$ y $\varphi_2(\cdot; \lambda)$ son las funciones descritas en (1.2.25).

Teorema 2.2. *Si $\varphi_2(1; \lambda) = 0$, toda función $\Psi = (\Psi_a)_{a \in \mathcal{A}}$ que cumpla (2.2.3), satisface las condiciones (2.1.10)–(2.1.11) si y solamente si se cumplen las dos condiciones siguientes:*

(1) *Existe $k_\Psi \in \mathbb{R}$, que depende de Ψ , tal que se cumple*

$$\Psi(v_i^j) = k_\Psi \quad \text{y} \quad \Psi(\hat{v}_i^j) = k_\Psi \varphi_1(1; \lambda), \quad \forall i, j \in \mathbb{Z}. \quad (2.3.3)$$

(2) *Si en cada arista $a \in \mathcal{A}$ las funciones Ψ_a se escriben como*

$$\tilde{\Psi}_a(t) = \tilde{\Psi}_a(0)\varphi_1(t; \lambda) + c_a\varphi_2(t; \lambda), \quad (2.3.4)$$

donde la parametrización t se escoge describiendo la arista de izquierda a derecha, entonces las constantes $(c_a)_{a \in \mathcal{A}}$ satisfacen las relaciones siguientes:

$$2k_{\Psi}\varphi_1'(1; \lambda) + c_{[\mathfrak{v}_{i-1}^{j+1}, \mathfrak{v}_i^j]} + c_{[\mathfrak{v}_{i-1}^j, \mathfrak{v}_i^j]} = c_{[\mathfrak{v}_i^j, \mathfrak{v}_i^j]}\varphi_1(1; \lambda), \quad \forall i, j \in \mathbb{Z}, \quad (2.3.5)$$

$$k_{\Psi}\varphi_1'(1; \lambda) + c_{[\mathfrak{v}_i^j, \mathfrak{v}_i^j]}\varphi_1(1; \lambda) = c_{[\mathfrak{v}_i^j, \mathfrak{v}_{i+1}^j]} + c_{[\mathfrak{v}_i^j, \mathfrak{v}_{i+1}^{j-1}]}, \quad \forall i, j \in \mathbb{Z}. \quad (2.3.6)$$

2.3.1. Demostración del Teorema 2.1

Comenzaremos por enunciar el siguiente lema, donde se introducen dos funciones auxiliares que serán utilizadas en el resto de esta sección.

Lema 2.3. *Si $\varphi_2(1; \lambda) \neq 0$, existen dos soluciones $\phi_1(\cdot; \lambda)$ y $\phi_2(\cdot; \lambda)$ de (1.3.1) que cumplen las condiciones de borde*

$$\phi_1(0; \lambda) = 1, \quad \phi_1(1; \lambda) = 0, \quad (2.3.7)$$

y

$$\phi_2(0; \lambda) = 0, \quad \phi_2(1; \lambda) = 1. \quad (2.3.8)$$

Además, $\phi_1(\cdot; \lambda)$ y $\phi_2(\cdot; \lambda)$ son únicas y están dadas por las relaciones

$$\phi_1(t; \lambda) = \varphi_1(t; \lambda) - \left(\frac{\varphi_1(1; \lambda)}{\varphi_2(1; \lambda)} \right) \varphi_2(t; \lambda), \quad (2.3.9)$$

$$\phi_2(t; \lambda) = \left(\frac{1}{\varphi_2(1; \lambda)} \right) \varphi_2(t; \lambda). \quad (2.3.10)$$

DEMOSTRACIÓN. Probar la existencia es simple, evaluando las relaciones (2.3.9)–(2.3.10) en $t = 0$ y en $t = 1$.

Para la unicidad de $\phi_1(\cdot; \lambda)$ (para $\phi_2(\cdot; \lambda)$ es análogo), supongamos que existe una función $\phi_{1b}(\cdot; \lambda)$ solución de (1.3.1), que satisface (2.3.7). Esta solución puede escribirse como combinación lineal de $\varphi_1(\cdot; \lambda)$ y $\varphi_2(\cdot; \lambda)$ como sigue (ver (1.1.5))

$$\phi_{1b}(t; \lambda) = c_1\varphi_1(t; \lambda) + c_2\varphi_2(t; \lambda).$$

Reemplazando en $t = 0$ y usando (2.3.7) obtenemos $c_1 = 1$. Ahora, haciendo $t = 1$, de (2.3.7) y (2.3.9), se tiene

$$- \left(\frac{\varphi_1(1; \lambda)}{\varphi_2(1; \lambda)} \right) \varphi_2(1; \lambda) = c_2\varphi_2(1; \lambda) \quad (2.3.11)$$

de donde resulta que $c_2 = - \left(\frac{\varphi_1(1; \lambda)}{\varphi_2(1; \lambda)} \right)$, es decir $\phi_{1b}(t; \lambda) = \phi_1(t; \lambda)$. \square

Utilizando las funciones $\phi_1(\cdot; \lambda)$ y $\phi_2(\cdot; \lambda)$ definidas en el Lema 2.3, podemos demostrar el Teorema 2.1 como sigue.

DEMOSTRACIÓN DEL TEOREMA 2.1. La condición (2.1.10) se cumple si y solamente si la función $\Psi = (\Psi_a)_{a \in \mathcal{A}}$ tiene una traza definida y única (independiente de la arista considerada) en cada vértice $\mathbf{v} \in \mathcal{V}$ del grafeno. Este hecho está implícito en la escritura de las igualdades (2.3.1) y (2.3.2) donde se han usado explícitamente los valores de las trazas de Ψ a cada vértice de la forma $\mathbf{v}_i^j, \hat{\mathbf{v}}_i^j \in \mathcal{V}$. Para terminar la demostración, nos enfocaremos en la propiedad de flujos (2.1.11).

Probaremos que la identidad (2.3.1) es equivalente a la condición de flujo (2.1.11) establecida en los vértices \mathbf{v}_i^j (ver Figura 2.3, Caso (a)). Para simplificar la notación, denotemos por f, g y h a las restricciones de la función Ψ a las aristas $[\mathbf{v}_i^j, \hat{\mathbf{v}}_{i-1}^{j+1}]$, $[\mathbf{v}_i^j, \hat{\mathbf{v}}_{i-1}^j]$ y $[\mathbf{v}_i^j, \hat{\mathbf{v}}_i^j]$, respectivamente, y por A, B, C y D a las trazas de la función Ψ en los vértices $\mathbf{v}_i^j, \hat{\mathbf{v}}_{i-1}^{j+1}, \hat{\mathbf{v}}_{i-1}^j$ y $\hat{\mathbf{v}}_i^j$, respectivamente (ver Figura 2.4).

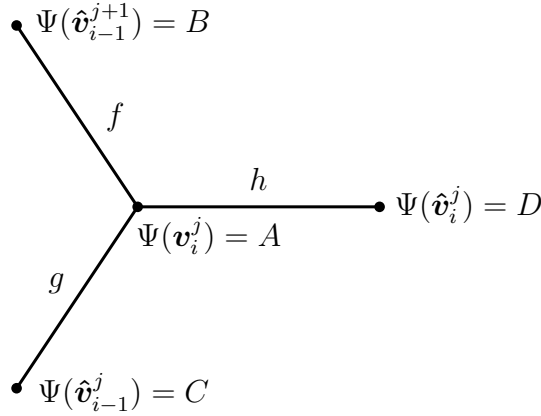


Fig. 2.4: Vértices en los que la función Ψ vale A, B, C y D .

Como la función $\Psi = (\Psi_a)_{a \in \mathcal{A}}$ satisface las identidades (2.2.3), tiene trazas bien definidas en los vértices y $\varphi_2(1; \lambda) \neq 0$, podemos usar las funciones $\phi_1(\cdot; \lambda), \phi_2(\cdot; \lambda)$ definidas en (2.3.7)–(2.3.8), para encontrar sus valores en cada arista $[\mathbf{v}_i^j, \hat{\mathbf{v}}_{i-1}^{j+1}]$, $[\mathbf{v}_i^j, \hat{\mathbf{v}}_{i-1}^j]$ y $[\mathbf{v}_i^j, \hat{\mathbf{v}}_i^j]$ en términos de sus correspondientes valores en los vértices, del modo siguiente

$$\begin{cases} \tilde{f}(t) = A\phi_1(t; \lambda) + B\phi_2(t; \lambda) \\ \tilde{g}(t) = A\phi_1(t; \lambda) + C\phi_2(t; \lambda) \\ \tilde{h}(t) = A\phi_1(t; \lambda) + D\phi_2(t; \lambda) \end{cases} \quad (2.3.12)$$

donde \tilde{f}, \tilde{g} y \tilde{h} representan la composición de las funciones f, g, h con la parametrización σ definida en (2.1.6) para cada arista. Con esta notación, la condición (2.1.11) escrita en el vértice \mathbf{v}_i^j es equivalente a

$$\tilde{f}'(0) + \tilde{g}'(0) + \tilde{h}'(0) = 0. \quad (2.3.13)$$

Luego, derivando en (2.3.12) y reemplazando en (2.3.13), resulta

$$3A\phi_1'(0; \lambda) + (B + C + D)\phi_2'(0; \lambda) = 0. \quad (2.3.14)$$

Los valores $\phi_1'(0; \lambda)$ y $\phi_2'(0; \lambda)$ se obtienen directamente derivando las definiciones (2.3.9)–(2.3.10), reemplazando en $t = 0$ y usando las propiedades (1.1.3). De este modo la identidad (2.3.14) es equivalente a

$$-3A \left(\frac{\varphi_1(1; \lambda)}{\varphi_2(1; \lambda)} \right) + (B + C + D) \left(\frac{1}{\varphi_2(1; \lambda)} \right) = 0.$$

Multiplicando esta expresión por $\varphi_2(1; \lambda)$, obtenemos finalmente

$$-3A\varphi_1(1; \lambda) + B + C + D = 0,$$

que corresponde exactamente a la identidad (2.3.1) con los respectivos cambios de nomenclatura.

La demostración para (2.3.2) es análoga, pues la ecuación (2.3.2) es equivalente a la condición de flujo (2.1.11) establecida en los vértices \hat{v}_i^j (ver Figura 2.3, Caso (b)). \square

2.3.2. Demostración del Teorema 2.2

En esta sección estudiamos el caso particular en que $\varphi_2(1; \lambda) = 0$. Como la función $\varphi_2(\cdot; \lambda)$ también es nula en $t = 0$ (ver (1.1.3)), resulta que $\varphi_2(\cdot; \lambda)$ es una solución no trivial del problema con condiciones de borde de Dirichlet siguiente:

$$\begin{cases} -\varphi_2''(x; \lambda) + V(x)\varphi_2(x; \lambda) = \lambda\varphi_2(x; \lambda), & \text{en } (0, 1) \\ \varphi_2(0; \lambda) = \varphi_2(1; \lambda) = 0. \end{cases}$$

Por lo tanto, el caso que nos interesa en esta sección corresponde a los valores de λ del espectro del operador de Dirichlet asociado al operador diferencial \mathcal{H} .

En el lema siguiente, resumimos algunas propiedades adicionales de las funciones $\varphi_1(\cdot; \lambda)$ y $\varphi_2(\cdot; \lambda)$ que se tienen en este caso.

Lema 2.4. *Si $\varphi_2(1; \lambda) = 0$, entonces*

$$\begin{aligned} \varphi_2'(1; \lambda) = \varphi_1(1; \lambda) = 1 & \quad y \quad \mathcal{D}(\lambda) = 2, \quad \text{o bien} \\ \varphi_2'(1; \lambda) = \varphi_1(1; \lambda) = -1 & \quad y \quad \mathcal{D}(\lambda) = -2. \end{aligned}$$

donde $\mathcal{D}(\lambda)$ ha sido definido en (1.2.13).

DEMOSTRACIÓN. De (1.2.16)–(1.2.17), se tiene

$$\varphi_2'(1; \lambda)^2 = \varphi_1(1; \lambda)^2 = 1 \tag{2.3.15}$$

y, de (1.2.12), se concluye que

$$\varphi_2'(1; \lambda) = \varphi_1(1; \lambda) = 1, \text{ o bien } \varphi_2'(1; \lambda) = \varphi_1(1; \lambda) = -1.$$

Así, de (1.2.13),

$$\mathcal{D}(\lambda) = 2, \text{ o bien } \mathcal{D}(\lambda) = -2,$$

respectivamente, y estamos en los casos 4 y 5 analizados en la Sección 1.2. \square

DEMOSTRACIÓN DEL TEOREMA 2.2. Para probar la parte (1) del teorema, consideremos una arista arbitraria $a = [\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2] \in \mathcal{A}$ que une los vértices $\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2$. Como Ψ satisface (2.2.3), de (1.1.4), es claro que podemos escribir

$$\tilde{\Psi}_{[\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2]}(t) = \tilde{\Psi}_{[\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2]}(0)\varphi_1(t; \lambda) + \tilde{\Psi}'_{[\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2]}(0)\varphi_2(t; \lambda), \quad \forall t \in [0, 1].$$

Ya que $\varphi_2(1; \lambda) = 0$, se tiene que

$$\tilde{\Psi}_{[\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2]}(1) = \tilde{\Psi}_{[\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2]}(0)\varphi_1(1; \lambda).$$

Es decir,

$$\Psi(\mathbf{v}_2) = \Psi(\mathbf{v}_1)\varphi_1(1; \lambda). \quad (2.3.16)$$

Como esta relación es válida en todas las aristas y $\varphi_1(1; \lambda)^2 = 1$, se concluye que al recorrer dos aristas consecutivas $[\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2]$ – $[\mathbf{v}_2, \mathbf{v}_3]$ se obtiene $\Psi(\mathbf{v}_3) = \Psi(\mathbf{v}_1)$. Luego, usando la notación $k_\Psi = \Psi(\mathbf{v}_0^0)$ y observando que todos los vértices \mathbf{v}_i^j están conectados por la unión de dos aristas consecutivas, se obtiene que

$$\Psi(\mathbf{v}_i^j) = k_\Psi \quad \forall i, j \in \mathbb{Z}.$$

Así (2.3.3) se obtiene usando esta identidad junto a la relación (2.3.16), la que permite vincular los vértices \mathbf{v}_i^j con los vértices $\hat{\mathbf{v}}_i^j$.

Para probar (2.3.5), estudiaremos la condición de flujos en los vértices del tipo $\mathbf{v}_i^j \in \mathcal{V}$. Para simplificar la notación, escribiremos como f, g y h las restricciones de la función Ψ a las aristas $[\hat{\mathbf{v}}_{i-1}^{j+1}, \mathbf{v}_i^j]$, $[\hat{\mathbf{v}}_{i-1}^j, \mathbf{v}_i^j]$ y $[\mathbf{v}_i^j, \hat{\mathbf{v}}_i^j]$, respectivamente, y por A , la traza de la función Ψ en el vértice central \mathbf{v}_i^j (ver Figura 2.5). Usando la relación (2.3.16), se tiene que las trazas de la función Ψ en los vértices externos $\hat{\mathbf{v}}_{i-1}^{j+1}$, $\hat{\mathbf{v}}_{i-1}^j$ y $\hat{\mathbf{v}}_i^j$, son iguales a $A\varphi_1(1; \lambda)$. Para usar la escritura (2.3.4), denotaremos por c_f, c_g y c_h las correspondientes constantes $c_{[\hat{\mathbf{v}}_{i-1}^{j+1}, \mathbf{v}_i^j]}$, $c_{[\hat{\mathbf{v}}_{i-1}^j, \mathbf{v}_i^j]}$ y $c_{[\mathbf{v}_i^j, \hat{\mathbf{v}}_i^j]}\varphi_1(1; \lambda)$.

Con esta notación, usando (2.3.4), podemos escribir

$$\begin{cases} \tilde{f}(t) = A\varphi_1(1; \lambda) \varphi_1(t; \lambda) + c_f \varphi_2(t; \lambda) \\ \tilde{g}(t) = A\varphi_1(1; \lambda) \varphi_1(t; \lambda) + c_g \varphi_2(t; \lambda) \\ \tilde{h}(t) = A \varphi_1(t; \lambda) + c_h \varphi_2(t; \lambda), \end{cases} \quad (2.3.17)$$

donde \tilde{f}, \tilde{g} y \tilde{h} representan la composición de las funciones f, g, h con la parametrización σ definida en (2.1.6) para cada arista.

De este modo, la condición de flujo (2.1.11) en el vértice \mathbf{v}_i^j se escribe como

$$-\tilde{f}'(1) - \tilde{g}'(1) + \tilde{h}'(0) = 0. \quad (2.3.18)$$

Luego, derivando en (2.3.17) y reemplazando en (2.3.18), de las condiciones (1.1.3), resulta

$$2A\varphi_1(1; \lambda)\varphi_1'(1; \lambda) + (c_f + c_g)\varphi_2'(1; \lambda) = c_h.$$

Multiplicando por $\varphi_1(1; \lambda)$ y utilizando (1.2.12) y (2.3.15), se concluye que

$$2A\varphi_1'(1; \lambda) + c_f + c_g = c_h\varphi_1(1; \lambda).$$

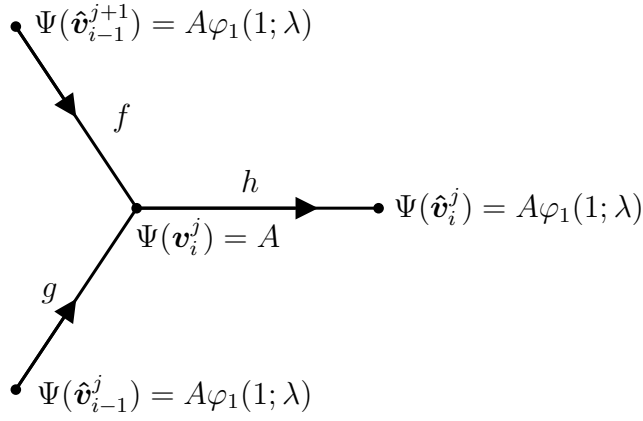


Fig. 2.5: Vértices en los que la función Ψ vale A y $A\varphi_1(1; \lambda)$, y la respectiva orientación de la parametrización t .

Con los correspondientes cambios de notación, hemos demostrado que la condición de flujo (2.1.11) escrita en el vértice \mathbf{v}_i^j es equivalente a la identidad (2.3.5).

En forma análoga se demuestra que la condición de flujo (2.1.11) escrita en el vértice $\hat{\mathbf{v}}_i^j$ es equivalente a la identidad (2.3.6).

Por lo tanto las condiciones (2.1.10)–(2.1.11) se cumplen si y solamente si las identidades (2.3.3), (2.3.5) y (2.3.6) son satisfechas. \square

2.4. Teoría espectral en el grafeno

En esta sección nos interesa caracterizar todas las funciones $\Psi = (\Psi_a)_{a \in \mathcal{A}}$, que satisfacen (2.2.3), las condiciones de continuidad y flujo (2.1.10)–(2.1.11), y que además cumplen las propiedades de cuasiperiodicidad (2.2.4)–(2.2.5). En el siguiente análisis, consideraremos el caso de los valores $\lambda \in \mathbb{R}$ que cumplen $\varphi_2(1; \lambda) \neq 0$, pues su estudio es más interesante.

Utilizaremos el resultado mostrado en el Teorema 2.1, aplicado también a los vértices \mathbf{v}_i^j y $\hat{\mathbf{v}}_i^j$, para todo $i, j \in \mathbb{Z}$ (ver Figura 2.6).

De las definiciones (2.1.3)–(2.1.4) se tiene que

$$\begin{aligned} \mathbf{v}_i^j &= \mathbf{v}_{i+1}^j - \mathbf{e}_1, & \mathbf{v}_{i+1}^{j-1} &= \mathbf{v}_{i+1}^j - \mathbf{e}_2 \\ \hat{\mathbf{v}}_i^j &= \hat{\mathbf{v}}_{i-1}^j + \mathbf{e}_1, & \hat{\mathbf{v}}_{i-1}^{j+1} &= \hat{\mathbf{v}}_{i-1}^j + \mathbf{e}_2. \end{aligned}$$

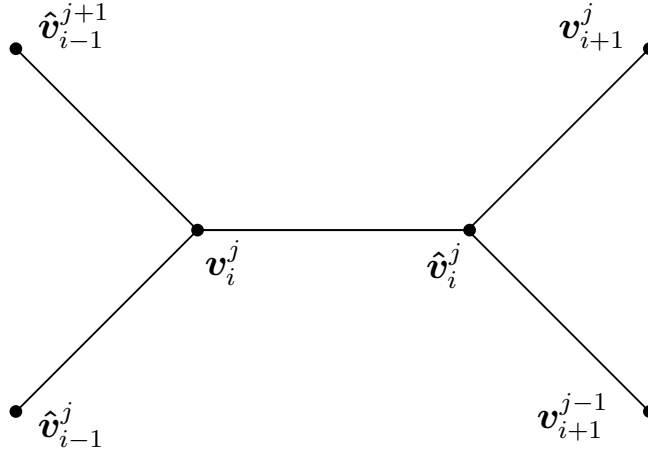


Fig. 2.6: Vértices \mathbf{v}_i^j y $\hat{\mathbf{v}}_i^j$ y sus correspondientes vértices adyacentes.

Por lo tanto, las propiedades (2.2.4)–(2.2.5), transforman las identidades (2.3.1)–(2.3.2) en

$$\begin{aligned} -3\varphi_1(1; \lambda)\Psi(\mathbf{v}_i^j) + \left(1 + R_1^{-1} + R_1^{-1}R_2\right)\Psi(\hat{\mathbf{v}}_i^j) &= 0, \\ -3\varphi_1(1; \lambda)\Psi(\hat{\mathbf{v}}_i^j) + \left(1 + R_1 + R_1R_2^{-1}\right)\Psi(\mathbf{v}_i^j) &= 0. \end{aligned}$$

Si multiplicamos la primera ecuación por R_1 y ordenamos el sistema dejando como variables las cantidades $R_1\Psi(\mathbf{v}_i^j)$ y $\Psi(\hat{\mathbf{v}}_i^j)$, se obtiene

$$-3\varphi_1(1; \lambda)R_1\Psi(\mathbf{v}_i^j) + \left(1 + R_1 + R_2\right)\Psi(\hat{\mathbf{v}}_i^j) = 0, \quad (2.4.1)$$

$$\left(1 + R_1^{-1} + R_2^{-1}\right)R_1\Psi(\mathbf{v}_i^j) - 3\varphi_1(1; \lambda)\Psi(\hat{\mathbf{v}}_i^j) = 0. \quad (2.4.2)$$

Estas identidades nos permiten obtener las soluciones buscadas en términos de λ, R_1 y R_2 , como un sistema de ecuaciones lineal homogéneo. Así, se concluye que su solución existe y es no trivial, si y solamente si su determinante es igual a cero, esto es,

$$9\varphi_1(1; \lambda)^2 = (1 + R_1 + R_2)(1 + R_1^{-1} + R_2^{-1}). \quad (2.4.3)$$

La ecuación (2.4.3) constituye la relación de dispersión del grafeno, para soluciones acotadas o no acotadas que tienen el comportamiento cuasi-periódico indicado en (2.2.4)–(2.2.5). Esta ecuación, relaciona la forma de las funciones buscadas, representadas por las constantes R_1 y R_2 (forma de onda), con los valores de $\lambda \in \mathbb{C}$ (frecuencias) por medio de la función $\varphi_1(1; \lambda)$.

En las secciones siguientes, investigaremos para qué valores de λ se obtienen soluciones acotadas y no acotadas del problema.

2.4.1. Soluciones acotadas

En esta sección estudiaremos la relación de dispersión (2.4.3) en el caso en que R_1, R_2 son tales que la solución $\Psi = (\Psi_a)_{a \in \mathcal{A}}$ es acotada. Claramente, se debe cumplir necesariamente que $|R_1| = |R_2| = 1$.

Para este análisis, es conveniente introducir las variables auxiliares $\theta_1, \theta_2 \in [-\pi, \pi]$ de modo que

$$R_1 = e^{i\theta_1} \quad R_2 = e^{i\theta_2}. \quad (2.4.4)$$

De este modo, la relación de dispersión del grafeno (2.4.3) se reduce a

$$9\varphi_1(1; \lambda)^2 = (1 + e^{i\theta_1} + e^{i\theta_2})(1 + e^{-i\theta_1} + e^{-i\theta_2}). \quad (2.4.5)$$

Donde, observando que el lado derecho es el producto de un complejo por su conjugado, podemos escribirla como

$$\varphi_1(1; \lambda)^2 = F(\theta_1, \theta_2) := \frac{1}{9} |1 + e^{i\theta_1} + e^{i\theta_2}|^2. \quad (2.4.6)$$

Cálculos simples muestran que

$$0 \leq F(\theta_1, \theta_2) \leq 1, \quad \forall \theta_1, \theta_2 \in [-\pi, \pi].$$

Además,

$$\left\{ F(\theta_1, \theta_2) : \theta_1, \theta_2 \in [-\pi, \pi] \right\} = [0, 1].$$

Esto se resume en el siguiente lema.

Lema 2.5. *Para todo $\theta_1, \theta_2 \in [-\pi, \pi]$, las soluciones $\varphi_1(1; \lambda)$ de (2.2.3) que cumplen (1.1.3) también satisfacen*

$$\varphi_1(1; \lambda) \in [-1, 1].$$

Con esto, usando la teoría desarrollada en el Capítulo 1 (ver Proposición 1.7), se concluye que

Corolario 2.6. *Para cada $\theta_1, \theta_2 \in [-\pi, \pi]$, los valores de λ asociados a las soluciones $\varphi_1(1; \lambda)$ de (2.2.3) que cumplen (1.1.3), están dados por la relación*

$$\lambda \in \varphi_1^{-1} \left(\sqrt{F(\theta_1, \theta_2)} \right) \cup \varphi_1^{-1} \left(-\sqrt{F(\theta_1, \theta_2)} \right)$$

donde φ_1^{-1} denota al conjunto preimagen de la función $\varphi_1(1; \lambda)$.

Observación 2.7. *Del Corolario 1.25, se tiene que*

$$\lambda \in \mathfrak{A}_\theta \cup \mathfrak{A}_{\pi-\theta}$$

donde

$$\theta = \cos^{-1} \sqrt{F(\theta_1, \theta_2)}$$

y los conjuntos \mathfrak{A}_θ están definidos por

$$\mathfrak{A}_\theta = \{\lambda_i(\theta) : i \in \mathbb{N}\}.$$

2.4.2. Soluciones no acotadas

Estudiaremos ahora la relación de dispersión (2.4.3) cuando $R_1, R_2 \in \mathbb{R}^*$. En este caso, la expresión de la derecha puede tomar diferentes valores cuando R_1 y R_2 recorren los reales. Por esta razón, nos interesa caracterizar las siguientes regiones:

$$\mathcal{R}_S = \left\{ (R_1, R_2) \in \mathbb{R}^2 : 0 \leq (1 + R_1 + R_2)(1 + R_1^{-1} + R_2^{-1}) < 9 \right\} \quad (2.4.7)$$

$$\mathcal{R}_U = \left\{ (R_1, R_2) \in \mathbb{R}^2 : 9 \leq (1 + R_1 + R_2)(1 + R_1^{-1} + R_2^{-1}) \right\}. \quad (2.4.8)$$

Respecto de estas zonas, demostraremos el Teorema 2.9 de más abajo.

Observación 2.8. *Notemos que el análisis de la región donde $(1 + R_1 + R_2)(1 + R_1^{-1} + R_2^{-1}) < 0$ no es de interés, ya que en tal caso no existe solución no trivial del sistema (2.4.1)–(2.4.2).*

Teorema 2.9. *Las regiones \mathcal{R}_S y \mathcal{R}_U definidas en (2.4.7)–(2.4.8) son no vacías. Además, se caracterizan por (ver Figura 2.7):*

(i) Si $R_1, R_2 > 0$, entonces $(R_1, R_2) \in \mathcal{R}_U$.

(ii) Si $R_2 \in (-\infty, -1)$, entonces

$$(R_1, R_2) \in \mathcal{R}_S \iff R_1 \in \left[\frac{-R_2}{1 + R_2}, R_{1,2} \right) \cup [-(1 + R_2), R_{1,1})$$

$$(R_1, R_2) \in \mathcal{R}_U \iff R_1 \in [R_{1,2}, 0) \cup [R_{1,1}, +\infty).$$

(iii) Si $R_2 = -1$, entonces $(R_1, R_2) \in \mathcal{R}_S$.

(iv) Si $R_2 \in (-1, 0)$, entonces

$$(R_1, R_2) \in \mathcal{R}_S \iff R_1 \in (R_{1,1}, -(1 + R_2)] \cup \left(R_{1,2}, \frac{-R_2}{1 + R_2} \right]$$

$$(R_1, R_2) \in \mathcal{R}_U \iff R_1 \in (-\infty, R_{1,1}] \cup (0, R_{1,2}].$$

(v) Si $R_2 \in (0, 7 - 4\sqrt{3})$, entonces

$$(R_1, R_2) \in \mathcal{R}_S \iff R_1 \in [-(1 + R_2), R_{1,1}) \cup \left(R_{1,2}, \frac{-R_2}{1 + R_2} \right]$$

$$(R_1, R_2) \in \mathcal{R}_U \iff R_1 \in [R_{1,1}, R_{1,2}] \cup (0, +\infty).$$

(vi) Si $R_2 \in [7 - 4\sqrt{3}, 7 + 4\sqrt{3}]$, entonces

$$(R_1, R_2) \in \mathcal{R}_S \iff R_1 \in \left[-(1 + R_2), \frac{-R_2}{1 + R_2} \right]$$

$$(R_1, R_2) \in \mathcal{R}_U \iff R_1 \in (0, \infty).$$

(vii) Si $R_2 \in (7 + 4\sqrt{3}, \infty)$, entonces

$$(R_1, R_2) \in \mathcal{R}_S \iff R_1 \in [-(1 + R_2), R_{1,2}) \cup \left(R_{1,1}, \frac{-R_2}{1 + R_2} \right]$$

$$(R_1, R_2) \in \mathcal{R}_U \iff R_1 \in [R_{1,2}, R_{1,1}] \cup (0, +\infty).$$

En (ii), (iv), (v), y (vii), $R_{1,1}$ y $R_{1,2}$ están dadas por

$$R_{1,1} = -\left(\frac{R_2^2 - 6R_2 + 1}{2(R_2 + 1)} \right) + \frac{(R_2 - 1)\sqrt{R_2^2 - 14R_2 + 1}}{2(R_2 + 1)}$$

$$R_{1,2} = -\left(\frac{R_2^2 - 6R_2 + 1}{2(R_2 + 1)} \right) - \frac{(R_2 - 1)\sqrt{R_2^2 - 14R_2 + 1}}{2(R_2 + 1)}$$

DEMOSTRACIÓN. Para demostrar (i) basta con observar que

$$(1 + R_1 + R_2)(1 + R_1^{-1} + R_2^{-1}) = 3 + (R_1 + R_1^{-1}) + (R_2 + R_2^{-1}) + \left(\frac{R_1}{R_2} + \left(\frac{R_1}{R_2} \right)^{-1} \right).$$

Así, si $R_1, R_2 > 0$, cada paréntesis de la derecha es superior o igual a dos y, por lo tanto, $(R_1, R_2) \in \mathcal{R}_U$.

Para estudiar el resto de los casos, comencemos por caracterizar aquellos puntos que pertenecen a $\mathcal{R}_U \cup \mathcal{R}_S$, es decir, aquellos puntos del plano que satisfacen

$$G_1(R_1, R_2) := (1 + R_1 + R_2)(1 + R_1^{-1} + R_2^{-1}) \geq 0. \quad (2.4.9)$$

Primero, es conveniente reordenar la expresión $G_1(R_1, R_2)$ de (2.4.9) del modo siguiente:

$$G_1(R_1, R_2) = \frac{(R_1 + R_2 + 1)(R_1(R_2 + 1) + R_2)}{R_1 R_2}.$$

Aquí, el numerador corresponde a una expresión cuadrática cuando $R_2 \neq -1$. En este caso, $G_1(R_1, R_2)$ cambia de signo en los puntos

$$-(1 + R_2), \quad \frac{-R_2}{1 + R_2}, \quad 0$$

y hacia $-\infty$ tiene el mismo signo que $\frac{R_2+1}{R_2}$. Con esto, podemos resolver la inecuación (2.4.9) para los diferentes valores de R_2 :

$$\text{Si } R_2 < -1, \text{ se tiene que } R_1 \in \left[\frac{-R_2}{1 + R_2}, 0 \right) \cup [-(1 + R_2), \infty). \quad (2.4.10)$$

$$\text{Si } R_2 \in (-1, 0), \text{ se tiene que } R_1 \in (-\infty, -(1 + R_2)] \cup \left(0, \frac{-R_2}{1 + R_2} \right]. \quad (2.4.11)$$

$$\text{Si } R_2 > 0, \text{ se tiene que } R_1 \in \left[-(1 + R_2), \frac{-R_2}{1 + R_2} \right] \cup (0, \infty). \quad (2.4.12)$$

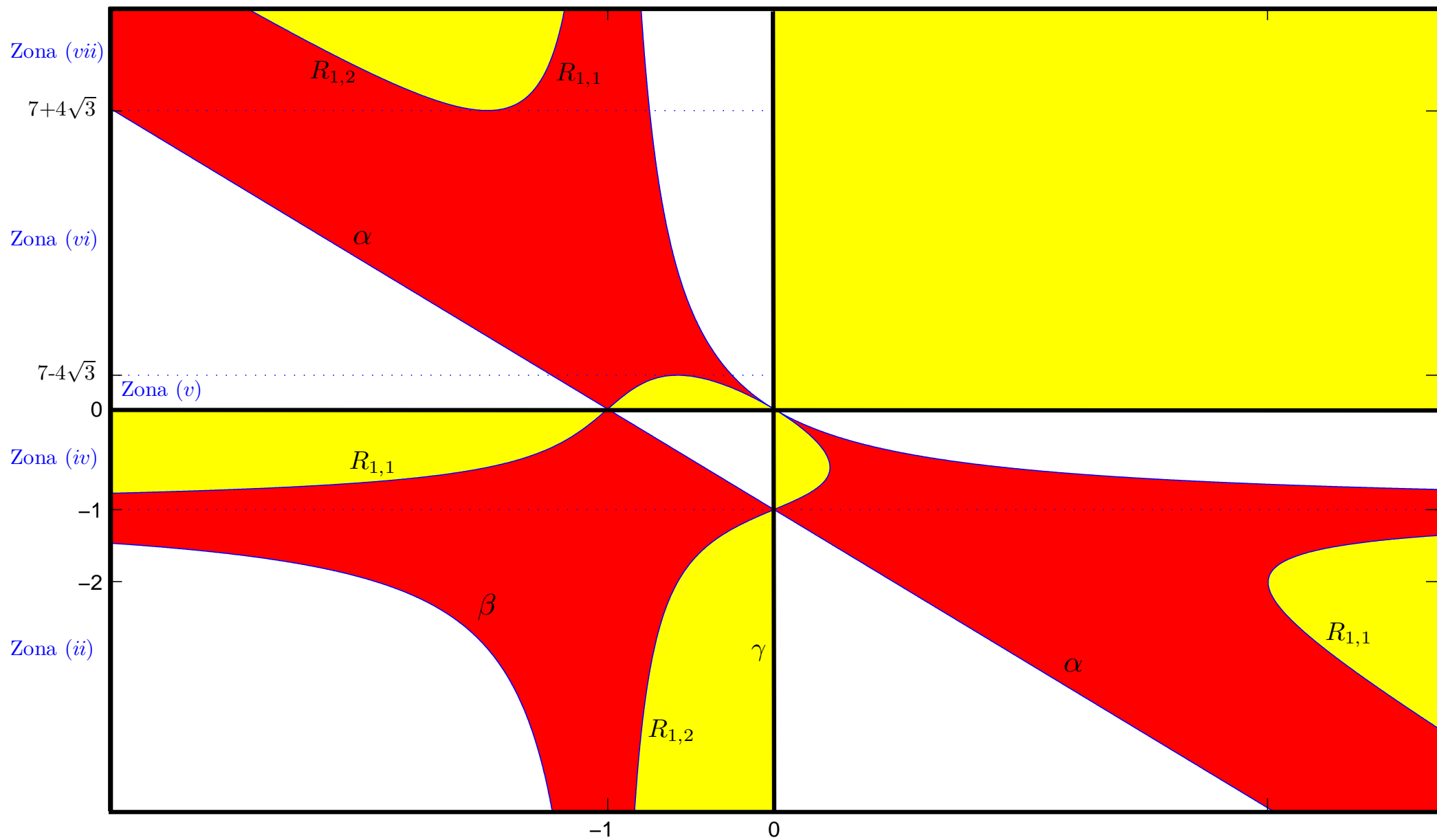


Fig. 2.7: Regiones \mathcal{R}_S (en rojo) y \mathcal{R}_U (en amarillo), separadas por las curvas $\alpha : R_1 = -(1 + R_2)$, $\beta : R_1 = \frac{-R_2}{1 + R_2}$, $\gamma : R_1 = 0$, $R_1 = R_{1,1}$ y $R_1 = R_{1,2}$. La zonas en blanco no son de interés (ver Observación 2.8).

En el caso particular $R_2 = -1$, la desigualdad (2.4.9) se transforma en

$$G_1(R_1, -1) := 1 \geq 0, \quad (2.4.13)$$

la cual se cumple para todo $R_1 \in \mathbb{R}^*$.

Para encontrar la separación entre las zonas \mathcal{R}_S y \mathcal{R}_U , basta con encontrar la solución de la inecuación

$$G_2(R_1, R_2) := (1 + R_1 + R_2)(1 + R_1^{-1} + R_2^{-1}) - 9 \geq 0,$$

que es equivalente a

$$G_2(R_1, R_2) = \frac{1}{R_1 R_2} (R_1^2(R_2 + 1) + R_1(R_2^2 - 6R_2 + 1) + R_2(R_2 + 1)) \geq 0. \quad (2.4.14)$$

Nuevamente, el caso $R_2 = -1$ es especial, pero aquí (2.4.14) se reduce a

$$G_2(R_1, R_2) = -8 \geq 0,$$

que es falsa para todo $R_1 \in \mathbb{R}^*$. Con esto y (2.4.13) se deduce (iii).

En el caso general $R_2 \neq -1$, si factorizamos (2.4.14) por $R_2 + 1$, se tiene que

$$G_2(R_1, R_2) = \frac{R_2 + 1}{R_1 R_2} \left(R_1^2 + R_1 \frac{R_2^2 - 6R_2 + 1}{R_2 + 1} + R_2 \right). \quad (2.4.15)$$

Entonces, para resolver la inecuación (2.4.14), podemos ver que es conveniente factorizar previamente la expresión cuadrática

$$R_1^2 + R_1 \frac{R_2^2 - 6R_2 + 1}{R_2 + 1} + R_2, \quad (2.4.16)$$

cuyo discriminante es

$$\Delta = \frac{(R_2 - 1)^2(R_2^2 - 14R_2 + 1)}{(R_2 + 1)^2} = \frac{(R_2 - 1)^2(R_2 - (7 + 4\sqrt{3}))(R_2 - (7 - 4\sqrt{3}))}{(R_2 + 1)^2}.$$

Así, si $R_2 \in [7 - 4\sqrt{3}, 7 + 4\sqrt{3}] \subseteq \mathbb{R}^+$, la cuadrática (2.4.16) es siempre mayor o igual a cero, y por lo tanto la inecuación (2.4.14) es equivalente a la inecuación

$$\frac{1}{R_1} \geq 0, \quad (2.4.17)$$

cuya solución es $(0, \infty)$. Con esto y (2.4.12), se deduce (vi).

Si $R_2 \notin [7 - 4\sqrt{3}, 7 + 4\sqrt{3}]$, la cuadrática (2.4.16) es factorizable como

$$(R_1 - R_{1,1})(R_1 - R_{1,2}),$$

donde $R_{1,1}$ y $R_{1,2}$ están dadas por

$$R_{1,1} = -\left(\frac{R_2^2 - 6R_2 + 1}{2(R_2 + 1)}\right) + \frac{(R_2 - 1)\sqrt{R_2^2 - 14R_2 + 1}}{2(R_2 + 1)}$$

$$R_{1,2} = -\left(\frac{R_2^2 - 6R_2 + 1}{2(R_2 + 1)}\right) - \frac{(R_2 - 1)\sqrt{R_2^2 - 14R_2 + 1}}{2(R_2 + 1)}.$$

Por lo tanto, podemos factorizar (2.4.15) del modo siguiente:

$$G_2(R_1, R_2) = \frac{R_2 + 1}{R_1 R_2} (R_1 - R_{1,1})(R_1 - R_{1,2}).$$

En este caso, la expresión $G_2(R_1, R_2)$ cambia de signo en los puntos

$$R_{1,1}, \quad R_{1,2}, \quad 0$$

y hacia $-\infty$ tiene el mismo signo que $\frac{R_2+1}{R_2}$. Con esto, podemos resolver la inecuación (2.4.14) para los diferentes valores de R_2 , del modo siguiente:

- Si $R_2 < -1$, se tiene que $R_1 \in [R_{1,2}, 0) \cup [R_{1,1}, +\infty)$,
- Si $R_2 \in (-1, 0)$, se tiene que $R_1 \in (-\infty, R_{1,1}] \cup (0, R_{1,2}]$,
- Si $R_2 \in (0, 7 - 4\sqrt{3})$, se tiene que $R_1 \in [R_{1,1}, R_{1,2}] \cup (0, +\infty)$,
- Si $R_2 > 7 + 4\sqrt{3}$, se tiene que $R_1 \in [R_{1,2}, R_{1,1}] \cup (0, +\infty)$.

Comparando este resultado y (2.4.10)–(2.4.11), se obtienen los casos restantes (ii), (iv), (v) y (vii). \square

Observación 2.10. *Del Corolario 1.25, se tienen tres posibles casos:*

- Si $(R_1, R_2) \in \mathcal{R}_S$, $\lambda \in \mathfrak{A}_\theta \cup \mathfrak{A}_{\pi-\theta}$, con $\theta = \cos^{-1} \sqrt{G(\theta_1, \theta_2)} \in (0, \pi/2]$
- Si $(R_1, R_2) \in \mathcal{R}_U$, $\lambda \in \mathfrak{B}_\theta \cup \mathfrak{C}_\theta$, con $\theta = \cosh^{-1} \sqrt{G(\theta_1, \theta_2)} \in (0, \infty)$.

Aquí, los conjuntos \mathfrak{A}_θ , \mathfrak{B}_θ y \mathfrak{C}_θ están definidos por

$$\mathfrak{A}_\theta = \{\lambda_i(\theta) : i \in \mathbb{N}\}, \quad \mathfrak{B}_\theta = \{\mu_i(\theta) : i \in \mathbb{N}\}, \quad \mathfrak{C}_\theta = \{\nu_i(\theta) : i \in \mathbb{N}\},$$

donde $\lambda_i(\theta)$, $\mu_i(\theta)$ y $\nu_i(\theta)$ son los valores propios mencionados en los problemas (1.3.2), (1.3.4) y (1.3.5), respectivamente, y la función G está dada por

$$G(\theta_1, \theta_2) = \frac{1}{9}(1 + R_1 + R_2)(1 + R_1^{-1} + R_2^{-1}).$$

Observación 2.11. *Los vectores propios obtenidos para cada valor de $\lambda = \lambda(R_1, R_2)$ satisfacen (2.4.1) y (2.4.3). Por lo tanto sus valores en los vértices (\mathbf{v}_i^j) y $(\hat{\mathbf{v}}_i^j)$ satisfacen la relación*

$$\Psi(\hat{\mathbf{v}}_i^j) = \pm R_1 \sqrt{\frac{1 + R_1^{-1} + R_2^{-1}}{1 + R_1 + R_2}} \Psi(\mathbf{v}_i^j). \quad (2.4.18)$$

Usando (2.2.4)–(2.2.5) y (2.4.18) se obtiene que los vectores propios están caracterizados por las relaciones:

$$\begin{aligned}\Psi(\mathbf{v}_i^j) &= R_1^i R_2^j \Psi(\mathbf{v}_0^0), \\ \Psi(\hat{\mathbf{v}}_i^j) &= \pm R_1^{i+1} R_2^j \sqrt{\frac{1 + R_1^{-1} + R_2^{-1}}{1 + R_1 + R_2}} \Psi(\mathbf{v}_0^0).\end{aligned}$$

Capítulo 3

Bases para el Grafeno

El objetivo de este capítulo es estudiar en forma más detallada la estructura del espacio de funciones $\Psi = (\Psi_a)_{a \in \mathcal{A}}$ que satisfacen las condiciones de Kirchhoff (2.1.10)–(2.1.11) y las ecuaciones (2.2.3). Consideraremos en todo el capítulo este tipo de funciones y que el parámetro λ es tal que $\varphi_2(1; \lambda) \neq 0$, donde $\varphi_2(\cdot; \lambda)$ es la función descrita en (1.2.25), y por lo tanto las conclusiones dadas en el Teorema 2.1 son ciertas. En la Sección 3.1 veremos que estas condiciones son suficientes para construir una base del espacio G , donde es necesario conocer únicamente los valores de la función $\Psi = (\Psi_a)_{a \in \mathcal{A}}$ en los vértices ubicados en una línea unidimensional del grafeno, que será bien definida más adelante. En la Sección 3.2 se estudian las propiedades de la base canónica encontrada, que en particular son funciones que tienen soporte no acotado y son no acotadas. Después, en la Sección 3.3, se cambia de estrategia buscando funciones base que sean de soporte compacto. Encontramos así una estructura polinómica al interior del grafeno, que permite definir bases cuyo soporte está restringido a un semiplano.

3.1. Una base canónica del grafeno

Definición 3.1. *En la red hexagonal G , llamaremos perfil L_q , $q \in \mathbb{Z}$, al conjunto de vértices siguiente (ver Figura 3.1):*

$$L_q = \{\mathbf{v}_{2k}^{q-k}, \hat{\mathbf{v}}_{2k}^{q-k}, \mathbf{v}_{2k+1}^{q-k}, \hat{\mathbf{v}}_{2k+1}^{q-k} : k \in \mathbb{Z}\}. \quad (3.1.1)$$

Así, todos los vértices de G pertenecen a uno de estos conjuntos, es decir

$$\mathcal{V} = \bigcup_{q \in \mathbb{Z}} L_q.$$

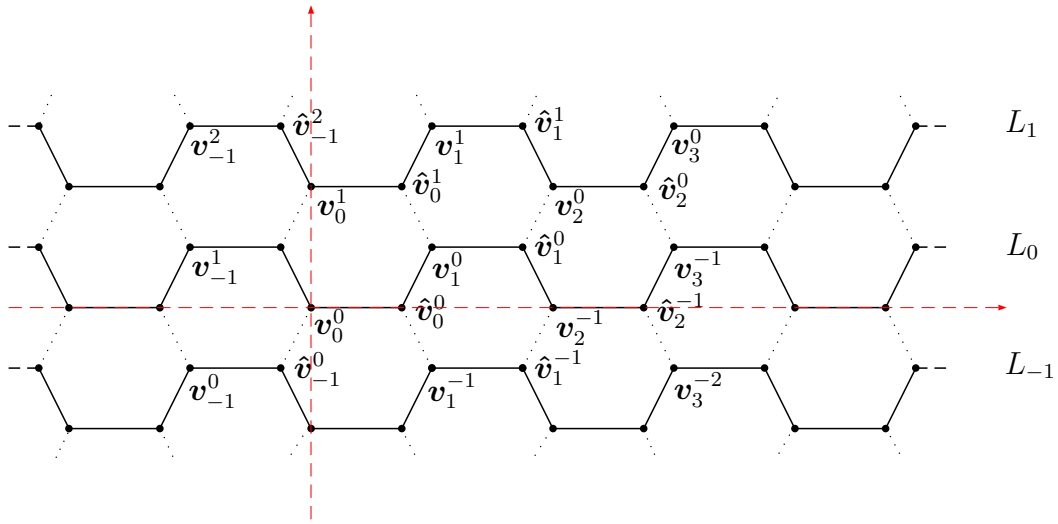


Fig. 3.1: Conjunto L_q , $q \in \{-1, 0, 1\} \subset \mathbb{Z}$, y sus respectivas aristas.

Observación 3.2. El perfil L_q está formado por cuatro vértices generadores, los cuales se repiten periódicamente con un período de $2e_1 - e_2$. Es decir, para todo $k \in \mathbb{N}$,

$$\mathbf{v}_{2k}^{q-k} = \mathbf{v}_0^q + k(2e_1 - e_2) \quad (3.1.2)$$

$$\hat{\mathbf{v}}_{2k}^{q-k} = \hat{\mathbf{v}}_0^q + k(2e_1 - e_2) \quad (3.1.3)$$

$$\mathbf{v}_{2k+1}^{q-k} = \mathbf{v}_1^q + k(2e_1 - e_2) \quad (3.1.4)$$

$$\hat{\mathbf{v}}_{2k+1}^{q-k} = \hat{\mathbf{v}}_1^q + k(2e_1 - e_2). \quad (3.1.5)$$

Proposición 3.3. Sea $\Psi \in L^2(G)$ tal que $\mathcal{H}\Psi = \lambda\Psi$. Si se conoce el valor de Ψ en los vértices de L_q , entonces se puede determinar el valor de Ψ en todo vértice y en toda arista de G usando las fórmulas recursivas siguientes:

$$\begin{pmatrix} \Psi\left(\hat{\mathbf{v}}_{2(k-1)+1}^{(q+1)-(k-1)}\right) \\ \Psi\left(\mathbf{v}_{2k}^{(q+1)-k}\right) \\ \Psi\left(\hat{\mathbf{v}}_{2k}^{(q+1)-k}\right) \\ \Psi\left(\mathbf{v}_{2k+1}^{(q+1)-k}\right) \end{pmatrix} = \mathcal{M} \begin{pmatrix} \Psi\left(\mathbf{v}_{2(k-1)+1}^{q-(k-1)}\right) \\ \Psi\left(\hat{\mathbf{v}}_{2(k-1)+1}^{q-(k-1)}\right) \\ \Psi\left(\mathbf{v}_{2k}^{q-k}\right) \\ \Psi\left(\hat{\mathbf{v}}_{2k}^{q-k}\right) \\ \Psi\left(\mathbf{v}_{2k+1}^{q-k}\right) \\ \Psi\left(\hat{\mathbf{v}}_{2k+1}^{q-k}\right) \end{pmatrix} \quad (3.1.6)$$

$$\begin{pmatrix} \Psi\left(\hat{\mathbf{v}}_{2(k-1)}^{(q-1)-k}\right) \\ \Psi\left(\mathbf{v}_{2(k-1)+1}^{(q-1)-k}\right) \\ \Psi\left(\hat{\mathbf{v}}_{2(k-1)+1}^{(q-1)-(k+1)}\right) \\ \Psi\left(\mathbf{v}_{2k}^{(q-1)-(k+1)}\right) \end{pmatrix} = \mathcal{M} \begin{pmatrix} \Psi\left(\mathbf{v}_{2(k-1)}^{q-k}\right) \\ \Psi\left(\hat{\mathbf{v}}_{2(k-1)}^{q-k}\right) \\ \Psi\left(\mathbf{v}_{2(k-1)+1}^{q-k}\right) \\ \Psi\left(\hat{\mathbf{v}}_{2(k-1)+1}^{q-k}\right) \\ \Psi\left(\mathbf{v}_{2k}^{q-(k+1)}\right) \\ \Psi\left(\hat{\mathbf{v}}_{2k}^{q-(k+1)}\right) \end{pmatrix}, \quad (3.1.7)$$

donde

$$\mathcal{M} = \begin{pmatrix} s & s^2 - 1 & s & 1 & s & 1 \\ -1 & -s & -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 & -s & -1 \\ 1 & s & 1 & s & s^2 - 1 & s \end{pmatrix}. \quad (3.1.8)$$

y

$$s = -3\varphi_1(1; \lambda),$$

con $\varphi_1(\cdot; \lambda)$ definida en (1.2.25).

DEMOSTRACIÓN. Para $q, k \in \mathbb{Z}$, consideremos los vértices ubicados en L_q y L_{q+1} como muestra la Figura 3.2. Recordemos que L_q tiene periodo cuatro, para todo $q \in \mathbb{Z}$.

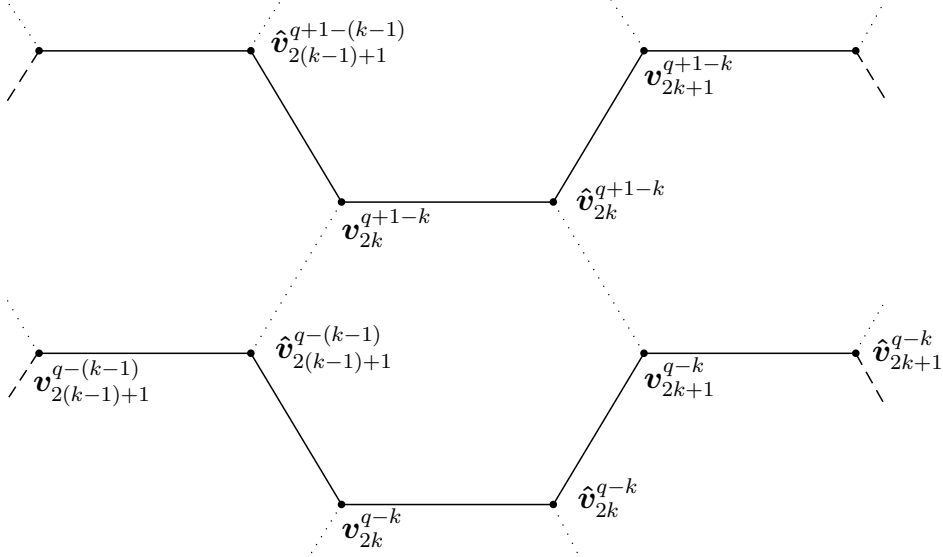


Fig. 3.2: Vértices de L_q y L_{q+1} , $k \in \mathbb{Z}$.

Para simplificar la notación, escribiremos Ψ_i^j en lugar de $\Psi(\mathbf{v}_i^j)$ y $\hat{\Psi}_i^j$ en lugar de $\Psi(\hat{\mathbf{v}}_i^j)$.

Utilizando (2.3.2), con $i = 2(k-1) + 1$ y $j = q - k$, y (2.3.1), con $i = 2k + 1$ y $j = k - q$, se tienen las siguientes ecuaciones (ver Figura 3.2):

$$\Psi_{2k}^{(q+1)-k} = - \left(\Psi_{2(k-1)+1}^{q-(k-1)} + s\hat{\Psi}_{2(k-1)+1}^{q-(k-1)} + \Psi_{2k}^{q-k} \right) \quad (3.1.9)$$

$$\hat{\Psi}_{2k}^{(q+1)-k} = - \left(\hat{\Psi}_{2k}^{q-k} + s\Psi_{2k+1}^{q-k} + \hat{\Psi}_{2k+1}^{q-k} \right). \quad (3.1.10)$$

De la misma manera, de (2.3.1) y (2.3.2), ambos con $i = 2k$ y $j = (q+1) - k$, se obtiene el sistema

$$\hat{\Psi}_{2(k-1)+1}^{(q+1)-(k-1)} = - \left(\hat{\Psi}_{2(k-1)+1}^{q-(k-1)} + s\Psi_{2k}^{(q+1)-k} + \hat{\Psi}_{2k}^{(q+1)-k} \right) \quad (3.1.11)$$

$$\Psi_{2k+1}^{(q+1)-k} = - \left(\Psi_{2k}^{(q+1)-k} + s\hat{\Psi}_{2k}^{(q+1)-k} + \Psi_{2k+1}^{q-k} \right). \quad (3.1.12)$$

Reemplazando (3.1.9) y (3.1.10) en (3.1.11) y (3.1.12), y factorizando se obtiene (3.1.6).

Analicemos ahora los vértices en L_{q-1} (ver Figura 3.3). Haciendo el mismo razonamiento anterior, de (2.3.1), con $i = 2(k-1) + 1$ y $j = (q-1) - k$, y (2.3.2), con $i = 2(k-1)$ y $j = q - k$, se tiene

$$\hat{\Psi}_{2(k-1)}^{(q-1)-k} = - \left(\hat{\Psi}_{2(k-1)}^{q-k} + s\Psi_{2(k-1)+1}^{(q-1)-k} + \hat{\Psi}_{2(k-1)+1}^{(q-1)-k} \right),$$

$$\Psi_{2(k-1)+1}^{(q-1)-k} = - \left(\Psi_{2(k-1)}^{q-k} + s\hat{\Psi}_{2(k-1)}^{q-k} + \Psi_{2(k-1)+1}^{q-k} \right).$$

Usando (2.3.1), con $i = 2k$ y $j = q - k$, y (2.3.2), con $i = 2(k-1) + 1$ y $j = (q-1) - k$, se tiene también

$$\hat{\Psi}_{2(k-1)+1}^{(q-1)-k} = - \left(\hat{\Psi}_{2(k-1)+1}^{q-k} + s\Psi_{2k}^{q-k} + \hat{\Psi}_{2k}^{q-k} \right)$$

$$\Psi_{2k}^{(q-1)-k} = - \left(\Psi_{2(k-1)+1}^{(q-1)-k} + s\hat{\Psi}_{2(k-1)+1}^{(q-1)-k} + \Psi_{2k}^{q-k} \right).$$

lo que completa la demostración de la proposición. \square

Corolario 3.4. *Si $\Psi \in L^2(G)$ tal que $\mathcal{H}\Psi = \lambda\Psi$ es igual a cero en todo vértice de L_q , para algún $q \in \mathbb{Z}$ fijo, entonces $\Psi \equiv 0$.*

DEMOSTRACIÓN. Es directa, pues si $\Psi(\mathbf{x}) = 0$ en los vértices de L_q , entonces de (2.3.1) y (2.3.2) podemos concluir que $\Psi(\mathbf{x}) = 0$ en los vértices de L_{q+k} , para todo $k \in \mathbb{Z}$. Así, Ψ es la función nula en toda arista de G , y por tanto en todo G . \square

Observación 3.5. *La Proposición 3.3, nos permite decir que el perfil L_q es una base del grafo G , pues toda función $\Psi \in L^2(G)$, tal que $\mathcal{H}\Psi = \lambda\Psi$, se puede generar a partir de los valores de Ψ en cada vértice de L_q .*

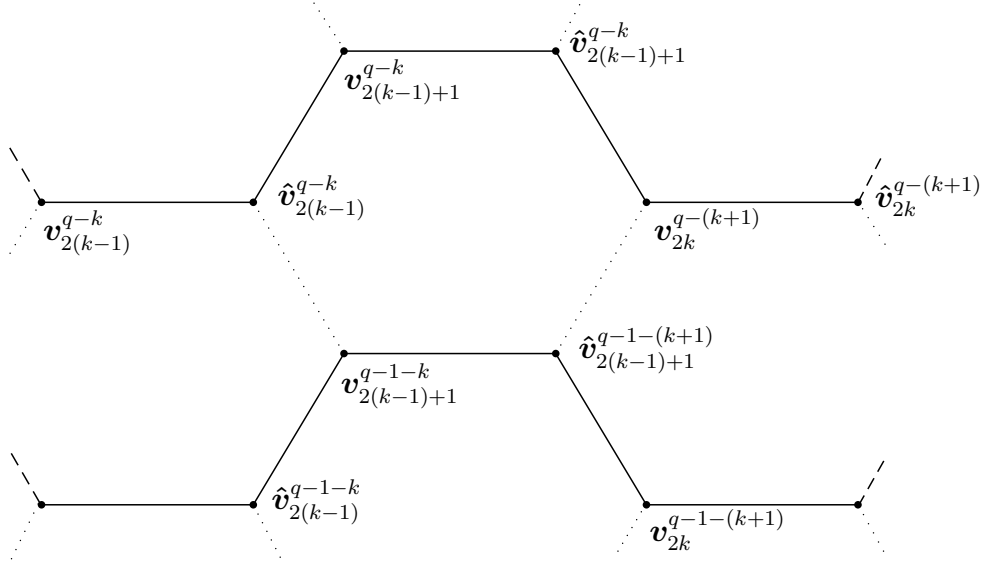


Fig. 3.3: Vértices de L_q y L_{q-1} , $k \in \mathbb{Z}$.

Observación 3.6. Como todos los perfiles L_q pueden ser elegidos para definir una base del grafeno, sin pérdida de generalidad, definiremos en forma más explícita las funciones base para el caso $q = 0$. Para ello, usando la estructura unidimensional de L_0 , sabemos que una función arbitraria en este perfil se puede generar introduciendo una base canónica, la que está formada por funciones cuyos valores en cada vértice de L_0 son iguales a cero salvo en uno de ellos, donde vale uno. Además, como los vértices de L_0 están definidos en (3.1.1) a partir de cuatro vértices básicos y la periodicidad observada en (3.1.2)–(3.1.5), las funciones de la base canónica en L_0 serán denotadas por $\Phi_{1,k}$, $\Phi_{2,k}$, $\Phi_{3,k}$, $\Phi_{4,k}$, $k \in \mathbb{Z}$, tales que

$$\Phi_{1,k}(\mathbf{v}) = 0 \quad \forall \mathbf{v} \in L_0 \setminus \{\mathbf{v}_{2k}^{-k}\}, \quad \Phi_{1,k}(\mathbf{v}_{2k}^{-k}) = 1, \quad (3.1.13)$$

$$\Phi_{2,k}(\mathbf{v}) = 0 \quad \forall \mathbf{v} \in L_0 \setminus \{\hat{\mathbf{v}}_{2k}^{-k}\}, \quad \Phi_{2,k}(\hat{\mathbf{v}}_{2k}^{-k}) = 1, \quad (3.1.14)$$

$$\Phi_{3,k}(\mathbf{v}) = 0 \quad \forall \mathbf{v} \in L_0 \setminus \{\mathbf{v}_{2k+1}^{-k}\}, \quad \Phi_{3,k}(\mathbf{v}_{2k+1}^{-k}) = 1, \quad (3.1.15)$$

$$\Phi_{4,k}(\mathbf{v}) = 0 \quad \forall \mathbf{v} \in L_0 \setminus \{\hat{\mathbf{v}}_{2k+1}^{-k}\}, \quad \Phi_{4,k}(\hat{\mathbf{v}}_{2k+1}^{-k}) = 1. \quad (3.1.16)$$

Una vez definidas estas funciones en el perfil L_0 , se extienden a todo G gracias a la Proposición 3.3, y así permiten formar una base canónica de todo el grafeno G .

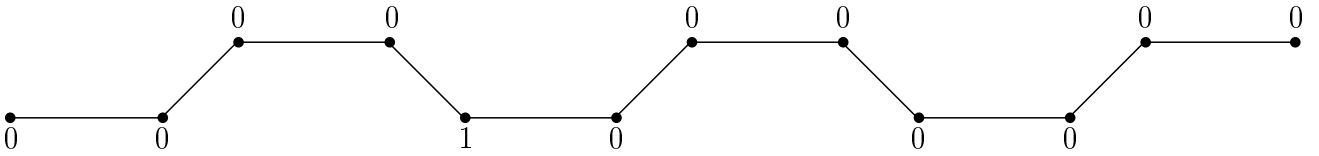


Fig. 3.4: Función $\Phi_{1,k}$ en algunos vértices de L_0 , incluyendo el vértice \mathbf{v}_{2k}^{-k} donde es igual a uno.

3.2. Propiedades de la base canónica

En la Observación 3.6 se han introducido las funciones $\Phi_{1,k}, \Phi_{2,k}, \Phi_{3,k}, \Phi_{4,k}$, $k \in \mathbb{Z}$, que forman la llamada base canónica del grafeno. También, por definición, sabemos cuanto valen estas funciones en los vértices del perfil L_0 . En esta sección no interesa calcular los valores de estas funciones en los otros perfiles L_q , para $q \in \mathbb{Z} \setminus \{0\}$.

Una de las preguntas que quisiéramos abordar es si el soporte, que es bien acotado en el perfil L_0 , continúa siendo acotado en el resto de los perfiles y en el grafeno completo. Usando la periodicidad del perfil L_0 todo el análisis de esta sección puede concentrarse en el estudio de las funciones $\Phi_{1,0}, \Phi_{2,0}, \Phi_{3,0}$ y $\Phi_{4,0}$. Una vez conocidas completamente estas cuatro funciones, las demás corresponden a traslaciones horizontales (según el vector $2\mathbf{e}_1 - \mathbf{e}_2$).

Teorema 3.7. *Consideremos la función $\Phi_{1,0}$ definida en (3.1.13) y el vector $\mathbf{X} = 2\mathbf{e}_1 - \mathbf{e}_2 = (3, 0)$.*

(i) *En todos los perfiles L_q , con $q \geq 1$, se cumple que para todo $j \geq q$*

$$\Phi_{1,0}(\hat{\mathbf{v}}_1^q + (j-1)\mathbf{X}) = \Phi_{1,0}(\mathbf{v}_0^q + j\mathbf{X}) = \Phi_{1,0}(\hat{\mathbf{v}}_0^q + j\mathbf{X}) = \Phi_{1,0}(\mathbf{v}_1^q + j\mathbf{X}) = 0. \quad (3.2.1)$$

(ii) *En todos los perfiles L_q , con $q \geq 1$, se cumple que para todo $j \geq -q$*

$$\Phi_{1,0}(\hat{\mathbf{v}}_1^q + (j-1)\mathbf{X}) = \Phi_{1,0}(\mathbf{v}_0^q + j\mathbf{X}) = \Phi_{1,0}(\hat{\mathbf{v}}_0^q + j\mathbf{X}) = \Phi_{1,0}(\mathbf{v}_1^q + j\mathbf{X}) = 0. \quad (3.2.2)$$

(iii) *En todos los perfiles L_q , con $q \geq 1$, se cumple que para $j = q - 1$*

$$\begin{aligned} \Phi_{1,0}(\hat{\mathbf{v}}_1^q + (j-1)\mathbf{X}) &= s, & \Phi_{1,0}(\mathbf{v}_0^q + j\mathbf{X}) &= -1, \\ \Phi_{1,0}(\hat{\mathbf{v}}_0^q + j\mathbf{X}) &= 0, & \Phi_{1,0}(\mathbf{v}_1^q + j\mathbf{X}) &= 1. \end{aligned} \quad (3.2.3)$$

(iv) *En todos los perfiles L_q , con $q \geq 2$, se cumple que para $j = -q + 1$*

$$\begin{aligned} \Phi_{1,0}(\hat{\mathbf{v}}_1^q + (j-1)\mathbf{X}) &= s, & \Phi_{1,0}(\mathbf{v}_0^q + j\mathbf{X}) &= 0, \\ \Phi_{1,0}(\hat{\mathbf{v}}_0^q + j\mathbf{X}) &= -s, & \Phi_{1,0}(\mathbf{v}_1^q + j\mathbf{X}) &= s^2. \end{aligned} \quad (3.2.4)$$

(v) *En todos los perfiles L_q , con $q \geq 2$, se cumple que para $j = q - 2$*

$$\begin{aligned} \Phi_{1,0}(\hat{\mathbf{v}}_1^q + (j-1)\mathbf{X}) &= (2q-3)s(s^2-1), \\ \Phi_{1,0}(\mathbf{v}_0^q + j\mathbf{X}) &= -(2q-3)(s^2-1), \\ \Phi_{1,0}(\hat{\mathbf{v}}_0^q + j\mathbf{X}) &= -s, \\ \Phi_{1,0}(\mathbf{v}_1^q + j\mathbf{X}) &= (2q-2)(s^2-1). \end{aligned} \quad (3.2.5)$$

(vi) En todos los perfiles L_q , con $q \geq 3$, se cumple que para $j = -q + 2$

$$\begin{aligned}\Phi_{1,0}(\hat{\mathbf{v}}_1^q + (j-1)\mathbf{X}) &= (2q-3)s(s^2+1), \\ \Phi_{1,0}(\mathbf{v}_0^q + j\mathbf{X}) &= -s^2, \\ \Phi_{1,0}(\hat{\mathbf{v}}_0^q + j\mathbf{X}) &= -(2q-4)s(s^2+1), \\ \Phi_{1,0}(\mathbf{v}_1^q + j\mathbf{X}) &= (2q-4)s^2(s^2+1).\end{aligned}\tag{3.2.6}$$

(vii) Los valores de $\Phi_{1,0}$ en los perfiles L_q con $q < 0$ se obtiene de las partes anteriores considerando la antisimetría siguiente:

$$\frac{y_1 + y_2}{2} = \frac{\sqrt{3}}{2} \Rightarrow \Phi_{1,0}(x, y_1) + \Phi_{1,0}(x, y_2) = 0.\tag{3.2.7}$$

DEMOSTRACIÓN. (i) Probaremos que (3.2.1) es cierta para todo $q \geq 1$ por inducción sobre q .

Para $q = 1$, debemos demostrar que

$$\Phi_{1,0}(\hat{\mathbf{v}}_1^1 + (j-1)\mathbf{X}) = \Phi_{1,0}(\mathbf{v}_0^1 + j\mathbf{X}) = \Phi_{1,0}(\hat{\mathbf{v}}_0^1 + j\mathbf{X}) = \Phi_{1,0}(\mathbf{v}_1^1 + j\mathbf{X}) = 0, \forall j \geq 1,$$

es decir,

$$\Phi_{1,0}(\hat{\mathbf{v}}_{2(j-1)+1}^{1-(j-1)}) = \Phi_{1,0}(\mathbf{v}_{2j}^{1-j}) = \Phi_{1,0}(\hat{\mathbf{v}}_{2j}^{1-j}) = \Phi_{1,0}(\mathbf{v}_{2j+1}^{1-j}) = 0, \quad \forall j \geq 1.\tag{3.2.8}$$

Usando (3.1.6) con $q = 0$ y $k = j$, se tiene que

$$\begin{pmatrix} \Phi_{1,0}(\hat{\mathbf{v}}_{2(j-1)+1}^{1-(j-1)}) \\ \Phi_{1,0}(\mathbf{v}_{2j}^{1-j}) \\ \Phi_{1,0}(\hat{\mathbf{v}}_{2j}^{1-j}) \\ \Phi_{1,0}(\mathbf{v}_{2j+1}^{1-j}) \end{pmatrix} = \mathcal{M} \begin{pmatrix} \Phi_{1,0}(\mathbf{v}_{2(j-1)+1}^{-(j-1)}) \\ \Phi_{1,0}(\hat{\mathbf{v}}_{2(j-1)+1}^{-(j-1)}) \\ \Phi_{1,0}(\mathbf{v}_{2j}^{-j}) \\ \Phi_{1,0}(\hat{\mathbf{v}}_{2j}^{-j}) \\ \Phi_{1,0}(\mathbf{v}_{2j+1}^{-j}) \\ \Phi_{1,0}(\hat{\mathbf{v}}_{2j+1}^{-j}) \end{pmatrix}.$$

El lado derecho hace intervenir los valores de la función $\Phi_{1,0}$ en el perfil L_0 , que están dados por (3.1.13), y se observa que todos son nulos cuando $j > 0$, de donde se obtiene que (3.2.8) es cierta.

Supongamos ahora que la identidad (3.2.1) es válida para cierto valor de q . Veamos que también es válida para $q + 1$, es decir, demostremos que para todo $j \geq q + 1$

$$\Phi_{1,0}(\hat{\mathbf{v}}_1^{q+1} + (j-1)\mathbf{X}) = \Phi_{1,0}(\mathbf{v}_0^{q+1} + j\mathbf{X}) = \Phi_{1,0}(\hat{\mathbf{v}}_0^{q+1} + j\mathbf{X}) = \Phi_{1,0}(\mathbf{v}_1^{q+1} + j\mathbf{X}) = 0,$$

esto es,

$$\Phi_{1,0}(\hat{\mathbf{v}}_{2(j-1)+1}^{(q+1)-(j-1)}) = \Phi_{1,0}(\mathbf{v}_{2j}^{(q+1)-j}) = \Phi_{1,0}(\hat{\mathbf{v}}_{2j}^{(q+1)-j}) = \Phi_{1,0}(\mathbf{v}_{2j+1}^{(q+1)-j}) = 0, \quad \forall j \geq q + 1.$$

Utilizando la identidad (3.1.6) con $k = j$,

$$\begin{pmatrix} \Phi_{1,0}(\hat{\mathbf{v}}_{2(j-1)+1}^{(q+1)-(j-1)}) \\ \Phi_{1,0}(\mathbf{v}_{2j}^{(q+1)-j}) \\ \Phi_{1,0}(\hat{\mathbf{v}}_{2j}^{(q+1)-j}) \\ \Phi_{1,0}(\mathbf{v}_{2j+1}^{(q+1)-j}) \end{pmatrix} = \mathcal{M} \begin{pmatrix} \Phi_{1,0}(\mathbf{v}_{2(j-1)+1}^{q-(j-1)}) \\ \Phi_{1,0}(\hat{\mathbf{v}}_{2(j-1)+1}^{q-(j-1)}) \\ \Phi_{1,0}(\mathbf{v}_{2j}^{q-j}) \\ \Phi_{1,0}(\hat{\mathbf{v}}_{2j}^{q-j}) \\ \Phi_{1,0}(\mathbf{v}_{2j+1}^{q-j}) \\ \Phi_{1,0}(\hat{\mathbf{v}}_{2j+1}^{q-j}) \end{pmatrix}.$$

Aquí nuevamente el lado derecho de la igualdad es el vector nulo. En efecto, los cuatro términos centrales son nulos usando directamente la hipótesis de inducción con el índice j , que por transitividad es mayor o igual a q . El término inferior es nulo, usando la hipótesis de inducción para el índice $j + 1 \geq q$. Por último, el primero es nulo usando la hipótesis de inducción para el índice $j - 1 \geq q$.

De este modo, la igualdad (3.2.1) es cierta para todo $q \geq 1$.

(ii) Probaremos que (3.2.2) es cierta para todo $q \geq 1$ por inducción sobre q .

Para $q = 1$, debemos demostrar que

$$\Phi_{1,0}(\hat{\mathbf{v}}_1^1 + (j-1)\mathbf{X}) = \Phi_{1,0}(\mathbf{v}_0^1 + j\mathbf{X}) = \Phi_{1,0}(\hat{\mathbf{v}}_0^1 + j\mathbf{X}) = \Phi_{1,0}(\mathbf{v}_1^1 + j\mathbf{X}) = 0,$$

es decir,

$$\Phi_{1,0}(\hat{\mathbf{v}}_{2(j-1)+1}^{1-(j-1)}) = \Phi_{1,0}(\mathbf{v}_{2j}^{1-j}) = \Phi_{1,0}(\hat{\mathbf{v}}_{2j}^{1-j}) = \Phi_{1,0}(\mathbf{v}_{2j+1}^{1-j}) = 0, \quad \forall j \leq -1. \quad (3.2.9)$$

Para ello, usamos (3.1.6) con $q = 0$ y $k = j$, y así se tiene que

$$\begin{pmatrix} \Phi_{1,0}(\hat{\mathbf{v}}_{2(j-1)+1}^{1-(j-1)}) \\ \Phi_{1,0}(\mathbf{v}_{2j}^{1-j}) \\ \Phi_{1,0}(\hat{\mathbf{v}}_{2j}^{1-j}) \\ \Phi_{1,0}(\mathbf{v}_{2j+1}^{1-j}) \end{pmatrix} = \mathcal{M} \begin{pmatrix} \Phi_{1,0}(\mathbf{v}_{2(j-1)+1}^{-(j-1)}) \\ \Phi_{1,0}(\hat{\mathbf{v}}_{2(j-1)+1}^{-(j-1)}) \\ \Phi_{1,0}(\mathbf{v}_{2j}^{-j}) \\ \Phi_{1,0}(\hat{\mathbf{v}}_{2j}^{-j}) \\ \Phi_{1,0}(\mathbf{v}_{2j+1}^{-j}) \\ \Phi_{1,0}(\hat{\mathbf{v}}_{2j+1}^{-j}) \end{pmatrix}.$$

Como el lado derecho hace intervenir los valores de la función $\Phi_{1,0}$ en el perfil L_0 , que están dados por (3.1.13), se observa que todos son nulos cuando $j \leq -1$, de donde se obtiene que (3.2.9) es cierta.

Supongamos ahora que la identidad (3.2.2) es válida para cierto valor de q . Demostremos que también es válida para $q + 1$, es decir, demostremos que para todo $j \leq -q - 1$

$$\Phi_{1,0}(\hat{\mathbf{v}}_1^{q+1} + (j-1)\mathbf{X}) = \Phi_{1,0}(\mathbf{v}_0^{q+1} + j\mathbf{X}) = \Phi_{1,0}(\hat{\mathbf{v}}_0^{q+1} + j\mathbf{X}) = \Phi_{1,0}(\mathbf{v}_1^{q+1} + j\mathbf{X}) = 0,$$

esto es,

$$\Phi_{1,0}(\hat{\mathbf{v}}_{2(j-1)+1}^{(q+1)-(j-1)}) = \Phi_{1,0}(\mathbf{v}_{2j}^{(q+1)-j}) = \Phi_{1,0}(\hat{\mathbf{v}}_{2j}^{(q+1)-j}) = \Phi_{1,0}(\mathbf{v}_{2j+1}^{(q+1)-j}) = 0, \quad \forall j \leq -q - 1.$$

Utilizando nuevamente la identidad (3.1.6) con $k = j$.

$$\begin{pmatrix} \Phi_{1,0}(\hat{\mathbf{v}}_{2(j-1)+1}^{(q+1)-(j-1)}) \\ \Phi_{1,0}(\mathbf{v}_{2j}^{(q+1)-j}) \\ \Phi_{1,0}(\hat{\mathbf{v}}_{2j}^{(q+1)-j}) \\ \Phi_{1,0}(\mathbf{v}_{2j+1}^{(q+1)-j}) \end{pmatrix} = \mathcal{M} \begin{pmatrix} \Phi_{1,0}(\mathbf{v}_{2(j-1)+1}^{q-(j-1)}) \\ \Phi_{1,0}(\hat{\mathbf{v}}_{2(j-1)+1}^{q-(j-1)}) \\ \Phi_{1,0}(\mathbf{v}_{2j}^{q-j}) \\ \Phi_{1,0}(\hat{\mathbf{v}}_{2j}^{q-j}) \\ \Phi_{1,0}(\mathbf{v}_{2j+1}^{i-j}) \\ \Phi_{1,0}(\hat{\mathbf{v}}_{2j+1}^{q-j}) \end{pmatrix}.$$

Aquí otra vez el lado derecho de la igualdad es el vector nulo. En efecto, los cuatro términos centrales son nulos usando directamente la hipótesis de inducción ya que $j \leq -q - 1 \leq -q$. El término superior es nulo, usando la hipótesis de inducción para el índice $j - 1 \leq -q$. Finalmente, el último término es nulo, usando la hipótesis de inducción para el índice $j + 1 \leq -q$.

De este modo, la igualdad (3.2.2) es cierta para todo $q \geq 1$.

(iii) Para demostrar que (3.2.3) es cierta para todo $q \geq 1$, procederemos nuevamente por inducción.

Para $q = 1$, debemos demostrar que, para $j = q - 1 = 0$,

$$\begin{aligned} \Phi_{1,0}(\hat{\mathbf{v}}_1^1 + (j - 1)\mathbf{X}) &= s, & \Phi_{1,0}(\mathbf{v}_0^1 + j\mathbf{X}) &= -1, \\ \Phi_{1,0}(\hat{\mathbf{v}}_0^1 + j\mathbf{X}) &= 0, & \Phi_{1,0}(\mathbf{v}_1^1 + j\mathbf{X}) &= 1, \end{aligned}$$

es decir,

$$\Phi_{1,0}(\hat{\mathbf{v}}_{-1}^2) = s, \quad \Phi_{1,0}(\mathbf{v}_0^1) = -1, \quad \Phi_{1,0}(\hat{\mathbf{v}}_0^1) = 0, \quad \Phi_{1,0}(\mathbf{v}_1^1) = 1. \quad (3.2.10)$$

Para ello, usamos (3.1.6) con $q = 0$ y $k = 0$, y así la igualdad (3.2.10) es una consecuencia directa del siguiente cálculo:

$$\begin{pmatrix} \Phi_{1,0}(\hat{\mathbf{v}}_{-1}^2) \\ \Phi_{1,0}(\mathbf{v}_0^1) \\ \Phi_{1,0}(\hat{\mathbf{v}}_0^1) \\ \Phi_{1,0}(\mathbf{v}_1^1) \end{pmatrix} = \mathcal{M} \begin{pmatrix} \Phi_{1,0}(\mathbf{v}_{-1}^1) \\ \Phi_{1,0}(\hat{\mathbf{v}}_{-1}^1) \\ \Phi_{1,0}(\mathbf{v}_0^0) \\ \Phi_{1,0}(\hat{\mathbf{v}}_0^0) \\ \Phi_{1,0}(\mathbf{v}_1^0) \\ \Phi_{1,0}(\hat{\mathbf{v}}_1^0) \end{pmatrix} = \mathcal{M} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} = \mathcal{M}_{\bullet,3}.$$

Supongamos ahora que la identidad (3.2.3) es válida para cierto valor de q . Demostremos que también es válida para $q + 1$, es decir, demostremos que, para $j = (q + 1) - 1 = q$,

$$\begin{aligned}\Phi_{1,0}(\hat{\mathbf{v}}_1^{q+1} + (j-1)\mathbf{X}) &= s, & \Phi_{1,0}(\mathbf{v}_0^{q+1} + j\mathbf{X}) &= -1, \\ \Phi_{1,0}(\hat{\mathbf{v}}_0^{q+1} + j\mathbf{X}) &= 0, & \Phi_{1,0}(\mathbf{v}_1^{q+1} + j\mathbf{X}) &= 1,\end{aligned}$$

esto es,

$$\Phi_{1,0}(\hat{\mathbf{v}}_{2(q-1)+1}^2) = s, \quad \Phi_{1,0}(\mathbf{v}_{2q}^1) = -1, \quad \Phi_{1,0}(\hat{\mathbf{v}}_{2q}^1) = 0, \quad \Phi_{1,0}(\mathbf{v}_{2q+1}^1) = 1. \quad (3.2.11)$$

Utilizando una vez más la identidad (3.1.6) con $k = q$,

$$\begin{pmatrix} \Phi_{1,0}(\hat{\mathbf{v}}_{2(q-1)+1}^2) \\ \Phi_{1,0}(\mathbf{v}_{2q}^1) \\ \Phi_{1,0}(\hat{\mathbf{v}}_{2q}^1) \\ \Phi_{1,0}(\mathbf{v}_{2q+1}^1) \end{pmatrix} = \mathcal{M} \begin{pmatrix} \Phi_{1,0}(\mathbf{v}_{2(q-1)+1}^1) \\ \Phi_{1,0}(\hat{\mathbf{v}}_{2(q-1)+1}^1) \\ \Phi_{1,0}(\mathbf{v}_{2q}^0) \\ \Phi_{1,0}(\hat{\mathbf{v}}_{2q}^0) \\ \Phi_{1,0}(\mathbf{v}_{2q+1}^0) \\ \Phi_{1,0}(\hat{\mathbf{v}}_{2q+1}^0) \end{pmatrix}. \quad (3.2.12)$$

De la identidad (3.2.1) con $j = q$ se tiene que $\Phi_{1,0}(\hat{\mathbf{v}}_{2(q-1)+1}^1) = \Phi_{1,0}(\mathbf{v}_{2q}^0) = \Phi_{1,0}(\hat{\mathbf{v}}_{2q}^0) = \Phi_{1,0}(\mathbf{v}_{2q+1}^0) = 0$. Además, también de la identidad (3.2.1) con $j = q+1$ se tiene que $\Phi_{1,0}(\hat{\mathbf{v}}_{2q+1}^0) = 0$. Por último, usando la hipótesis de inducción (3.2.3) se tiene que $\Phi_{1,0}(\mathbf{v}_{2(q-1)+1}^1) = 1$. Así, la identidad (3.2.12) se reduce a

$$\begin{pmatrix} \Phi_{1,0}(\hat{\mathbf{v}}_{2(q-1)+1}^2) \\ \Phi_{1,0}(\mathbf{v}_{2q}^1) \\ \Phi_{1,0}(\hat{\mathbf{v}}_{2q}^1) \\ \Phi_{1,0}(\mathbf{v}_{2q+1}^1) \end{pmatrix} = \mathcal{M} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} = \mathcal{M}_{\bullet,1}.$$

Por lo tanto, (3.2.11) es cierta gracias a la fórmula (3.1.8), donde se puede ver el valor de la primera columna de la matriz \mathcal{M} .

Así, queda demostrada la fórmula (3.2.3) para todo $q \geq 1$.

(iv) Para demostrar que (3.2.4) es cierta para todo $q \geq 2$, procederemos nuevamente por inducción.

Para $q = 2$, debemos demostrar que, para $j = -q + 1 = -1$,

$$\begin{aligned}\Phi_{1,0}(\hat{\mathbf{v}}_1^2 + (j-1)\mathbf{X}) &= s, & \Phi_{1,0}(\mathbf{v}_0^2 + j\mathbf{X}) &= 0, \\ \Phi_{1,0}(\hat{\mathbf{v}}_0^2 + j\mathbf{X}) &= -s, & \Phi_{1,0}(\mathbf{v}_1^2 + j\mathbf{X}) &= s^2,\end{aligned}$$

es decir,

$$\begin{aligned}\Phi_{1,0}(\hat{\mathbf{v}}_{-3}^4) &= s, & \Phi_{1,0}(\mathbf{v}_{-2}^3) &= 0, \\ \Phi_{1,0}(\hat{\mathbf{v}}_{-2}^3) &= -s, & \Phi_{1,0}(\mathbf{v}_{-1}^3) &= s^2.\end{aligned}\tag{3.2.13}$$

Para ello, usamos (3.1.6) con $q = 1$ y $k = -1$, y así la igualdad (3.2.13) es una consecuencia directa del siguiente cálculo:

$$\begin{pmatrix} \Phi_{1,0}(\hat{\mathbf{v}}_{-3}^4) \\ \Phi_{1,0}(\mathbf{v}_{-2}^3) \\ \Phi_{1,0}(\hat{\mathbf{v}}_{-2}^3) \\ \Phi_{1,0}(\mathbf{v}_{-1}^3) \end{pmatrix} = \mathcal{M} \begin{pmatrix} \Phi_{1,0}(\mathbf{v}_{-3}^3) \\ \Phi_{1,0}(\hat{\mathbf{v}}_{-3}^3) \\ \Phi_{1,0}(\mathbf{v}_{-2}^2) \\ \Phi_{1,0}(\hat{\mathbf{v}}_{-2}^2) \\ \Phi_{1,0}(\mathbf{v}_{-1}^2) \\ \Phi_{1,0}(\hat{\mathbf{v}}_{-1}^2) \end{pmatrix},\tag{3.2.14}$$

De (3.2.9) con $j = -1$, $\Phi_{1,0}(\hat{\mathbf{v}}_{-3}^3) = \Phi_{1,0}(\mathbf{v}_{-2}^2) = \Phi_{1,0}(\hat{\mathbf{v}}_{-2}^2) = \Phi_{1,0}(\mathbf{v}_{-1}^2) = 0$, de (3.2.9) con $j = -2$, $\Phi_{1,0}(\mathbf{v}_{-3}^3) = 0$ y de (3.2.3) con $q = 1$, $\Phi_{1,0}(\hat{\mathbf{v}}_{-1}^2) = s$. Así, el lado derecho de (3.2.14) es igual a

$$\mathcal{M} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ s \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} s \\ 0 \\ -s \\ s^2 \end{pmatrix}.$$

Supongamos ahora que la identidad (3.2.4) es válida para cierto valor de q . Demostremos que también es válida para $q + 1$, es decir, demostremos que, para $j = -(q + 1) + 1 = -q$,

$$\begin{aligned}\Phi_{1,0}(\hat{\mathbf{v}}_1^{q+1} + (j - 1)\mathbf{X}) &= s, & \Phi_{1,0}(\mathbf{v}_0^{q+1} + j\mathbf{X}) &= 0, \\ \Phi_{1,0}(\hat{\mathbf{v}}_0^{q+1} + j\mathbf{X}) &= -s, & \Phi_{1,0}(\mathbf{v}_1^{q+1} + j\mathbf{X}) &= s^2,\end{aligned}$$

esto es,

$$\begin{aligned}\Phi_{1,0}(\hat{\mathbf{v}}_{-2(q+1)+1}^{2q+2}) &= s, & \Phi_{1,0}(\mathbf{v}_{-2q}^{2q+1}) &= 0, \\ \Phi_{1,0}(\hat{\mathbf{v}}_{-2q}^{2q+1}) &= -s, & \Phi_{1,0}(\mathbf{v}_{-2q+1}^{2q+1}) &= s^2.\end{aligned}\tag{3.2.15}$$

Utilizando una vez más la identidad (3.1.6) con $k = -q$,

$$\begin{pmatrix} \Phi_{1,0}(\hat{\mathbf{v}}_{-2(q+1)+1}^{2q+2}) \\ \Phi_{1,0}(\mathbf{v}_{-2q}^{2q+1}) \\ \Phi_{1,0}(\hat{\mathbf{v}}_{-2q}^{2q+1}) \\ \Phi_{1,0}(\mathbf{v}_{-2q+1}^{2q+1}) \end{pmatrix} = \mathcal{M} \begin{pmatrix} \Phi_{1,0}(\mathbf{v}_{-2(q+1)+1}^{2q+1}) \\ \Phi_{1,0}(\hat{\mathbf{v}}_{-2(q+1)+1}^{2q+1}) \\ \Phi_{1,0}(\mathbf{v}_{-2q}^{2q}) \\ \Phi_{1,0}(\hat{\mathbf{v}}_{-2q}^{2q}) \\ \Phi_{1,0}(\mathbf{v}_{-2q+1}^{2q}) \\ \Phi_{1,0}(\hat{\mathbf{v}}_{-2q+1}^{2q}) \end{pmatrix}. \quad (3.2.16)$$

De (3.2.2) con $j = -q$, $\Phi_{1,0}(\hat{\mathbf{v}}_{-2(q+1)+1}^{2q+1}) = \Phi_{1,0}(\mathbf{v}_{-2q}^{2q}) = \Phi_{1,0}(\hat{\mathbf{v}}_{-2q}^{2q}) = \Phi_{1,0}(\mathbf{v}_{-2q+1}^{2q}) = 0$, de (3.2.2) con $j = -q - 1$, $\Phi_{1,0}(\mathbf{v}_{-2(q+1)+1}^{2q+1}) = 0$ y de la hipótesis de inducción (3.2.4), $\Phi_{1,0}(\hat{\mathbf{v}}_{-2q+1}^{2q}) = s$. Así, la identidad (3.2.16) se reduce a

$$\begin{pmatrix} \Phi_{1,0}(\hat{\mathbf{v}}_{-2(q+1)+1}^{2q+2}) \\ \Phi_{1,0}(\mathbf{v}_{-2q}^{2q+1}) \\ \Phi_{1,0}(\hat{\mathbf{v}}_{-2q}^{2q+1}) \\ \Phi_{1,0}(\mathbf{v}_{-2q+1}^{2q+1}) \end{pmatrix} = \mathcal{M} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ s \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} s \\ 0 \\ -s \\ s^2 \end{pmatrix}.$$

Por lo tanto, (3.2.15) es cierta gracias a la fórmula (3.1.8).

Así, queda demostrada la fórmula (3.2.4) para todo $q \geq 1$.

(v) Para demostrar que (3.2.5) es cierta para todo $q \geq 2$, procederemos nuevamente por inducción.

Para $q = 2$, debemos demostrar que, para $j = q - 2 = 0$,

$$\begin{aligned} \Phi_{1,0}(\hat{\mathbf{v}}_1^2 + (j-1)\mathbf{X}) &= s(s^2 - 1), \\ \Phi_{1,0}(\mathbf{v}_0^2 + j\mathbf{X}) &= -(s^2 - 1), \\ \Phi_{1,0}(\hat{\mathbf{v}}_0^2 + j\mathbf{X}) &= -s, \\ \Phi_{1,0}(\mathbf{v}_1^2 + j\mathbf{X}) &= 2(s^2 - 1), \end{aligned}$$

es decir,

$$\begin{aligned} \Phi_{1,0}(\hat{\mathbf{v}}_{-1}^3) &= s(s^2 - 1), & \Phi_{1,0}(\mathbf{v}_0^2) &= -(s^2 - 1), \\ \Phi_{1,0}(\hat{\mathbf{v}}_0^2) &= -s, & \Phi_{1,0}(\mathbf{v}_1^2) &= 2(s^2 - 1). \end{aligned} \quad (3.2.17)$$

Para ello, usamos (3.1.6) con $q = 1$ y $k = 0$, y obtenemos que

$$\begin{pmatrix} \Phi_{1,0}(\hat{\mathbf{v}}_{-1}^3) \\ \Phi_{1,0}(\mathbf{v}_0^2) \\ \Phi_{1,0}(\hat{\mathbf{v}}_0^2) \\ \Phi_{1,0}(\mathbf{v}_1^2) \end{pmatrix} = \mathcal{M} \begin{pmatrix} \Phi_{1,0}(\mathbf{v}_{-1}^2) \\ \Phi_{1,0}(\hat{\mathbf{v}}_{-1}^2) \\ \Phi_{1,0}(\mathbf{v}_0^1) \\ \Phi_{1,0}(\hat{\mathbf{v}}_0^1) \\ \Phi_{1,0}(\mathbf{v}_1^1) \\ \Phi_{1,0}(\hat{\mathbf{v}}_1^1) \end{pmatrix}.$$

Para determinar los valores del vector de la derecha de esta igualdad, primero usamos (3.2.9) con $j = -1$ y deducimos que $\Phi_{1,0}(\mathbf{v}_{-1}^2) = 0$, después usamos (3.2.8) con $j = 1$ y obtenemos que $\Phi_{1,0}(\hat{\mathbf{v}}_1^1) = 0$, y finalmente usamos toda la identidad (3.2.10). De este modo la expresión se transforma en

$$\begin{pmatrix} \Phi_{1,0}(\hat{\mathbf{v}}_{-1}^3) \\ \Phi_{1,0}(\mathbf{v}_0^2) \\ \Phi_{1,0}(\hat{\mathbf{v}}_0^2) \\ \Phi_{1,0}(\mathbf{v}_1^2) \end{pmatrix} = \mathcal{M} \begin{pmatrix} 0 \\ s \\ -1 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}.$$

Por lo tanto, la identidad (3.2.17) resulta del producto matriz vector, considerando la definición de la matriz \mathcal{M} dada en (3.1.8).

Supongamos ahora que la identidad (3.2.5) es válida para cierto valor de q . Demostremos que también es válida para $q + 1$, es decir, demostremos que, para $j = (q + 1) - 2 = q - 1$,

$$\begin{aligned} \Phi_{1,0}(\hat{\mathbf{v}}_1^{q+1} + (j - 1)\mathbf{X}) &= (2q - 1)s(s^2 - 1), \\ \Phi_{1,0}(\mathbf{v}_0^{q+1} + j\mathbf{X}) &= -(2q - 1)(s^2 - 1), \\ \Phi_{1,0}(\hat{\mathbf{v}}_0^{q+1} + j\mathbf{X}) &= -s, \\ \Phi_{1,0}(\mathbf{v}_1^{q+1} + j\mathbf{X}) &= 2q(s^2 - 1), \end{aligned}$$

esto es,

$$\begin{aligned} \Phi_{1,0}(\hat{\mathbf{v}}_{2(q-2)+1}^3) &= (2q - 1)s(s^2 - 1), & \Phi_{1,0}(\mathbf{v}_{2(q-1)}^2) &= -(2q - 1)(s^2 - 1), \\ \Phi_{1,0}(\hat{\mathbf{v}}_{2(q-1)}^2) &= -s, & \Phi_{1,0}(\mathbf{v}_{2(q-1)+1}^2) &= 2q(s^2 - 1). \end{aligned} \tag{3.2.18}$$

Utilizando la identidad (3.1.6) con $k = q - 1$,

$$\begin{pmatrix} \Phi_{1,0}(\hat{\mathbf{v}}_{2(q-2)+1}^3) \\ \Phi_{1,0}(\mathbf{v}_{2(q-1)}^2) \\ \Phi_{1,0}(\hat{\mathbf{v}}_{2(q-1)}^2) \\ \Phi_{1,0}(\mathbf{v}_{2(q-1)+1}^2) \end{pmatrix} = \mathcal{M} \begin{pmatrix} \Phi_{1,0}(\mathbf{v}_{2(q-2)+1}^2) \\ \Phi_{1,0}(\hat{\mathbf{v}}_{2(q-2)+1}^2) \\ \Phi_{1,0}(\mathbf{v}_{2(q-1)}^1) \\ \Phi_{1,0}(\hat{\mathbf{v}}_{2(q-1)}^1) \\ \Phi_{1,0}(\mathbf{v}_{2(q-1)+1}^1) \\ \Phi_{1,0}(\hat{\mathbf{v}}_{2(q-1)+1}^1) \end{pmatrix} \quad (3.2.19)$$

De la hipótesis de inducción (3.2.5), tenemos que $\Phi_{1,0}(\mathbf{v}_{2(q-2)+1}^2) = (2q - 2)(s^2 - 1)$. Además, usando la identidad (3.2.1) con $j = q$ se tiene que $\Phi_{1,0}(\hat{\mathbf{v}}_{2(q-1)+1}^1) = 0$. Por último, gracias a la identidad (3.2.3) completa, se deduce que la expresión (3.2.19) se puede escribir del modo siguiente:

$$\begin{pmatrix} \Phi_{1,0}(\hat{\mathbf{v}}_{2(q-2)+1}^3) \\ \Phi_{1,0}(\mathbf{v}_{2(q-1)}^2) \\ \Phi_{1,0}(\hat{\mathbf{v}}_{2(q-1)}^2) \\ \Phi_{1,0}(\mathbf{v}_{2(q-1)+1}^2) \end{pmatrix} = \mathcal{M} \begin{pmatrix} (2q - 2)(s^2 - 1) \\ s \\ -1 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix},$$

de donde, multiplicando por la matriz definida en (3.1.8), se obtiene que (3.2.18) es cierta.

Con esto, (3.2.5) es cierta para todo $q \geq 2$.

(vi) Para demostrar que (3.2.6) es cierta para todo $q \geq 3$, procederemos nuevamente por inducción.

Para $q = 3$, debemos demostrar que, para $j = -q + 2 = -1$,

$$\begin{aligned} \Phi_{1,0}(\hat{\mathbf{v}}_1^3 + (j - 1)\mathbf{X}) &= 3s(s^2 + 1), \\ \Phi_{1,0}(\mathbf{v}_0^3 + j\mathbf{X}) &= -s^2, \\ \Phi_{1,0}(\hat{\mathbf{v}}_0^3 + j\mathbf{X}) &= -2s(s^2 + 1), \\ \Phi_{1,0}(\mathbf{v}_1^3 + j\mathbf{X}) &= 2s^2(s^2 + 1), \end{aligned}$$

es decir,

$$\begin{aligned} \Phi_{1,0}(\hat{\mathbf{v}}_{-3}^5) &= 3s(s^2 + 1), \\ \Phi_{1,0}(\mathbf{v}_{-2}^4) &= -s^2, \\ \Phi_{1,0}(\hat{\mathbf{v}}_{-2}^4) &= -2s(s^2 + 1), \\ \Phi_{1,0}(\mathbf{v}_{-1}^4) &= 2s^2(s^2 + 1). \end{aligned} \quad (3.2.20)$$

Usamos (3.1.6) con $q = 2$ y $k = -1$, y obtenemos que

$$\begin{pmatrix} \Phi_{1,0}(\hat{\mathbf{v}}_{-3}^5) \\ \Phi_{1,0}(\mathbf{v}_{-2}^4) \\ \Phi_{1,0}(\hat{\mathbf{v}}_{-2}^4) \\ \Phi_{1,0}(\mathbf{v}_{-1}^4) \end{pmatrix} = \mathcal{M} \begin{pmatrix} \Phi_{1,0}(\mathbf{v}_{-3}^4) \\ \Phi_{1,0}(\hat{\mathbf{v}}_{-3}^4) \\ \Phi_{1,0}(\mathbf{v}_{-2}^3) \\ \Phi_{1,0}(\hat{\mathbf{v}}_{-2}^3) \\ \Phi_{1,0}(\mathbf{v}_{-1}^3) \\ \Phi_{1,0}(\hat{\mathbf{v}}_{-1}^3) \end{pmatrix}.$$

Utilizando (3.2.2) con $q = 2$ y $j = -2$ para obtener $\Phi_{1,0}(\mathbf{v}_{-3}^4) = 0$, (3.2.13) completa y (3.2.17) para obtener $\Phi_{1,0}(\hat{\mathbf{v}}_{-1}^3) = s(s^2 - 1)$, la expresión anterior se transforma en

$$\begin{pmatrix} \Phi_{1,0}(\hat{\mathbf{v}}_{-3}^5) \\ \Phi_{1,0}(\mathbf{v}_{-2}^4) \\ \Phi_{1,0}(\hat{\mathbf{v}}_{-2}^4) \\ \Phi_{1,0}(\mathbf{v}_{-1}^4) \end{pmatrix} = \mathcal{M} \begin{pmatrix} 0 \\ s \\ 0 \\ -s \\ s^2 \\ s(s^2 - 1) \end{pmatrix}.$$

Por lo tanto, la identidad (3.2.20) resulta del producto matriz vector, considerando la definición de la matriz \mathcal{M} dada en (3.1.8).

Supongamos ahora que la identidad (3.2.6) es válida para cierto valor de q . Demostremos que también es válida para $q + 1$, es decir, demostremos que, para $j = -(q + 1) + 2 = -(q - 1)$,

$$\begin{aligned} \Phi_{1,0}(\hat{\mathbf{v}}_1^{q+1} + (j - 1)\mathbf{X}) &= (2q - 1)s(s^2 + 1), \\ \Phi_{1,0}(\mathbf{v}_0^{q+1} + j\mathbf{X}) &= -s^2, \\ \Phi_{1,0}(\hat{\mathbf{v}}_0^{q+1} + j\mathbf{X}) &= -(2q - 2)s(s^2 + 1), \\ \Phi_{1,0}(\mathbf{v}_1^{q+1} + j\mathbf{X}) &= (2q - 2)s^2(s^2 + 1), \end{aligned}$$

esto es,

$$\begin{aligned} \Phi_{1,0}(\hat{\mathbf{v}}_{-2q+1}^{2q+1}) &= (2q - 1)s(s^2 - 1), & \Phi_{1,0}(\mathbf{v}_{-2(q-1)}^{2q}) &= -s^2, \\ \Phi_{1,0}(\hat{\mathbf{v}}_{-2(q-1)}^{2q}) &= -(2q - 2)s(s^2 - 1), & \Phi_{1,0}(\mathbf{v}_{-2(q-1)+1}^{2q}) &= (2q - 2)s^2(s^2 - 1). \end{aligned} \tag{3.2.21}$$

Utilizando la identidad (3.1.6) con $k = -(q - 1)$,

$$\begin{pmatrix} \Phi_{1,0}(\hat{\mathbf{v}}_{-2q+1}^{2q+1}) \\ \Phi_{1,0}(\mathbf{v}_{-2(q-1)}^{2q}) \\ \Phi_{1,0}(\hat{\mathbf{v}}_{-2(q-1)}^{2q}) \\ \Phi_{1,0}(\mathbf{v}_{-2(q-1)+1}^{2q}) \end{pmatrix} = \mathcal{M} \begin{pmatrix} \Phi_{1,0}(\mathbf{v}_{-2q+1}^{2q}) \\ \Phi_{1,0}(\hat{\mathbf{v}}_{-2q+1}^{2q}) \\ \Phi_{1,0}(\mathbf{v}_{-2(q-1)}^{2q-1}) \\ \Phi_{1,0}(\hat{\mathbf{v}}_{-2(q-1)}^{2q-1}) \\ \Phi_{1,0}(\mathbf{v}_{-2(q-1)+1}^{2q-1}) \\ \Phi_{1,0}(\hat{\mathbf{v}}_{-2(q-1)+1}^{2q-1}) \end{pmatrix} \quad (3.2.22)$$

De (3.2.1) con $j = -q$, $\Phi_{1,0}(\mathbf{v}_{-2q+1}^{2q}) = 0$. De la hipótesis de inducción (3.2.6), tenemos que $\Phi_{1,0}(\hat{\mathbf{v}}_{-2(q-1)+1}^{2q-1}) = (2q - 3)s(s^2 - 1)$. Por último, gracias a la identidad (3.2.4) completa, se deduce que la expresión (3.2.19) se puede escribir del modo siguiente:

$$\begin{pmatrix} \Phi_{1,0}(\hat{\mathbf{v}}_{-2q+1}^{2q+1}) \\ \Phi_{1,0}(\mathbf{v}_{-2(q-1)}^{2q}) \\ \Phi_{1,0}(\hat{\mathbf{v}}_{-2(q-1)}^{2q}) \\ \Phi_{1,0}(\mathbf{v}_{-2(q-1)+1}^{2q}) \end{pmatrix} = \mathcal{M} \begin{pmatrix} 0 \\ s \\ 0 \\ -s \\ s^2 \\ (2q - 3)s(s^2 - 1) \end{pmatrix},$$

de donde, multiplicando por la matriz definida en (3.1.8), se obtiene que (3.2.21) es cierta.

Con esto, (3.2.6) es cierta para todo $q \geq 2$.

(vii) Usando (3.2.1), (3.2.2) y (3.2.3), se tiene que la propiedad es cierta para todos los vértices del grafeno de ordenada $y = \sqrt{3}$.

La simetría total se obtiene considerando que la línea formada por todos los vértices de ordenadas $y = \sqrt{3}/2$ e $y = \sqrt{3}$ es una base del grafeno, simétrica a la base L_0 , pero con componente $\Phi_{1,0}(0, \sqrt{3}) = -1$. Esta nueva base genera las mismas soluciones encontradas en (3.2.1)–(3.2.6), pero con signos opuestos. De donde surge la simetría buscada. \square

Observación 3.8. *También podemos caracterizar las funciones $\Phi_{2,0}$, $\Phi_{3,0}$ y $\Phi_{4,0}$. Considerando las respectivas simetrías, es posible escribir*

$$\begin{aligned} \Phi_2(x, y) &= \Phi_1(1 - x, y) \\ \Phi_3(x, y) &= \Phi_1\left(x - \frac{3}{2}, \frac{\sqrt{3}}{2} - y\right) . \\ \Phi_4(x, y) &= \Phi_1\left(\frac{5}{2} - x, \frac{\sqrt{3}}{2} - y\right) \end{aligned}$$

Observación 3.9. *Se tiene que*

- *De la parte (iii) del Teorema 3.7 y de la Observación 3.8, podemos concluir que $\Phi_{1,0}$, $\Phi_{2,0}$, $\Phi_{3,0}$ y $\Phi_{4,0}$ son no acotadas.*
- *De la parte (v) del Teorema 3.7 y de la Observación 3.8, podemos concluir que $\Phi_{1,0}$, $\Phi_{2,0}$, $\Phi_{3,0}$ y $\Phi_{4,0}$ no tienen soporte compacto.*
- *Es posible probar que las combinaciones lineales finitas de $\Phi_{1,0}$, $\Phi_{2,0}$, $\Phi_{3,0}$ y $\Phi_{4,0}$ son no acotadas y no tienen soporte compacto.*

3.3. Base con soporte en el semi-plano

Buscamos ahora soluciones $\Psi \in L^2(G)$ tales que $\mathcal{H}\Psi = \lambda\Psi$ con soporte compacto. En esta sección, usaremos las letras A_i^q , B_i^q , C_i^q y D_i^q , $i \in \mathbb{Z}$, para denotar el valor de Ψ en los cuatro vértices generatrices del perfil L_q , es decir

$$A_i^q = \Psi(\mathbf{v}_{2i}^{q-i}), \quad B_i^q = \Psi(\hat{\mathbf{v}}_{2i}^{q-i}), \quad C_i^q = \Psi(\mathbf{v}_{2i+1}^{q-i}), \quad D_i^q = \Psi(\hat{\mathbf{v}}_{2i+1}^{q-i}). \quad (3.3.1)$$

Para más detalles, ver la definición del perfil L_q en (3.1.1) y la Figura 3.5.

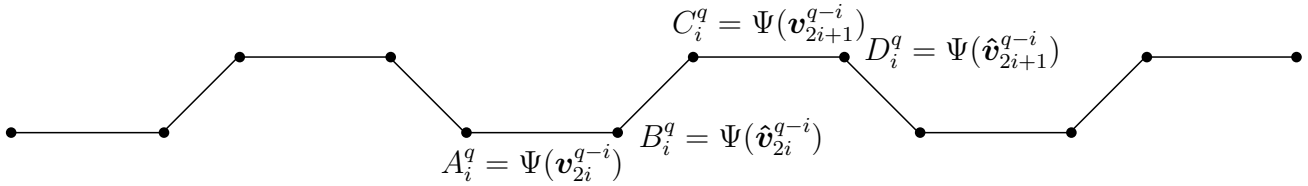


Fig. 3.5: Definición de las constantes A_i^q , B_i^q , C_i^q y D_i^q .

De (3.1.6) y (3.1.7), podemos escribir todos los valores de Ψ en los vértices de L_{q+1} y de L_{q-1} en términos de sus valores en los vértices de L_q como sigue. Para todo $i \in \mathbb{Z}$,

$$A_i^{q+1} = -C_{i-1}^q - sD_{i-1}^q - A_i^q \quad (3.3.2)$$

$$B_i^{q+1} = -B_i^q - sC_i^q - D_i^q \quad (3.3.3)$$

$$C_i^{q+1} = C_{i-1}^q + sD_{i-1}^q + A_i^q + sB_i^q + (s^2 - 1)C_i^q + sD_i^q \quad (3.3.4)$$

$$D_i^{q+1} = sC_i^q + (s^2 - 1)D_i^q + sA_{i+1}^q + B_{i+1}^q + sC_{i+1}^q + D_{i+1}^q \quad (3.3.5)$$

$$A_i^{q-1} = A_{i-1}^q + sB_{i-1}^q + C_{i-1}^q + sD_{i-1}^q + (s^2 - 1)A_i^q + sB_i^q \quad (3.3.6)$$

$$B_i^{q-1} = sA_i^q + (s^2 - 1)B_i^q + sC_i^q + D_i^q + sA_{i+1}^q + B_{i+1}^q \quad (3.3.7)$$

$$C_i^{q-1} = -A_i^q - sB_i^q - C_i^q \quad (3.3.8)$$

$$D_i^{q-1} = -D_i^q - sA_{i+1}^q - B_{i+1}^q \quad (3.3.9)$$

Recordemos que $s = -3\varphi_1(1; \lambda)$, con $\varphi_1(\cdot; \lambda)$ definida en (1.2.25).

De existir soluciones $\Psi \in L^2(G)$ tales que $\mathcal{H}\Psi = \lambda\Psi$ con soporte compacto, entonces existe $i_0 \in \mathbb{Z}$ de modo que

$$A_i^q = B_i^q = C_i^q = D_i^q = 0, \forall i < i_0, \forall q \in \mathbb{Z}. \quad (3.3.10)$$

Sin pérdida de generalidad, podemos suponer que $i_0 = 0$. Es decir, estudiaremos el caso en que la función Ψ se anula en toda la zona gris de la Figura 3.7. Además, escribiremos “ $-n$, con $n \in \mathbb{N}$ ” en lugar de “ $i < 0$, con $i \in \mathbb{Z}$ ”.

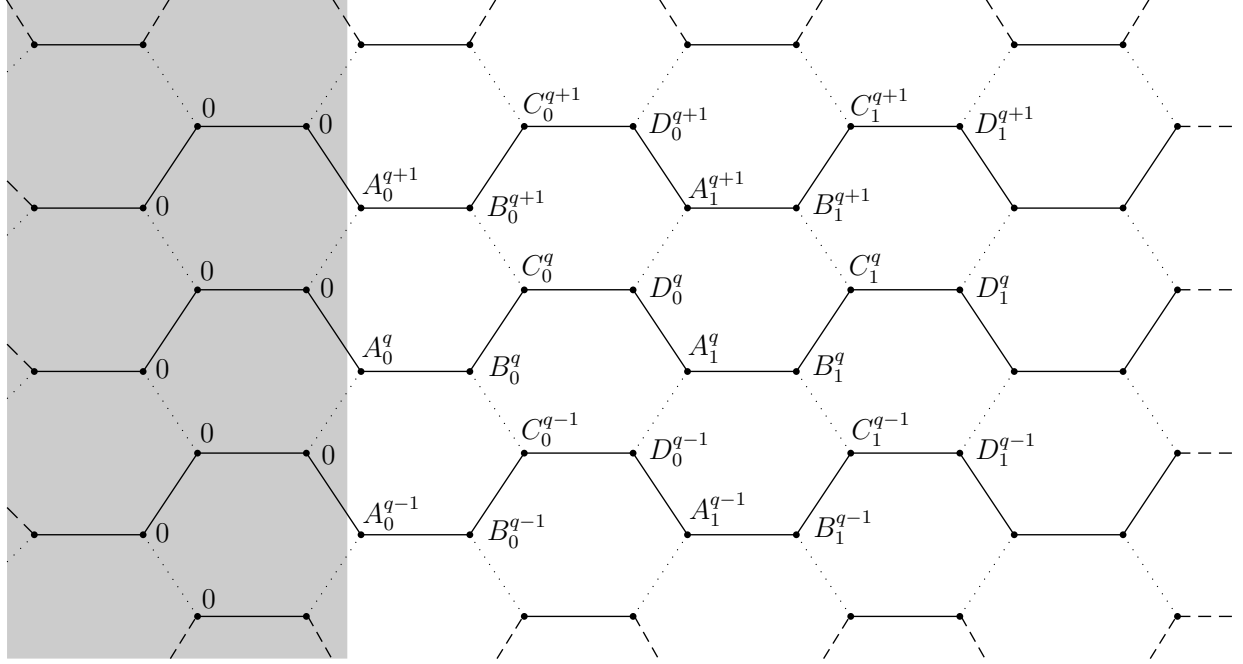


Fig. 3.7: Los valores no nulos de A_i^j , B_i^j , C_i^j y D_i^j , $i, j \in \mathbb{Z}$, $i \geq 0$.

Para demostrar los resultados en esta sección y determinar la estructura de todas las funciones Ψ que satisfacen (3.3.10) (con $i_0 = 0$), los polinomios P_n definidos recursivamente a continuación jugarán un rol crucial.

Definición 3.10. La familia de polinomios $(P_n)_{n \in \mathbb{N}}$, se define por la recurrencia siguiente:

$$P_0(s) = -s \quad (3.3.11)$$

$$P_n(s) = P_{n-1}(s) + s \sum_{k=0}^{n-1} P_k(s) P_{n-1-k}(s) \text{ para } n \geq 1. \quad (3.3.12)$$

Observación 3.11. Notemos que para $n = 1$ se tiene

$$P_1(s) = P_0 + sP_0^2 = -s + s^3 = s(s^2 - 1) = (s^2 - 1)s. \quad (3.3.13)$$

Observación 3.12. Cada polinomio P_n , $n \in \mathbb{N}$, tiene grado $2n + 1$.

Usando estos polinomios, podemos enunciar el teorema siguiente, que representa el resultado principal de esta sección.

Teorema 3.13. *Para $\Psi \in L^2(G)$ tal que $\mathcal{H}\Psi = \lambda\Psi$, sean $A_i^q, B_i^q, C_i^q, D_i^q$ los valores de Ψ en los vértices generatrices de L_q definidos en (3.3.1). Las siguientes proposiciones son equivalentes:*

(a) *Para todo $q \in \mathbb{Z}$ se cumple que*

$$A_{-n}^q = B_{-n}^q = C_{-n}^q = D_{-n}^q = 0 \quad \forall n \in \mathbb{N}. \quad (3.3.14)$$

(b) *Existe $q_0 \in \mathbb{Z}$ tal que $A_{-n}^{q_0} = B_{-n}^{q_0} = C_{-n}^{q_0} = D_{-n}^{q_0} = 0$ para todo $n \in \mathbb{N}$ y se cumplen las fórmulas*

$$B_n^q = \sum_{k=0}^n A_{n-k}^q P_k(s) \quad \forall n \in \mathbb{N}, \forall q \in \mathbb{Z} \quad (3.3.15)$$

y

$$D_n^q = \sum_{k=0}^n C_{n-k}^q P_k(s) \quad \forall n \in \mathbb{N}, \forall q \in \mathbb{Z}. \quad (3.3.16)$$

(c) *Existe $q_0 \in \mathbb{Z}$ tal que $A_{-n}^{q_0} = B_{-n}^{q_0} = C_{-n}^{q_0} = D_{-n}^{q_0} = 0$ para todo $n \in \mathbb{N}$ y se cumplen las fórmulas*

$$B_n^{q_0} = \sum_{k=0}^n A_{n-k}^{q_0} P_k(s) \quad \forall n \in \mathbb{N} \quad (3.3.17)$$

y

$$D_n^{q_0} = \sum_{k=0}^n C_{n-k}^{q_0} P_k(s) \quad \forall n \in \mathbb{N}. \quad (3.3.18)$$

(d) *Para todo $q \in \mathbb{Z}$ se cumple que*

$$A_{-n}^q = B_{-n}^q = C_{-n}^q = D_{-n}^q = 0 \quad \forall n \in \mathbb{N}, \quad (3.3.19)$$

$$B_n^q = \sum_{k=0}^n A_{n-k}^q P_k(s) \quad \forall n \in \mathbb{N} \quad (3.3.20)$$

y

$$D_n^q = \sum_{k=0}^n C_{n-k}^q P_k(s) \quad \forall n \in \mathbb{N}. \quad (3.3.21)$$

Para demostrar este resultado, comenzaremos por probar una serie de resultados previos, que combinan las definiciones de los polinomios P_n con las condiciones (2.3.1) y (2.3.2). Empezaremos con un lema algebraico.

Lema 3.14. Si existe $n_0 \in \mathbb{N}$ tal que

$$B_n^q = \sum_{k=0}^n A_{n-k}^q P_k(s) \quad \forall n \in \{0, \dots, n_0\} \quad (3.3.22)$$

y

$$D_n^q = \sum_{k=0}^n C_{n-k}^q P_k(s) \quad \forall n \in \{0, \dots, n_0\}, \quad (3.3.23)$$

donde P_n son los polinomios dados en (3.3.11), entonces

$$\sum_{k=0}^n (A_{n-k}^q + sB_{n-k}^q) P_k(s) = sA_{n+1}^q + B_{n+1}^q \quad \forall n \in \{0, \dots, n_0 - 1\}, \quad (3.3.24)$$

$$\sum_{k=0}^n (C_{n-k}^q + sD_{n-k}^q) P_k(s) = sC_{n+1}^q + D_{n+1}^q \quad \forall n \in \{0, \dots, n_0 - 1\} \quad (3.3.25)$$

y

$$s \sum_{k=0}^{n_0} B_{n_0-k}^q P_k(s) = \sum_{k=1}^{n_0+1} A_{n_0+1-k}^q P_k(s) - B_{n_0}^q, \quad (3.3.26)$$

$$s \sum_{k=0}^{n_0} D_{n_0-k}^q P_k(s) = \sum_{k=1}^{n_0+1} C_{n_0+1-k}^q P_k(s) - D_{n_0}^q. \quad (3.3.27)$$

DEMOSTRACIÓN. Para demostrar (3.3.24) usamos la hipótesis (3.3.22) para deducir que para todo $n \in \{0, \dots, n_0\}$

$$\begin{aligned} \sum_{k=0}^n (A_{n-k}^q + sB_{n-k}^q) P_k &= \sum_{k=0}^n A_{n-k}^q P_k + s \sum_{k=0}^n \sum_{r=0}^{n-k} A_{n-(k+r)}^q P_r P_k \\ &= \sum_{k=0}^n A_{n-k}^q P_k + s \sum_{t=0}^n \sum_{j=0}^t A_{n-t}^q P_j P_{t-j} \\ &= \sum_{k=0}^n A_{n-k}^q \left(P_k + s \sum_{j=0}^k P_j P_{k-j} \right). \end{aligned}$$

Ahora, incorporando la fórmula de recurrencia (3.3.12) resulta que

$$\begin{aligned} \sum_{k=0}^n (A_{n-k}^q + sB_{n-k}^q) P_k &= \sum_{k=0}^n A_{n-k}^q P_{k+1} \\ &= \sum_{k=1}^{n+1} A_{n+1-k}^q P_k. \end{aligned} \quad (3.3.28)$$

De aquí se deduce directamente (3.3.27), usando la hipótesis (3.3.22) en la suma del lado izquierdo.

Para deducir (3.3.24) restringimos el rango de la variable n al conjunto $\{0, \dots, n_0 - 1\}$ y así podemos usar la hipótesis (3.3.22) en la sumatoria de la derecha en (3.3.28), resultando

$$\sum_{k=0}^n (A_{n-k}^q + sB_{n-k}^q)P_k = -A_{n+1}^q P_0 + B_{n+1}^q.$$

De aquí la igualdad (3.3.24) es directa consecuencia de la definición (3.3.11).

Las igualdades (3.3.25) y (3.3.27) son idénticas a las ya demostradas, intercambiando los nombres de las variables. \square

Lema 3.15. *Si*

$$A_{-n}^q = B_{-n}^q = C_{-n}^q = D_{-n}^q = 0, \quad \forall n \in \mathbb{N}, \forall q \in \mathbb{Z}. \quad (3.3.29)$$

entonces

$$B_0^q = A_0^q P_0, \quad \forall q \in \mathbb{Z}, \quad (3.3.30)$$

$$D_0^q = C_0^q P_0, \quad \forall q \in \mathbb{Z}, \quad (3.3.31)$$

$$B_1^q = A_1^q P_0 + A_0^q P_1, \quad \forall q \in \mathbb{Z}, \quad (3.3.32)$$

$$D_1^q = C_1^q P_0 + C_0^q P_1, \quad \forall q \in \mathbb{Z}. \quad (3.3.33)$$

DEMOSTRACIÓN. Usando la identidad (3.3.9) para $i = -1$, y la hipótesis (3.3.29) se obtiene

$$0 = 0 - sA_0^q - B_0^q,$$

de donde resulta (3.3.30), dado que $P_0 = -s$.

Para probar (3.3.31), comenzamos usando la identidad (3.3.5) con $i = -1$, para obtener

$$0 = 0 + 0 + sA_0^q + B_0^q + sC_0^q + D_0^q.$$

Así, la propiedad (3.3.31) resulta como consecuencia de (3.3.30) y de que $P_0 = -s$.

Dado que la igualdad (3.3.30) es válida para todo $q \in \mathbb{Z}$, podemos escribir

$$B_0^{q-1} = A_0^{q-1} P_0. \quad (3.3.34)$$

Por lo tanto, usando las identidades (3.3.7) y (3.3.6), para $i = 0$, en (3.3.34), se obtiene que

$$sA_0^q + (s^2 - 1)B_0^q + \underbrace{sC_0^q + D_0^q}_{=0} + sA_1^q + B_1^q = -s(0 + 0 + 0 + 0 + (s^2 - 1)A_0^q + sB_0^q), \quad (3.3.35)$$

de donde se deduce que

$$sA_1^q + B_1^q = -s(A_0^q + sB_0^q) - (s^2 - 1)\underbrace{(sA_0^q + B_0^q)}_{=0}, \quad (3.3.36)$$

y entonces (3.3.32), considerando que $P_1(s) = (s^2 - 1)s$ (ver 3.3.13 en Observación 3.11).

Finalmente, para deducir (3.3.33), usamos (3.3.31) para $q + 1$, es decir

$$D_0^{q+1} = C_0^{q+1}P_0. \quad (3.3.37)$$

Así, usando las identidades (3.3.5) y (3.3.4), para $i = 0$, en (3.3.37), se tiene

$$sC_0^q + (s^2 - 1)D_0^q + sA_1^q + B_1^q + sC_1^q + D_1^q = -s(0 + 0 + A_0^q + sB_0^q + (s^2 - 1)C_0^q + sD_0^q).$$

Usando (3.3.36), la igualdad anterior se reduce a

$$sC_0^q + (s^2 - 1)D_0^q + sC_1^q + D_1^q = -s((s^2 - 1)C_0^q + sD_0^q).$$

Como esta igualdad es análoga a la identidad (3.3.35), el resto de la demostración es análoga al caso anterior. \square

En lo que sigue, veremos como generalizar estos resultados. Probaremos el siguiente lema.

Lema 3.16. *Supongamos que*

$$A_{-n}^q = B_{-n}^q = C_{-n}^q = D_{-n}^q = 0, \quad \forall n \in \mathbb{N}, \forall q \in \mathbb{Z}. \quad (3.3.38)$$

Si existe $n_0 \in \mathbb{N}$ tal que

$$B_n^q = \sum_{k=0}^n A_{n-k}^q P_k(s) \quad \forall q \in \mathbb{Z}, \forall n \in \{0, \dots, n_0\} \quad (3.3.39)$$

y

$$D_n^q = \sum_{k=0}^n C_{n-k}^q P_k(s) \quad \forall q \in \mathbb{Z}, \forall n \in \{0, \dots, n_0\} \quad (3.3.40)$$

entonces

$$B_{n_0+1}^q = \sum_{k=0}^{n_0+1} A_{n_0+1-k}^q P_k(s) \quad (3.3.41)$$

y

$$D_{n_0+1}^q = \sum_{k=0}^{n_0+1} C_{n_0+1-k}^q P_k(s). \quad (3.3.42)$$

DEMOSTRACIÓN. Para probar (3.3.41) comenzamos por escribir la hipótesis (3.3.39) para $q - 1$ y n_0 , es decir,

$$B_{n_0}^{q-1} = \sum_{k=0}^{n_0} A_{n_0-k}^{q-1} P_k(s).$$

Usando las identidades (3.3.7) con $i = n_0$ y (3.3.6) con $i = n_0 - k$, se tiene que

$$\begin{aligned} sA_{n_0}^q + (s^2 - 1)B_{n_0}^q + sC_{n_0}^q + D_{n_0}^q + sA_{n_0+1}^q + B_{n_0+1}^q = \\ \sum_{k=0}^{n_0} (A_{n_0-k-1}^q + sB_{n_0-k-1}^q + C_{n_0-k-1}^q + sD_{n_0-k-1}^q + (s^2 - 1)A_{n_0-k}^q + sB_{n_0-k}^q) P_k. \end{aligned} \quad (3.3.43)$$

Usando la hipótesis (3.3.38) las sumas anteriores pueden ser reescritas del modo siguiente:

$$\begin{aligned} sA_{n_0}^q + (s^2 - 1)B_{n_0}^q + sC_{n_0}^q + D_{n_0}^q + sA_{n_0+1}^q + B_{n_0+1}^q = \\ \sum_{k=0}^{n_0-1} (A_{n_0-k-1}^q + sB_{n_0-k-1}^q + C_{n_0-k-1}^q + sD_{n_0-k-1}^q) P_k + (s^2 - 1) \sum_{k=0}^{n_0} A_{n_0-k}^q P_k + s \sum_{k=0}^{n_0} B_{n_0-k}^q P_k. \end{aligned} \quad (3.3.44)$$

Aquí, gracias a las hipótesis (3.3.39)–(3.3.40), podemos usar el Lema 3.14, en la primera y tercera sumatoria del lado derecho. La segunda sumatoria se calcula directamente usando la hipótesis (3.3.39). De este modo se obtiene que

$$\begin{aligned} sA_{n_0}^q + (s^2 - 1)B_{n_0}^q + sC_{n_0}^q + D_{n_0}^q + sA_{n_0+1}^q + B_{n_0+1}^q = \\ B_{n_0}^q + sA_{n_0}^q + D_{n_0}^q + sC_{n_0}^q + (s^2 - 1)B_{n_0}^q + \sum_{k=1}^{n_0+1} A_{n_0+1-k}^q P_k(s) - B_{n_0}. \end{aligned} \quad (3.3.45)$$

Simplificando se tiene que

$$sA_{n_0+1}^q + B_{n_0+1}^q = \sum_{k=1}^{n_0+1} A_{n_0+1-k}^q P_k(s). \quad (3.3.46)$$

De donde (3.3.41) se deduce directamente de la definición (3.3.11).

Para probar (3.3.42), escribimos la hipótesis (3.3.40) para $q + 1$ en el caso $n = n_0$, es decir

$$D_{n_0}^{q+1} = \sum_{k=0}^{n_0} C_{n_0-k}^{q+1} P_k(s)$$

Reemplazando las identidades (3.3.5), con $i = n_0$, y (3.3.4) con $i = n_0 - k$, esta expresión se transforma en

$$\begin{aligned} sC_{n_0}^q + (s^2 - 1)D_{n_0}^q + sA_{n_0+1}^q + B_{n_0+1}^q + sC_{n_0+1}^q + D_{n_0+1}^q = \\ \sum_{k=0}^{n_0} (C_{n_0-k-1}^q + sD_{n_0-k-1}^q + A_{n_0-k}^q + sB_{n_0-k}^q + (s^2 - 1)C_{n_0-k}^q + sD_{n_0-k}^q) P_k. \end{aligned} \quad (3.3.47)$$

Usando la hipótesis (3.3.38) las sumas anteriores pueden ser reescritas del modo siguiente:

$$\begin{aligned}
& sC_{n_0}^q + (s^2 - 1)D_{n_0}^q + sA_{n_0+1}^q + B_{n_0+1}^q + sC_{n_0+1}^q + D_{n_0+1}^q = \\
& \sum_{k=0}^{n_0-1} (C_{n_0-k-1}^q + sD_{n_0-k-1}^q)P_k + \sum_{k=0}^{n_0} (A_{n_0-k}^q + sB_{n_0-k}^q)P_k + (s^2 - 1) \sum_{k=0}^{n_0} C_{n_0-k}^q P_k + s \sum_{k=0}^{n_0} D_{n_0-k}^q P_k.
\end{aligned} \tag{3.3.48}$$

Para la primera y última sumatoria del lado derecho, usamos (3.3.25) del Lema 3.14 gracias a la hipótesis (3.3.40). Para la segunda sumatoria también usamos el mismo lema, ya que la identidad (3.3.41) permite usar la igualdad (3.3.24) hasta $n = n_0$. Por último, la tercera sumatoria se calcula directamente usando la hipótesis (3.3.40). De este modo se obtiene

$$\begin{aligned}
& sC_{n_0}^q + (s^2 - 1)D_{n_0}^q + sA_{n_0+1}^q + B_{n_0+1}^q + sC_{n_0+1}^q + D_{n_0+1}^q = \\
& sC_{n_0}^q + D_{n_0}^q + sA_{n_0+1}^q + B_{n_0+1}^q + (s^2 - 1)D_{n_0}^q + \sum_{k=1}^{n_0+1} C_{n_0+1-k}^q P_k - D_{n_0}^q.
\end{aligned} \tag{3.3.49}$$

Simplificando se tiene que

$$sC_{n_0+1}^q + D_{n_0+1}^q = \sum_{k=1}^{n_0+1} C_{n_0+1-k}^q P_k. \tag{3.3.50}$$

De donde (3.3.42) es una consecuencia directa de la definición (3.3.11).

□

Lema 3.17. *Supongamos que existe $q_0 \in \mathbb{Z}$ tal que en el perfil L_{q_0} se cumplen las siguientes propiedades:*

$$A_i^{q_0} = B_i^{q_0} = C_i^{q_0} = D_i^{q_0} = 0 \quad \forall i \in \mathbb{Z}, i < 0, \tag{3.3.51}$$

$$B_n^{q_0} = \sum_{k=0}^n A_{n-k}^{q_0} P_k(s) \quad \forall n \in \mathbb{N} \tag{3.3.52}$$

y

$$D_n^{q_0} = \sum_{k=0}^n C_{n-k}^{q_0} P_k(s) \quad \forall n \in \mathbb{N}, \tag{3.3.53}$$

donde $P_k(s)$, $k \in \{0, \dots, n\}$ son los polinomios definidos en (3.3.11)–(3.3.12). Entonces en los perfiles L_{q_0+1} y L_{q_0-1} se cumplen las relaciones

$$A_i^{q_0+1} = B_i^{q_0+1} = C_i^{q_0+1} = D_i^{q_0+1} = 0 \quad \forall i \in \mathbb{Z}, i < 0, \tag{3.3.54}$$

$$B_n^{q_0+1} = \sum_{k=0}^n A_{n-k}^{q_0+1} P_k(s) \quad \forall n \in \mathbb{N}, \tag{3.3.55}$$

$$D_n^{q_0+1} = \sum_{k=0}^n C_{n-k}^{q_0+1} P_k(s) \quad \forall n \in \mathbb{N}, \tag{3.3.56}$$

$$A_{-n}^{q_0-1} = B_{-n}^{q_0-1} = C_{-n}^{q_0-1} = D_{-n}^{q_0-1} = 0 \quad \forall n \in \mathbb{N}, \quad (3.3.57)$$

$$B_n^{q_0-1} = \sum_{k=0}^n A_{n-k}^{q_0-1} P_k(s) \quad \forall n \in \mathbb{N}, \quad (3.3.58)$$

$$D_n^{q_0-1} = \sum_{k=0}^n C_{n-k}^{q_0-1} P_k(s) \quad \forall n \in \mathbb{N}. \quad (3.3.59)$$

DEMOSTRACIÓN. Comencemos por demostrar las propiedades en el perfil $q_0 + 1$.

Para probar (3.3.54) usamos las identidades (3.3.2)–(3.3.5) con $i < 0$ y $q = q_0$. Usando la hipótesis (3.3.51), se obtiene directamente (3.3.54) para todo i , salvo el caso siguiente

$$D_{-1}^{q_0+1} = sA_0^{q_0} + B_0^{q_0} + sC_0^{q_0} + D_0^{q_0},$$

el cual también resulta ser nulo gracias a las hipótesis (3.3.52)–(3.3.53) para $n = 0$ y la definición (3.3.11).

Para demostrar (3.3.55), comenzamos por calcular la sumatoria del lado derecho. Para cada $k \in \{0, \dots, n\}$, usamos la identidad (3.3.2), con $i = n - k$ y $q = q_0$. De este modo obtenemos que

$$\sum_{k=0}^n A_{n-k}^{q_0+1} P_k(s) = - \sum_{k=0}^n (C_{n-k-1}^{q_0} + sD_{n-k-1}^{q_0} + A_{n-k}^{q_0}) P_k(s).$$

Usando la hipótesis (3.3.51), podemos escribir

$$\sum_{k=0}^n A_{n-k}^{q_0+1} P_k(s) = - \sum_{k=0}^{n-1} (C_{n-k-1}^{q_0} + sD_{n-k-1}^{q_0}) P_k(s) - \sum_{k=0}^n A_{n-k}^{q_0} P_k(s).$$

Como la hipótesis (3.3.53) es cierta para todo n , podemos utilizar la identidad (3.3.25) del Lema 3.14 en la primera sumatoria del lado derecho. La segunda sumatoria se calcula directamente usando la hipótesis (3.3.52). De este modo resulta que

$$\sum_{k=0}^n A_{n-k}^{q_0+1} P_k(s) = -(sC_n^{q_0} + D_n^{q_0} + B_n^{q_0}).$$

Así, la igualdad (3.3.55) es una consecuencia directa de esta identidad y la igualdad (3.3.3) con los índices correspondientes.

En forma similar, para demostrar (3.3.56), comenzamos por calcular la sumatoria del lado derecho. Para cada $k \in \{0, \dots, n\}$, usamos la identidad (3.3.4), con $i = n - k$ y $q = q_0$. De este modo obtenemos que

$$\sum_{k=0}^n C_{n-k}^{q_0+1} P_k = \sum_{k=0}^n (C_{n-k-1}^{q_0} + sD_{n-k-1}^{q_0} + A_{n-k}^{q_0} + sB_{n-k}^{q_0} + (s^2 - 1)C_{n-k}^{q_0} + sD_{n-k}^{q_0}) P_k,$$

que, en virtud de la hipótesis (3.3.51), puede reescribirse como

$$\begin{aligned} \sum_{k=0}^n C_{n-k}^{q_0+1} P_k &= \sum_{k=0}^{n-1} (C_{n-k-1}^{q_0} + sD_{n-k-1}^{q_0}) P_k + \sum_{k=0}^n (A_{n-k}^{q_0} + sB_{n-k}^{q_0}) P_k \\ &\quad + (s^2 - 1) \sum_{k=0}^n C_{n-k}^{q_0} P_k + s \sum_{k=0}^n D_{n-k}^{q_0} P_k. \end{aligned} \quad (3.3.60)$$

Como las hipótesis (3.3.52)–(3.3.53) son ciertas para todo n , podemos utilizar las identidades (3.3.24), (3.3.25) y (3.3.27) del Lema 3.14 para calcular la primera, segunda y cuarta sumatoria del lado derecho. Con esto tenemos que

$$\sum_{k=0}^n C_{n-k}^{q_0+1} P_k = sC_n^{q_0} + D_n^{q_0} + sA_{n+1}^{q_0} + B_{n+1}^{q_0} + (s^2 - 1) \sum_{k=0}^n C_{n-k}^{q_0} P_k + \sum_{k=1}^{n+1} C_{n+1-k}^{q_0} P_k - D_n^{q_0}.$$

Simplificando y utilizando la hipótesis (3.3.53), se calculan las dos sumatorias del lado derecho y se obtiene

$$\sum_{k=0}^n C_{n-k}^{q_0+1} P_k = sC_n^{q_0} + sA_{n+1}^{q_0} + B_{n+1}^{q_0} + (s^2 - 1)D_n^{q_0} + D_{n+1}^{q_0} - C_{n+1}^{q_0} P_0(s).$$

Como $P_0(s) = -s$, (ver (3.3.11)), reordenando se obtiene que

$$\sum_{k=0}^n C_{n-k}^{q_0+1} P_k = sC_n^{q_0} + (s^2 - 1)D_n^{q_0} + sA_{n+1}^{q_0} + B_{n+1}^{q_0} + sC_{n+1}^{q_0} + D_{n+1}^{q_0}.$$

Comparando esta identidad con (3.3.5), con $i = n$ y $q = q_0$, se obtiene la igualdad (3.3.56).

Probemos ahora las propiedades en el perfil $q_0 - 1$.

Para probar (3.3.57) usamos las identidades (3.3.6)–(3.3.9) con $i < 0$ y $q = q_0$. Usando la hipótesis (3.3.51), se obtiene directamente (3.3.57) para todo i , salvo los casos

$$\begin{aligned} B_{-1}^{q_0-1} &= sA_0^{q_0} + B_0^{q_0}, \quad y \\ D_{-1}^{q_0-1} &= -sA_0^{q_0} - B_0^{q_0}, \end{aligned}$$

pero, de (3.3.30), $sA_0^{q_0} + B_0^{q_0} = 0$ y así se tiene $B_{-1}^{q_0-1} = D_{-1}^{q_0-1} = 0$.

Para demostrar (3.3.58), comenzamos por calcular la sumatoria del lado derecho. Para cada $k \in \{0, \dots, n\}$, usamos la identidad (3.3.6), con $i = n - k$ y $q = q_0$. De este modo obtenemos que

$$\sum_{k=0}^n A_{n-k}^{q_0-1} P_k = \sum_{k=0}^n (A_{n-k-1}^{q_0} + sB_{n-k-1}^{q_0} + C_{n-k-1}^{q_0} + sD_{n-k-1}^{q_0} + (s^2 - 1)A_{n-k}^{q_0} + sB_{n-k}^{q_0}) P_k(s)$$

Usando la hipótesis (3.3.51), podemos escribir

$$\begin{aligned} \sum_{k=0}^n A_{n-k}^{q_0-1} P_k &= \sum_{k=0}^{n-1} (A_{n-k-1}^{q_0} + sB_{n-k-1}^{q_0}) P_k + \sum_{k=0}^{n-1} (C_{n-k-1}^{q_0} + sD_{n-k-1}^{q_0}) P_k \\ &\quad + (s^2 - 1) \sum_{k=0}^n A_{n-k}^{q_0} P_k + s \sum_{k=0}^n B_{n-k}^{q_0} P_k(s). \end{aligned} \quad (3.3.61)$$

Como las hipótesis (3.3.52) y (3.3.53) son ciertas para todo n , podemos utilizar la identidad (3.3.24) en la primera sumatoria del lado derecho, la identidad (3.3.25) en la segunda sumatoria y la identidad (3.3.26) en la última sumatoria. De este modo resulta que

$$\sum_{k=0}^n A_{n-k}^{q_0-1} P_k = sA_n^{q_0} + B_n^{q_0} + sC_n^{q_0} + D_n^{q_0} + (s^2 - 1) \sum_{k=0}^n A_{n-k}^{q_0} P_k + \sum_{k=1}^{n+1} A_{n+1-k}^{q_0} P_k - B_n^{q_0},$$

que, de (3.3.52), es equivalente a

$$\sum_{k=0}^n A_{n-k}^{q_0-1} P_k = sA_n^{q_0} + B_n^{q_0} + sC_n^{q_0} + D_n^{q_0} + (s^2 - 1)B_n^{q_0} + B_{n+1}^{q_0} - A_{n+1}^{q_0} P_0 - B_n^{q_0}.$$

Como $P_0 = -s$, reordenando se puede escribir

$$\sum_{k=0}^n A_{n-k}^{q_0-1} P_k = sA_n^{q_0} + (s^2 - 1)B_n^{q_0} + sC_n^{q_0} + D_n^{q_0} + sA_{n+1}^{q_0} + B_{n+1}^{q_0}.$$

Así la igualdad (3.3.58) es una consecuencia directa de esta identidad y la igualdad (3.3.3) con los índices correspondientes.

En forma análoga, para demostrar (3.3.59) comenzamos por calcular la sumatoria del lado derecho. Para cada $k \in \{0, \dots, n\}$, usamos la identidad (3.3.8), con $i = n - k$ y $q = q_0$. De este modo obtenemos

$$\sum_{k=0}^n C_{n-k}^{q_0-1} P_k = - \sum_{k=0}^n (A_{n-k}^{q_0} + sB_{n-k}^{q_0} + C_{n-k}^{q_0}) P_k,$$

donde nuevamente usando (3.3.24), puede reescribirse como

$$\sum_{k=0}^n C_{n-k}^{q_0-1} P_k = -(sA_{n+1}^{q_0} + B_{n+1}^{q_0}) - \sum_{k=0}^n C_{n-k}^{q_0} P_k$$

y de (3.3.53) resulta

$$\sum_{k=0}^n C_{n-k}^{q_0-1} P_k(s) = -(sA_{n+1}^{q_0} + B_{n+1}^{q_0}) - D_n^{q_0}.$$

Así, se tiene la igualdad (3.3.59) directamente de la identidad (3.3.9) usada con $i = n$ y $q = q_0$. \square

DEMOSTRACIÓN DEL TEOREMA 3.13. Comencemos por demostrar la implicancia $(a) \Rightarrow (b)$. Probaremos que las identidades (3.3.15)–(3.3.16) son ciertas para todo $n \in \mathbb{N}$ usando el principio de inducción sobre la variable n . El caso base, $n = 0$, es una consecuencia de las identidades (3.3.30)–(3.3.31) del Lema 3.15. De hecho, en dicho lema también se ha estudiado en forma explícita el caso $n = 1$. Ahora, suponiendo que las identidades (3.3.15)–(3.3.16) son válidas hasta un determinado valor de $n \in \mathbb{N}$, usando el Lema 3.16 se deduce que ellas son también ciertas para $n + 1$. Con esto la implicancia $(a) \Rightarrow (b)$ queda demostrada.

La implicancia $(b) \Rightarrow (c)$ es directa, ya que (b) es una propiedad más general que (c) .

Demostremos ahora la implicancia $(c) \Rightarrow (d)$. Para ello, usaremos una doble inducción sobre la variable $q \in \mathbb{Z}$. Primeramente, la hipótesis (c) constituye el caso base de dicha inducción (el caso $q = q_0$) para el cual se cumplen las igualdades (3.3.19)–(3.3.21). Ahora suponemos que las identidades (3.3.19)–(3.3.21) son ciertas para un cierto valor de $q \in \mathbb{Z}$. Usando el Lema 3.17 se concluye que dichas igualdades son también ciertas para $q + 1$ y $q - 1$. Por lo tanto se concluye que la propiedad (d) resulta ser cierta para todo $q \in \mathbb{Z}$.

Finalmente, la implicancia $(d) \Rightarrow (a)$ es directa, ya que (d) es una propiedad más general que (a) . \square

De lo anterior, tenemos el siguiente resultado.

Teorema 3.18. *Las funciones $\Psi \in L^2(G)$ tales que $\mathcal{H}\Psi = \lambda\Psi$ son no acotadas y no tienen soporte compacto.*

Gracias a las propiedades encontradas en el Teorema 3.13, podemos deducir algunas propiedades adicionales de las soluciones de $\mathcal{H}\Psi = \lambda\Psi$ que son nulas para todo $i \in \mathbb{Z}, i < 0$. Usando las identidades (3.3.2)–(3.3.5) recursivamente, se obtienen las propiedades enunciadas a continuación.

Teorema 3.19. *Si $A_i^q, B_i^q, C_i^q, D_i^q$ satisfacen la hipótesis (3.3.14) del Teorema 3.13. Entonces se tiene*

$$A_0^{q+k} = (-1)^k A_0^q, \quad \forall q \in \mathbb{Z}, \forall k \in \mathbb{Z}, \quad (3.3.62)$$

$$C_0^{q+k} = (-1)^k (C_0^q + k(s^2 - 1)A_0^q), \quad \forall q \in \mathbb{Z}, \forall k \in \mathbb{Z}. \quad (3.3.63)$$

DEMOSTRACIÓN. Primero supongamos $k \in \mathbb{N}$ y probemos (3.3.62) por inducción sobre k . El caso base ($k = 0$) es evidentemente cierto. Supongamos que (3.3.62) es cierto para un cierto valor de $k \in \mathbb{N}$. Para demostrar que esta igualdad también es cierta para $k + 1$, usamos la identidad (3.3.2) para $i = 0$ y $q + k$ en lugar de q , es decir

$$A_0^{q+k+1} = -C_{-1}^{q+k} - sD_{-1}^{q+k} - A_0^{q+k}.$$

Usando la hipótesis (3.3.14), se tiene que

$$A_0^{q+k+1} = -A_0^{q+k}.$$

Usando la hipótesis de inducción, esta igualdad se transforma en

$$A_0^{q+k+1} = -(-1)^k A_0^q,$$

es decir,

$$A_0^{q+(k+1)} = (-1)^{k+1} A_0^q, \quad \forall q \in \mathbb{Z},$$

de donde se concluye que para todo $k \in \mathbb{N}$

$$A_0^{q+k} = (-1)^k A_0^q. \quad (3.3.64)$$

Para probar que la igualdad (3.3.64) es válida también si $k < 0$ basta hacer $r = q + k$ en (3.3.64) y se obtiene

$$A_0^r = (-1)^k A_0^{r-k},$$

que es lo mismo que

$$A_0^{r-k} = (-1)^k A_0^r. \quad (3.3.65)$$

Por lo tanto, se tiene (3.3.62).

Probemos ahora (3.3.63) por inducción sobre la variable k . El caso base ($k = 0$) se cumple claramente. Supongamos que (3.3.63) es válida para cierto $k \in \mathbb{N}$. Para demostrar que esta igualdad es válida también para $k + 1$, usamos la identidad (3.3.4), con $i = 0$ y $q + k$ en lugar de q , es decir

$$C_0^{q+k+1} = C_{-1} + sD_{-1} + A_0^{q+k} + sB_0^{q+k} + (s^2 - 1)C_0^{q+k} + sD_0^{q+k}.$$

De la hipótesis (3.3.14), se tiene

$$C_0^{q+k+1} = A_0^{q+k} + sB_0^{q+k} + (s^2 - 1)C_0^{q+k} + sD_0^{q+k}$$

que, de (3.3.30) y (3.3.31), con $q + k$ en lugar de q , es equivalente a

$$C_0^{q+k+1} = A_0^{q+k} - s^2 A_0^{q+k} + (s^2 - 1)C_0^{q+k} - s^2 C_0^{q+k},$$

es decir,

$$C_0^{q+k+1} = -(s^2 - 1)A_0^{q+k} - C_0^{q+k}.$$

Utilizando (3.3.62) y la hipótesis de inducción, podemos escribir

$$C_0^{q+k+1} = -(s^2 - 1)(-1)^k A_0^q - (-1)^k (C_0^q + k(s^2 - 1)A_0^q),$$

esto es,

$$C_0^{q+k+1} = (-1)^{k+1} (C_0^q + (k + 1)(s^2 - 1)A_0^q), \quad \forall q \in \mathbb{Z}.$$

y se tiene que para todo $k \in \mathbb{N}$

$$C_0^{q+k} = (-1)^k (C_0^q + k(s^2 - 1)A_0^q). \quad (3.3.66)$$

Para probar que la igualdad (3.3.66) es válida también si $k < 0$ basta hacer $r = q + k$ en (3.3.66) y se obtiene

$$C_0^r = (-1)^k (C_0^{r-k} + k(s^2 - 1)A_0^{r-k}),$$

que de (3.3.65) es lo mismo que

$$C_0^r = (-1)^k (C_0^{r-k} + (-1)^k k(s^2 - 1)A_0^r).$$

Despejando C_0^{r-k} y factorizando, se tiene

$$C_0^{r-k} = (-1)^k (C_0^r - k(s^2 - 1)A_0^r).$$

Por lo tanto, se concluye (3.3.63). □

Conclusión

A continuación resumiremos los resultados principales de esta Tesis, explicados con detalle en los capítulos 2 y 3.

Sabiendo que el espectro de la ecuación (1.3.1) se puede caracterizar completamente gracias al Teorema 1.24 buscamos un resultado análogo para el problema espectral del Hamiltoniano \mathcal{H} , definido en (2.2.2), en la red hexagonal del grafeno G . Primero, notamos que es necesario hacer la diferencia entre $\varphi_2(1, \lambda) = 0$ y $\varphi_2(1, \lambda) \neq 0$, por lo que separamos el estudio en dos partes, obteniendo así las ecuaciones de los teoremas 2.1 y 2.2 que fueron de gran utilidad para el análisis posterior.

Al considerar soluciones acotadas, es decir, con $|R_1| = |R_2| = 1$, que es equivalente a analizar el espectro de Bloch, obtuvimos explícitamente la relación de dispersión (2.4.3). De aquí, pudimos verificar que la función $\varphi_1(1; \lambda)$ es mayor que menos uno y menor que uno, para todo $\theta_1, \theta_2 \in [-\pi, \pi]$, como se establece el Lema 2.5. Así, este resultado coincide con la teoría desarrollada en una dimensión.

Sin embargo, cuando consideramos $R_1, R_2 \in \mathbb{R}^*$, es decir soluciones no acotadas en el grafeno G , obtenemos diferentes regiones a las que pertenece el parámetro λ y no es posible concluir de la misma manera que para una dimensión. No obstante, estas regiones quedan completamente definidas como se indica en el Teorema 2.9 y así el espectro del operador \mathcal{H} queda completamente determinado.

En el capítulo posterior, nos centramos en analizar el comportamiento del sistema de ecuaciones diferenciales en tres aristas unidas por el mismo vértice junto con las condiciones de continuidad y flujo (2.1.10) y (2.1.11), lo que nos llevó a definir el perfil L_q dado en (3.1.1). Este perfil resulta ser de gran importancia, pues nos lleva a describir una base para la red hexagonal G : si conocemos el valor de la solución sólo en los vértices del perfil L_q , entonces es posible obtener la solución en cada vértice de \mathcal{V} y en cada arista de \mathcal{A} , es decir, en todo el grafo G (ver Observación 3.5). Esto nos lleva a concluir que basta con analizar un problema unidimensional en una “cadena” de ecuaciones diferenciales ordinarias de segundo orden (un perfil L_q cualquiera) para obtener el comportamiento de la solución en todo el grafeno, que es bidimensional.

En la Observación 3.6 se definen las cuatro funciones que forman la base canónica de G

y, del Teorema 3.7, podemos deducir que estas funciones son no acotadas y no tienen soporte compacto. Lo mismo para combinaciones lineales finitas de ellas.

Después, buscamos soluciones $\Psi \in L^2(G)$ tales que $\mathcal{H}\Psi = \lambda\Psi$ con soporte compacto. Obtuvimos así el Teorema 3.13, que muestra que las siguientes afirmaciones son equivalentes:

- (i) La función Ψ es igual a cero en todo vértice a la izquierda de $i_0 = 0$ y en todos los perfiles L_q .
- (ii) Existe $q_0 \in \mathbb{Z}$ tal que la función Ψ es igual a cero en todo vértice de L_{q_0} a la izquierda de $i_0 = 0$ y se satisfacen las fórmulas (3.3.15)–(3.3.16), para todo $n \in \mathbb{N}$ y para todo $q \in \mathbb{Z}$.
- (iii) Existe $q_0 \in \mathbb{Z}$ tal que la función Ψ es igual a cero en todo vértice de L_{q_0} a la izquierda de $i_0 = 0$ y se satisfacen las fórmulas (3.3.17)–(3.3.18), para todo $n \in \mathbb{N}$.
- (iv) La función Ψ es igual a cero en todo vértice a la izquierda de $i_0 = 0$ y en todos los perfiles L_q , y se satisfacen las fórmulas (3.3.20)–(3.3.21), para todo $n \in \mathbb{N}$.

Apéndice A

On the Graphene Hamiltonian Operator

C. Conca ¹, R. Orive ², J. San Martín ³ and V. Solano ⁴

ABSTRACT: We completely characterize the stability and instability intervals of a second-order elliptic equation with periodic coefficients defined on a honeycomb lattice.

A.1. Introduction

Graphene is a honeycomb lattice of carbon atoms. Recently, it has attracted a lot of attention due to its peculiar electronic and mechanical properties and broad range of applications [28, 32, 39, 53]. To predict and understand this properties, mathematical models are not only useful but necessary. This problem has been approached from different scientific fields such as quantum networks (e.g., [5, 33, 34, 41]), also called quantum graphs, in chemistry [51, 52] and physics [2, 8, 19, 45, 47] (see also [37, 38] and references therein). The characterization of the dispersion relation of the honeycomb lattice is of particular interest for exploiting graphene electronic properties. This is obtained from the solution of the energy eigenvalue problem given by the lattice Hamiltonian. A method to completely characterize the set of solutions is to divide its analysis in stability and instability intervals, previously done for a one-dimensional system in \mathbb{R} [3].

¹Mathematical Engineering Department, Center for Mathematical Modeling - UMI 2807 CNRS-UCHile and Center for Biotechnology and Bioengineering, Universidad de Chile, Beauchef 851, Santiago, Chile. Email: cconca@dim.uchile.cl.

²Institute of Mathematical Sciences ICMAT, Madrid, España. Email: rafael.orive@icmat.es.

³Mathematical Engineering Department, Center for Mathematical Modeling - UMI 2807 CNRS-UCHile and Center for Biotechnology and Bioengineering, Universidad de Chile, Beauchef 851, Santiago, Chile. Email: jorge@dim.uchile.cl.

⁴Mathematical Engineering Department and Center for Mathematical Modeling UMI 2807 CNRS-UCHile, Universidad de Chile, Beauchef 851, Santiago, Chile, and Engineering Faculty, Universidad del Desarrollo, Avenida La Plaza 700, Santiago, Chile. Email: vsolano@udd.cl.

We will present the graphene G defined as a graph, i.e., with its respective components: a set of vertices \mathcal{V} and a set of edges \mathcal{A} . Then, we will define two spaces in the geometrical basis G , $L^2(G)$ and $H^2(G)$, that allow us to solve the Hamiltonian in the edges of G as $\mathcal{H} : H^2(G) \subset L^2(G) \rightarrow L^2(G)$. Thus, the functions $\Psi = (\Psi_a)_{a \in \mathcal{A}}$ such that $\mathcal{H}\Psi = \lambda\Psi$ have to satisfy the following conditions:

- (i) $\sum_{a \in \mathcal{A}} \|\Psi_a\|_{H^2(a)}^2 < \infty$.
- (ii) For all $\mathbf{v} \in \mathcal{V}$, for all $a_1, a_2 \in \mathcal{A}$, $[\mathbf{v} \in a_1 \cap a_2 \Rightarrow \Psi_{a_1}(\mathbf{v}) = \Psi_{a_2}(\mathbf{v})]$ (continuity condition).
- (iii) For all $\mathbf{v} \in \mathcal{V}$, $\sum_{\substack{\mathbf{v}_2 \in \mathcal{V} \\ [\mathbf{v}, \mathbf{v}_2] \in \mathcal{A}}} D\Psi_{[\mathbf{v}, \mathbf{v}_2]}(\mathbf{v}; \mathbf{v}_2 - \mathbf{v}) = 0$, where $D\Psi_{[\mathbf{v}, \mathbf{v}_2]}(\mathbf{v}; \mathbf{v}_2 - \mathbf{v})$ is the directional derivative of the function $\Psi_{[\mathbf{v}, \mathbf{v}_2]}$ at the point \mathbf{v} in the direction of $[\mathbf{v}_2 - \mathbf{v}]$ (flow condition).

From these special and particular conditions, we will obtain the important results presented in this paper. We completely characterize the stability and instability intervals of a energy eigenvalues problem in a honeycomb lattice G , showing the versatility of this approach. However, remarkable difference are present in the structure of the stability regions raising from the more complex structure of graphene-like systems.

The paper is structured as follows. Section A.2 explains the results known as Floquet Theory applied to our particular case as it is developed in [3]. In Section A.3, the graphene G is defined geometrically. Section A.4 shows how the Hamiltonian operator \mathcal{H} acts through G and the parametrization that allows us to identify each edge with the segment $[0, 1]$. From the given theoretical frame, in the Section A.5 we look for a characterization of the functions $\Psi = (\Psi_a)_{a \in \mathcal{A}}$ that satisfies the conditions of continuity and flow (ii)–(iii). To analyze the graphene spectrum, in Section A.6 we study the functions Ψ that satisfies such conditions, along with the eigenvalue equation $\mathcal{H}\Psi = \lambda\Psi$ and properties of quasiperiodicity. Finally, we determine for which values of λ these solutions are bounded or unbounded, analyzing the respective dispersion relation.

A.2. Theoretical framework

We will center our analysis in the result shown by Allaire and Orive in [3], where the authors propose to find the stability and instability intervals of a second-order elliptic equation on the real line with periodic coefficients (Hill's equation). They introduced a new family of non-self-adjoint operators, formally equivalent to the Bloch ones [11, 17] but with an imaginary Bloch parameter, that they call exponential, proving that the problem admits a countable infinite number of eigenvalues which, when they are real, completely characterize the intervals of instability of Hill's equation.

The closure of the stability intervals are called *Bloch bands* and the non-empty open intervals between two Bloch bands are called *gaps*.

A.2.1. The Bloch spectrum

Let us consider the Hill's equation defined in [22] as

$$-u''(x) + V(x)u(x) = \lambda u(x). \quad (\text{A.2.1})$$

Here, the function V is real, piecewise-continuous and 1-periodic. We know that equation (A.2.1) has a basis of two linearly independent solutions $\varphi_1(\cdot; \lambda)$ and $\varphi_2(\cdot; \lambda)$, functions of the parameter λ , that satisfy

$$\varphi_1(0; \lambda) = 1, \varphi_1'(0; \lambda) = 0, \varphi_2(0; \lambda) = 0, \varphi_2'(0; \lambda) = 1. \quad (\text{A.2.2})$$

It is clear that any solution u of (A.2.1) can be written as a linear combination:

$$u(x) = u(0)\varphi_1(x; \lambda) + u'(0)\varphi_2(x; \lambda). \quad (\text{A.2.3})$$

The *discriminant* of (A.2.1) is given by

$$\mathcal{D}(\lambda) = \varphi_1(1; \lambda) + \varphi_2'(1; \lambda).$$

If the function V satisfies the symmetry relation $V(1-x) = V(x)$, then

$$\varphi_2'(1; \lambda) = \varphi_1(1; \lambda), \quad (\text{A.2.4})$$

implying

$$\mathcal{D} = 2\varphi_1(1; \lambda). \quad (\text{A.2.5})$$

Furthermore, when we restrict ourselves to $\lambda \in \mathbb{R}$ (and since all coefficients in (A.2.1) are real-valued), it is possible to classify the solutions of (A.2.1): a solution is said to be *stable* if it is uniformly bounded, and *unstable* if it is unbounded. According to [17, 22], there exist a countably infinite sequence $\{\alpha_n\}_{n \in \mathbb{N}}$ of real roots of $\mathcal{D}(\lambda) = 2$ and a countably infinite sequence $\{\beta_n\}_{n \in \mathbb{N}}$ of real roots of $\mathcal{D}(\lambda) = -2$ such that

$$\cdots < \alpha_0 < \beta_0 \leq \beta_1 < \alpha_1 \leq \alpha_2 < \beta_2 \leq \beta_3 < \alpha_3 \leq \alpha_4 < \cdots$$

(see Figure A.1). The collection of disjoint open intervals

$$] \alpha_0, \beta_0[,] \beta_1, \alpha_1[,] \alpha_2, \beta_2[,] \beta_3, \alpha_3[, \cdots$$

are called the *stability intervals* of (A.2.1) and their union

$$S =] \alpha_0, \beta_0[\cup] \beta_1, \alpha_1[\cup] \alpha_2, \beta_2[\cup] \beta_3, \alpha_3[\cup \cdots$$

is called the *region of stability*. Analogously,

$$U =] -\infty, \alpha_0[\cup] \beta_0, \beta_1[\cup] \alpha_1, \alpha_2[\cup] \beta_2, \beta_3[\cup \cdots$$

is called the *region of instability*. In consequence, $|\mathcal{D}(\lambda)| < 2$ for $\lambda \in S$, and $|\mathcal{D}(\lambda)| > 2$ for $\lambda \in U$.

In addition, from the Floquet's Theory [22], we have

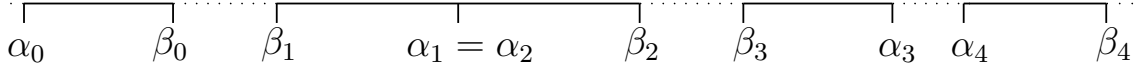


Fig. A.1: The numbers α_n and β_n organized in stability and instability intervals

- (i) For $\lambda \in U$, there exists $\theta \in \mathbb{R} \setminus \{0\}$ such that (A.2.1) has two linearly independent solutions of the type $e^{\theta x} p_1(x)$ and $e^{-\theta x} p_2(x)$, with p_1, p_2 1-periodic and characteristic multipliers $\rho_1 = e^\theta$ and $\rho_2 = e^{-\theta}$; or, with p_1, p_2 semi-periodic and characteristic multipliers $\rho_1 = -e^\theta$ and $\rho_2 = -e^{-\theta}$.
- (ii) For $\lambda \in S$, there exists $\theta \in]0, \pi[$, or $\theta \in]-\pi, 0[$, such that (A.2.1) has two linearly independent solutions of the type $e^{i\theta x} p_1(x)$ and $e^{-i\theta x} p_2(x)$, with p_1, p_2 1-periodic and characteristic multipliers $\rho_1 = e^{i\theta}$ and $\rho_2 = e^{-i\theta}$.
- (iii) If $\alpha_{2k+1} = \alpha_{2k+2}$, then for $\lambda = \alpha_{2k+1} = \alpha_{2k+2}$ the equation (A.2.1) has two linearly independent solutions p_1 y p_2 1-periodic. If $\alpha_{2k+1} < \alpha_{2k+2}$, then for $\lambda = \alpha_{2k+1}$ and for $\lambda = \alpha_{2k+2}$ the equation (A.2.1) has two linearly independent solutions of the type $p_1(x)$ and $x p_1(x) + p_2(x)$, with p_1 and p_2 1-periodic.
- (iv) If $\beta_{2k} = \beta_{2k+1}$, then for $\lambda = \beta_{2k} = \beta_{2k+1}$ the equation (A.2.1) has two linearly independent solutions p_1 y p_2 semi-periodic. If $\beta_{2k} < \beta_{2k+1}$, then for $\lambda = \beta_{2k}$ and for $\lambda = \beta_{2k+1}$ the equation (A.2.1) has two linearly independent solutions of the type $p_1(x)$ and $x p_1(x) + p_2(x)$, with p_1 and p_2 semi-periodic.

We recall other classical results of a theory on the eigenvalue structure of (A.2.1), known as the *Bloch Decomposition Theory* [1, 18]. If we consider (A.2.1) as a spectral problem in $L^2(\mathbb{R})$, it is a natural question to determine its spectrum. To this end, we consider the following Bloch spectral problem parameterized by $\theta \in \mathbb{R}$:

$$\begin{cases} \text{Find } \lambda = \lambda(\theta) \in \mathbb{R} \text{ and } \Psi = \Psi(x, \theta); \\ -\Psi''(x, \theta) + V(x)\Psi(x, \theta) = \lambda(\theta)\Psi(x, \theta) \text{ in } \mathbb{R} \\ \Psi(x+1, \theta) = e^{i\theta}\Psi(x, \theta), \quad \forall x. \end{cases} \quad (\text{A.2.6})$$

It is well known that for each $\theta \in]-\pi, \pi]$, the above spectral problem (A.2.6) admits a discrete sequence of eigenvalues with the following properties

$$0 \leq \lambda_1(\theta) \leq \dots \leq \lambda_m(\theta) \leq \dots \rightarrow \infty,$$

for all $m \geq 1$, $\lambda_m(\theta)$ is a Lipschitz's function of $\theta \in Y'$.

The Bloch spectrum [1, 18] is defined as

$$\sigma_B = \{\lambda_m(\theta) : \theta \in Y', m \geq 1\} = \bigcup_{m \geq 1} \left[\min_{\theta \in Y'} \lambda_m(\theta), \max_{\theta \in Y'} \lambda_m(\theta) \right].$$

Also, for all $i \geq 1$, $\alpha_k = \lambda_k(0)$, $\beta_k = \lambda_k(\pi)$ and

$$\sigma_B = [\alpha_0, \beta_0] \cup [\beta_1, \alpha_1] \cup [\alpha_2, \beta_2] \cup [\beta_3, \alpha_3] \cup \dots$$

In particular, $\lambda_{2k-1}(0)$ is the minimum of $\lambda_{2k-1}(\theta)$, while $\lambda_{2k-1}(\pi)$ is the maximum of $\lambda_{2k-1}(\theta)$, and $\lambda_{2k}(0)$ is the maximum of $\lambda_{2k}(\theta)$, while $\lambda_{2k}(\pi)$ is the minimum of $\lambda_{2k}(\theta)$.

Thus, we have a characterization for the region of stability S of the Hill's equation (A.2.1). The closure of the stability intervals are precisely the called *Bloch bands*, i.e.,

$$[\alpha_m, \beta_m] = \left[\min_{\theta \in Y'} \lambda_m(\theta), \max_{\theta \in Y'} \lambda_m(\theta) \right].$$

The non-empty open intervals between two Bloch bands are called *gaps*. Their union, together with the unbounded open interval below the first Bloch band, is exactly the unstable region U .

A.2.2. The exponential spectrum

In this section we define the exponential spectrum of the equation (A.2.1). Let us consider the following two spectral problems parameterized by $\theta \in \mathbb{R}$.

$$\begin{cases} \text{Find } \mu = \mu(\theta) \in \mathbb{R} \text{ and } \Psi = \Psi(x, \theta); \\ -\Psi''(x, \theta) + V(x)\Psi(x, \theta) = \mu(\theta)\Psi(x, \theta) \\ \Psi(x+1, \theta) = e^\theta \Psi(x, \theta), \quad \forall x. \end{cases} \quad (\text{A.2.7})$$

$$\begin{cases} \text{Find } \nu = \nu(\theta) \in \mathbb{R} \text{ y } \Psi = \Psi(x, \theta); \\ -\Psi''(x, \theta) + V(x)\Psi(x, \theta) = \nu(\theta)\Psi(x, \theta) \\ \Psi(x+1, \theta) = -e^\theta \Psi(x, \theta), \quad \forall x. \end{cases} \quad (\text{A.2.8})$$

We have the following results.

- (i) For any $\theta \in \mathbb{R}$, there exists a minimal first eigenvalue μ_0 of (A.2.7) which is real, simple and such that $\theta \mapsto \mu_0(\theta)$ is analytic, concave and even. Also,

$$\begin{aligned} \lim_{\theta \rightarrow +\infty} \mu_0(\theta) &= -\infty \quad \text{and} \\ \max_{\theta \in \mathbb{R}} \mu_0(\theta) &= \mu_0(0) = \lambda_0(0) = \alpha_0. \end{aligned}$$

- (ii) Assume that $\beta_{2k} \leq \beta_{2k+1}$. Then, there exist $\theta_{2k,2k+1} \geq 0$ such that, for $\theta \in]-\theta_{2k,2k+1},$

$\theta_{2k,2k+1}[$, there exist $\nu_{2k}(\theta), \nu_{2k+1}(\theta)$ real and simple eigenvalues of (A.2.8) which satisfy $\theta \mapsto \nu_{2k}(\theta), \nu_{2k+1}(\theta)$ are analytic and even, and $\nu_{2k}(\theta), \nu_{2k+1}(\theta)$ are strictly monotone on $[0, \theta_{2k,2k+1}]$. Also,

$$\begin{aligned} \min_{\theta \in [0, \theta_{2k,2k+1}]} \nu_{2k}(\theta) &= \nu_{2k}(0) = \lambda_{2k}(\pi) = \beta_{2k}, \\ \max_{\theta \in [0, \theta_{2k,2k+1}]} \nu_{2k+1}(\theta) &= \nu_{2k+1}(0) = \lambda_{2k+1}(\pi) = \beta_{2k+1}, \\ \lim_{|\theta| \rightarrow \theta_{2k,2k+1}} \nu_{2k}(\theta) &= \lim_{|\theta| \rightarrow \theta_{2k,2k+1}} \nu_{2k+1}(\theta) = \nu_{2k,2k+1}, \\ \{\nu_{2k}(\theta) : \theta \in [0, \theta_{2k,2k+1}]\} &= [b_{2k}, \nu_{2k,2k+1}] \quad \text{and} \\ \{\nu_{2k+1}(\theta) : \theta \in [0, \theta_{2k,2k+1}]\} &= [\nu_{2k,2k+1}, b_{2k+1}]. \end{aligned}$$

(iii) Assume that $\alpha_{2k+1} \leq \alpha_{2k+2}$. Then, there exists $\theta_{2k+1,2k+2} \geq 0$ such that, for $\theta \in] - \theta_{2k+1,2k+2}, \theta_{2k+1,2k+2}[$, there exist $\mu_{2k+1}(\theta), \mu_{2k+2}(\theta)$ real and simple eigenvalues of (A.2.7) which satisfy $\theta \mapsto \mu_{2k+1}(\theta), \mu_{2k+2}(\theta)$ are analytic and even, and $\mu_{2k+1}(\theta), \nu_{2k+2}(\theta)$ are strictly monotone on $[0, \theta_{2k+1,2k+2}]$. Also,

$$\begin{aligned} \min_{\theta \in [0, \theta_{2k+1,2k+2}]} \mu_{2k+1}(\theta) &= \mu_{2k+1}(0) = \lambda_{2k+1}(\pi) = \alpha_{2k+1}, \\ \max_{\theta \in [0, \theta_{2k+1,2k+2}]} \mu_{2k+2}(\theta) &= \mu_{2k+2}(0) = \lambda_{2k+2}(\pi) = \alpha_{2k+2}, \\ \lim_{|\theta| \rightarrow \theta_{2k+1,2k+2}} \mu_{2k+1}(\theta) &= \lim_{|\theta| \rightarrow \theta_{2k+1,2k+2}} \mu_{2k+2}(\theta) = \mu_{2k+1,2k+2}, \\ \{\mu_{2k+1}(\theta) : \theta \in [0, \theta_{2k+1,2k+2}]\} &= [a_{2k+1}, \mu_{2k+1,2k+2}] \quad \text{and} \\ \{\mu_{2k+2}(\theta) : \theta \in [0, \theta_{2k+1,2k+2}]\} &= [\mu_{2k+1,2k+2}, a_{2k+2}]. \end{aligned}$$

Thus, the authors of [3] conclude that

$$\mathbb{R} = \sigma_B \cup \sigma_e \quad \text{y} \quad \sigma_B \cap \sigma_e = \bigcup_{i=0}^{+\infty} \{\alpha_i\} \cup \{\beta_i\}, \quad (\text{A.2.9})$$

where

$$\sigma_e = \{\mu_0(\theta) : \theta \in \mathbb{R}\} \cup \{\mu_{2k+1}(\theta), \mu_{2k+2}(\theta) : \theta \in [0, \theta_{2k+1,2k+2}]\} \cup \{\nu_{2k}(\theta), \nu_{2k+1}(\theta) : \theta \in [0, \theta_{2k,2k+1}]\}.$$

We can see that if u is a solution of the equation (A.2.1) and $\varphi_1(\cdot; \lambda)$ is the function defined in (A.2.2), then there exists three sets, \mathfrak{A} , \mathfrak{B} y \mathfrak{C} , such that

$$\lambda \in \mathfrak{A} \Leftrightarrow |\varphi_1(t; \lambda)| \leq 1, \quad \forall t \in \mathbb{R} \quad (\text{A.2.10})$$

$$\lambda \in \mathfrak{B} \Leftrightarrow \varphi_1(t; \lambda) > 1, \quad \forall t \in \mathbb{R} \quad (\text{A.2.11})$$

$$\lambda \in \mathfrak{C} \Leftrightarrow \varphi_1(t; \lambda) < -1, \quad \forall t \in \mathbb{R} \quad (\text{A.2.12})$$

A.3. The graphene

The graphene is a substance made of pure carbon, where the atoms follow a regular hexagon pattern. This atoms are mathematically described by a set of vertices $\mathcal{V} \subseteq \mathbb{R}^2$ as Figure A.2 shows.

More precisely, let us introduce the vectors

$$\mathbf{e}_1 = \left(\frac{3}{2}, \frac{\sqrt{3}}{2} \right) \quad \text{y} \quad \mathbf{e}_2 = (0, \sqrt{3}). \quad (\text{A.3.1})$$

Then, the set of vertices \mathcal{V} is defined by

$$\mathcal{V} = \{\mathbf{v}_i^j, \hat{\mathbf{v}}_i^j : i, j \in \mathbb{Z}\}, \quad (\text{A.3.2})$$

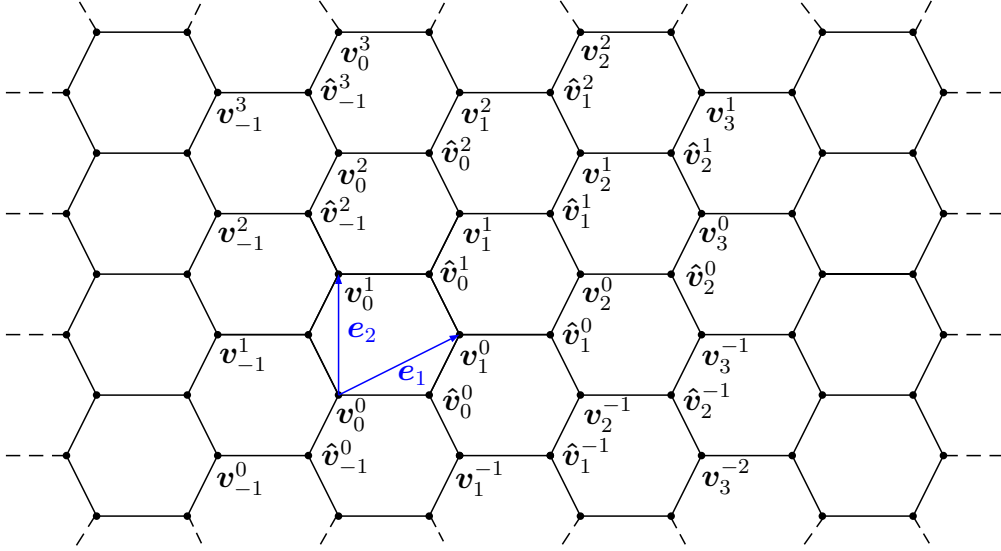


Fig. A.2: Vertices \mathbf{v}_i^j and $\hat{\mathbf{v}}_i^j$ representing the graphene G .

where the family of vertices $(\mathbf{v}_i^j)_{i,j \in \mathbb{Z}}$ and $(\hat{\mathbf{v}}_i^j)_{i,j \in \mathbb{Z}}$ are defined by the relations:

$$\mathbf{v}_i^j = i\mathbf{e}_1 + j\mathbf{e}_2 \quad (\text{A.3.3})$$

$$\hat{\mathbf{v}}_i^j = \mathbf{v}_i^j + (1, 0). \quad (\text{A.3.4})$$

As Figure A.2 shows, these vertices are connected by a set of edges \mathcal{A} defined by

$$\mathcal{A} = \{a_E^{i,j}, a_N^{i,j}, a_S^{i,j} : a_E^{i,j} = [\mathbf{v}_i^j, \hat{\mathbf{v}}_i^j], a_N^{i,j} = [\mathbf{v}_i^j, \hat{\mathbf{v}}_{i-1}^j], a_S^{i,j} = [\mathbf{v}_i^j, \hat{\mathbf{v}}_{i-1}^{j+1}], i, j \in \mathbb{Z}\}, \quad (\text{A.3.5})$$

as it is displayed in Figure A.3. These set of edges and vertices constitute an hexagonal grid.

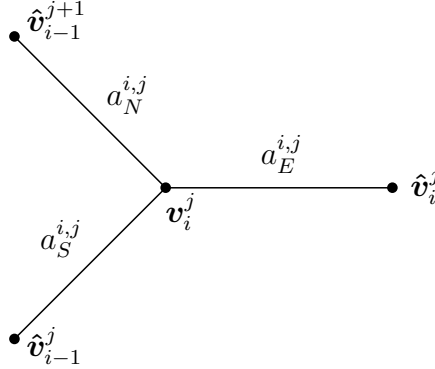


Fig. A.3: Edges $a_E^{i,j}$, $a_N^{i,j}$ and $a_S^{i,j}$, and their respective vertices.

Using this notation, the structure of the graphene is represented by a non-oriented graph G determined by the set of vertices and edges previously defined, i.e.,

$$G = (\mathcal{V}, \mathcal{A}).$$

We notice that each edge of the graphene is bijective to the segment $[0, 1] \subseteq \mathbb{R}$. In fact, in order to visualize this bijection, we consider the parameterization σ , oriented from \mathbf{v} to \mathbf{w} , defined by:

$$\begin{aligned} \sigma : [0, 1] \times \mathbb{R}^2 \times \mathbb{R}^2 &\rightarrow \mathbb{R}^2 \\ (t; \mathbf{v}, \mathbf{w}) &\mapsto \sigma(t; \mathbf{v}, \mathbf{w}) = \mathbf{v} + t(\mathbf{w} - \mathbf{v}). \end{aligned} \quad (\text{A.3.6})$$

Thus, each edge $[\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2] \in \mathcal{A}$ can be written as $\sigma([0, 1]; \mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2)$. The inverse function is such that

$$\mathbf{x} \in [\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2] \mapsto \sigma^{-1}(\mathbf{x}; \mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2) = \frac{\|\mathbf{x} - \mathbf{v}_1\|}{\|\mathbf{v}_2 - \mathbf{v}_1\|}. \quad (\text{A.3.7})$$

Using the parametrization (A.3.6), whose inverse is (A.3.7), for each edge $[\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2] \in \mathcal{A}$ we can define the space $L^2(\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2)$ as follows:

$$L^2(\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2) = \left\{ \tilde{\Psi} \circ \sigma^{-1}(\cdot; \mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2) : \tilde{\Psi} \in L^2(0, 1) \right\},$$

endowed with the norm $\|\tilde{\Psi} \circ \sigma^{-1}(\cdot; \mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2)\|_{L^2(\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2)} = \|\tilde{\Psi}\|_{L^2(0, 1)}$. Then, we can define $L^2(\mathcal{A})$ as:

$$L^2(\mathcal{A}) = \left\{ (\Psi_a)_{a \in \mathcal{A}} \in \bigotimes_{a \in \mathcal{A}} L^2(a) : \sum_{a \in \mathcal{A}} \|\Psi_a\|_{L^2(a)}^2 < \infty \right\}. \quad (\text{A.3.8})$$

This space can be also called $L^2(G)$.

Similarly, for each edge $[\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2] \in \mathcal{A}$ we can define the Sobolev space $H^2(\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2)$ by:

$$H^2(\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2) = \left\{ \tilde{\Psi} \circ \sigma^{-1}(\cdot; \mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2) : \tilde{\Psi} \in H^2(0, 1) \right\},$$

endowed with the norm $\|\tilde{\Psi} \circ \sigma^{-1}(\cdot; \mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2)\|_{H^2(\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2)} = \|\tilde{\Psi}\|_{H^2(0, 1)}$. Thus, the Sobolev space $H^2(G)$ is defined as the subset of functions $(\Psi_a)_{a \in \mathcal{A}} \in \bigotimes_{a \in \mathcal{A}} H^2(a)$ which satisfy the three following conditions:

$$\sum_{a \in \mathcal{A}} \|\Psi_a\|_{H^2(a)}^2 < \infty, \quad (\text{A.3.9})$$

$$\forall \mathbf{v} \in \mathcal{V}, \forall a_1, a_2 \in \mathcal{A} [\mathbf{v} \in a_1 \cap a_2 \Rightarrow \Psi_{a_1}(\mathbf{v}) = \Psi_{a_2}(\mathbf{v})], \quad (\text{A.3.10})$$

$$\forall \mathbf{v} \in \mathcal{V} \sum_{\substack{\mathbf{v}_2 \in \mathcal{V} \\ [\mathbf{v}, \mathbf{v}_2] \in \mathcal{A}}} D\Psi_{[\mathbf{v}, \mathbf{v}_2]}(\mathbf{v}; \mathbf{v}_2 - \mathbf{v}) = 0, \quad (\text{A.3.11})$$

where we have denoted by $D\Psi_{[\mathbf{v}, \mathbf{v}_2]}(\mathbf{v}; \mathbf{v}_2 - \mathbf{v})$ the directional derivative of the function $\Psi_{[\mathbf{v}, \mathbf{v}_2]}$ at the point \mathbf{v} in the direction $[\mathbf{v}_2 - \mathbf{v}]$. These conditions are usually called Neumann conditions of the graphene or Kirchhoff conditions. The condition (A.3.10) corresponds to the continuity condition on each vertex going from one edge to the other. The second condition, (A.3.11), states that the sum of the outward fluxes from the vertex \mathbf{v} must be zero.

A.4. The Hamiltonian of graphene

Let us now define the Hamiltonian of graphene in $L^2(G)$. Let $V(t)$ be a function in $L^2(0, 1)$ such that

$$V(t) = V(1 - t). \quad (\text{A.4.1})$$

The *Hamiltonian of graphene* $\mathcal{H} : \mathcal{D}(\mathcal{H}) \subset L^2(G) \rightarrow L^2(G)$ is the operator, with domain $\mathcal{D}(\mathcal{H}) = H^2(G)$, that maps $\Psi = (\Psi_a)_{a \in \mathcal{A}} \in H^2(G)$ to $\mathcal{H}\Psi \in L^2(G)$, $\mathcal{H}\Psi = ((\mathcal{H}\Psi)_a)_{a \in \mathcal{A}}$, such that

$$(\mathcal{H}\Psi)_a(\mathbf{x}) = \left(-\tilde{\Psi}_a'' + V\tilde{\Psi}_a \right) \circ \sigma^{-1}(\mathbf{x}; a), \quad (\text{A.4.2})$$

where, for each edge $a \in \mathcal{A}$, $\tilde{\Psi}_a = \Psi_a \circ \sigma(\cdot; a) \in H^2(0, 1)$.

The goal of this section is to study the spectrum of the operator \mathcal{H} , characterizing the functions Ψ which are bounded or unbounded solutions. In order to do this, we seek for non-zero functions $\Psi = (\Psi_a)_{a \in \mathcal{A}}$ satisfying (A.3.10)–(A.3.11) and the following differential equations

$$-\tilde{\Psi}_a''(t) + V(t)\tilde{\Psi}_a(t) = \lambda\tilde{\Psi}_a(t), \quad \forall a \in \mathcal{A}, \forall t \in (0, 1), \quad (\text{A.4.3})$$

where $\lambda \in \mathbb{R}$ is a parameter.

Our goal is to classify the solutions of (A.4.3) according to the different values of λ , looking for bounded and unbounded solutions of graphene. We see that the condition (A.3.9) is not satisfied by our solutions since the operator \mathcal{H} has continuous spectrum.

We are interested in studying the solutions of (A.4.3) that satisfy the properties

$$\Psi(\mathbf{x} + \mathbf{e}_1) = R_1 u(\mathbf{x}), \quad \forall \mathbf{x} \in G \quad (\text{A.4.4})$$

$$\Psi(\mathbf{x} + \mathbf{e}_2) = R_2 u(\mathbf{x}), \quad \forall \mathbf{x} \in G \quad (\text{A.4.5})$$

where R_1 and R_2 are real or complex numbers belonging to the set

$$D_R = \{R \in \mathbb{C} : |R| = 1 \vee R \in \mathbb{R}^*\}.$$

We notice that if $|R_1| = |R_2| = 1$, the solutions will be bounded in the graphene, whereas if one of the two constants has modulus different than one, the solution will be unbounded in the direction $\pm \mathbf{e}_1$ or $\pm \mathbf{e}_2$.

In order to study this situation we will proceed as follows: in Section A.5 we will analyze how to impose Kirchhoff's conditions (A.3.10)–(A.3.11) and, in Section A.6, we will characterize the values of λ respect to the constants R_1, R_2 .

A.5. Kirchhoff's conditions

In this section we will properly characterize the functions $\Psi = (\Psi_a)_{a \in \mathcal{A}}$ that satisfy Kirchhoff's conditions (A.3.10)–(A.3.11). First of all, we notice that each vertex $\mathbf{v} \in \mathcal{V}$ has exactly three adjacent edges, as Figure A.4 shows. Hence, continuity and flux conditions will be explicitly written at the vertices of type \mathbf{v}_i^j and $\hat{\mathbf{v}}_i^j$ of \mathcal{V} , where $i, j \in \mathbb{Z}$ (see A.3.2).

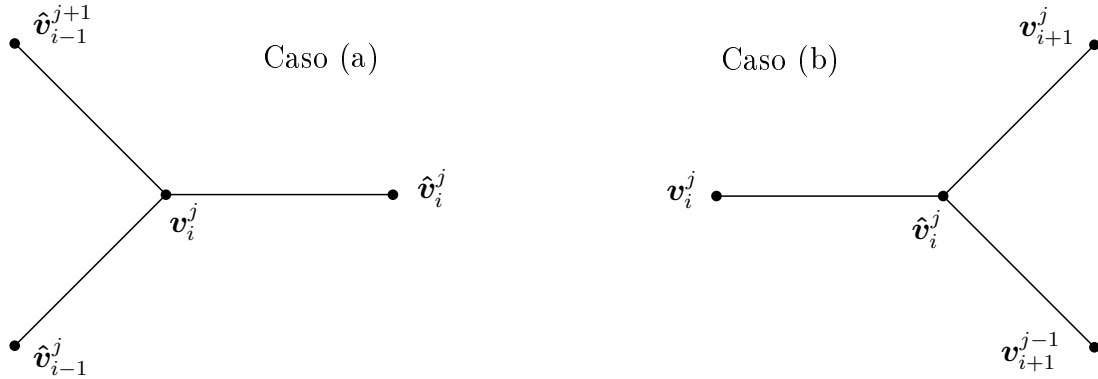


Fig. A.4: Adjacent edges to the vertices of type $\hat{\mathbf{v}}_i^j$ (Case (a)) and type \mathbf{v}_i^j (Case (b)).

The main result in this section will be split in two theorems separating the cases $\varphi_2(1; \lambda) \neq 0$ and $\varphi_2(1; \lambda) = 0$, where $\varphi_2(\cdot; \lambda)$ is the function defined in (A.2.2). This separation is important because in the second case λ is included in the Dirichlet spectrum. The first theorem completely characterizes the functions that satisfy the flux and continuity conditions stated in (A.3.10)–(A.3.11).

Theorem A.1. *If $\varphi_2(1; \lambda) \neq 0$, then every function $\Psi = (\Psi_a)_{a \in \mathcal{A}}$ satisfying (A.4.3), also satisfies (A.3.10)–(A.3.11) if and only if, for each $i, j \in \mathbb{Z}$, it holds*

$$-3\varphi_1(1; \lambda)\Psi(\mathbf{v}_i^j) + \Psi(\hat{\mathbf{v}}_i^j) + \Psi(\hat{\mathbf{v}}_{i-1}^j) + \Psi(\hat{\mathbf{v}}_{i-1}^{j+1}) = 0, \quad (\text{A.5.1})$$

$$-3\varphi_1(1; \lambda)\Psi(\hat{\mathbf{v}}_i^j) + \Psi(\mathbf{v}_i^j) + \Psi(\mathbf{v}_{i+1}^j) + \Psi(\mathbf{v}_{i+1}^{j-1}) = 0, \quad (\text{A.5.2})$$

where $\varphi_1(\cdot; \lambda)$ and $\varphi_1(\cdot; \lambda)$ are the functions described in (A.2.2).

Theorem A.2. *If $\varphi_2(1; \lambda) = 0$, every function $\Psi = (\Psi_a)_{a \in \mathcal{A}}$ satisfying (A.4.3), also satisfies the (A.3.10)–(A.3.11) if and only if the following conditions hold:*

(1) *There exists $k_\Psi \in \mathbb{R}$, depending on Ψ , such that*

$$\Psi(\mathbf{v}_i^j) = k_\Psi \quad y \quad \Psi(\hat{\mathbf{v}}_i^j) = k_\Psi \varphi_1(1; \lambda), \quad \forall i, j \in \mathbb{Z}. \quad (\text{A.5.3})$$

(2) *If on each edge $a \in \mathcal{A}$ the functions Ψ_a can be written as*

$$\tilde{\Psi}_a(t) = \tilde{\Psi}_a(0)\varphi_1(t; \lambda) + c_a\varphi_2(t; \lambda), \quad (\text{A.5.4})$$

where the parameterization t is chosen such that the edge goes from left to right, then the constants $(c_a)_{a \in \mathcal{A}}$ satisfy the relations:

$$2k_{\Psi}\varphi_1'(1; \lambda) + c_{[\mathfrak{v}_{i-1}^{j+1}, \mathfrak{v}_i^j]} + c_{[\mathfrak{v}_{i-1}^j, \mathfrak{v}_i^j]} = c_{[\mathfrak{v}_i^j, \mathfrak{v}_i^j]}\varphi_1(1; \lambda), \quad \forall i, j \in \mathbb{Z}, \quad (\text{A.5.5})$$

$$k_{\Psi}\varphi_1'(1; \lambda) + c_{[\mathfrak{v}_i^j, \mathfrak{v}_i^j]}\varphi_1(1; \lambda) = c_{[\mathfrak{v}_i^j, \mathfrak{v}_{i+1}^j]} + c_{[\mathfrak{v}_i^j, \mathfrak{v}_{i+1}^{j-1}]}, \quad \forall i, j \in \mathbb{Z}. \quad (\text{A.5.6})$$

A.5.1. Proof of Theorem A.1

We begin by enunciating the following lemma, where we introduce two auxiliary functions that will be used in this section.

Lemma A.1. *If $\varphi_2(1; \lambda) \neq 0$, then there exist two solutions $\phi_1(\cdot; \lambda)$ and $\phi_2(\cdot; \lambda)$ of (A.2.1) that satisfy the boundary conditions*

$$\phi_1(0; \lambda) = 1, \quad \phi_1(1; \lambda) = 0, \quad (\text{A.5.7})$$

and

$$\phi_2(0; \lambda) = 0, \quad \phi_2(1; \lambda) = 1. \quad (\text{A.5.8})$$

Moreover, $\phi_1(\cdot; \lambda)$ and $\phi_2(\cdot; \lambda)$ are unique and are determined by

$$\phi_1(t; \lambda) = \varphi_1(t; \lambda) - \left(\frac{\varphi_1(1; \lambda)}{\varphi_2(1; \lambda)} \right) \varphi_2(t; \lambda), \quad (\text{A.5.9})$$

$$\phi_2(t; \lambda) = \left(\frac{1}{\varphi_2(1; \lambda)} \right) \varphi_2(t; \lambda). \quad (\text{A.5.10})$$

DEMOSTRACIÓN. Existence follows directly from evaluating (A.5.9)–(A.5.10) in $t = 0$ and $t = 1$. In order to prove uniqueness of $\phi_1(\cdot; \lambda)$, let us assume that there exists a function $\phi_{1b}(\cdot; \lambda)$ solution of (A.2.1) that satisfies (A.5.7). This solution can be written as a linear combination of $\varphi_1(\cdot; \lambda)$ and $\varphi_2(\cdot; \lambda)$ as follows

$$\phi_{1b}(t; \lambda) = c_1\varphi_1(t; \lambda) + c_2\varphi_2(t; \lambda).$$

Evaluating at $t = 0$ and using (A.5.7) we obtain $c_1 = 1$. Now, by taking $t = 1$, from (A.5.7) and (A.5.9), we get

$$-\left(\frac{\varphi_1(1; \lambda)}{\varphi_2(1; \lambda)} \right) \varphi_2(1; \lambda) = c_2\varphi_2(1; \lambda) \quad (\text{A.5.11})$$

which leads to $c_2 = -\left(\frac{\varphi_1(1; \lambda)}{\varphi_2(1; \lambda)} \right)$, i.e., $\phi_{1b}(t; \lambda) = \phi_1(t; \lambda)$. Uniqueness of $\phi_2(\cdot; \lambda)$ can be obtained similarly. \square

Considering the functions $\phi_1(\cdot; \lambda)$ and $\phi_2(\cdot; \lambda)$ defined in Lemma A.1, we can prove Theorem A.1 as follows.

PROOF OF THEOREM A.1. The condition (A.3.10) is satisfied if and only if the function $\Psi = (\Psi_a)_{a \in \mathcal{A}}$ has a well-defined and unique trace (independent on the edge) on each vertex $\mathbf{v} \in \mathcal{V}$ of graphene. In expressions (A.5.1) and (A.5.2) we have explicitly used the values of traces of u at each vertex of the form $\mathbf{v}_i^j, \hat{\mathbf{v}}_i^j \in \mathcal{V}$. In order to finish the proof, we focus in the flux property (A.3.11).

We will prove that the identity (A.5.1) is equivalent to the flux condition (A.3.11) at the vertices \mathbf{v}_i^j of Figure A.4 - Case (a). To simplify notation, we denote by f, g and h to restrictions of the function u to the edges $[\mathbf{v}_i^j, \hat{\mathbf{v}}_{i-1}^{j+1}]$, $[\mathbf{v}_i^j, \hat{\mathbf{v}}_{i-1}^j]$ and $[\mathbf{v}_i^j, \hat{\mathbf{v}}_i^j]$, respectively; and by A, B, C and D the traces of the function Ψ at the vertices $\mathbf{v}_i^j, \hat{\mathbf{v}}_{i-1}^{j+1}, \hat{\mathbf{v}}_{i-1}^j$ and $\hat{\mathbf{v}}_i^j$, respectively (see Figure A.5).

Since the function $\Psi = (\Psi_a)_{a \in \mathcal{A}}$ satisfies (A.4.3), its traces are well-defined at the vertices and $\varphi_2(1; \lambda) \neq 0$, we can use the functions $\phi_1(\cdot; \lambda), \phi_2(\cdot; \lambda)$ defined in (A.5.7)–(A.5.8) in order to find its values on each edge $[\mathbf{v}_i^j, \hat{\mathbf{v}}_{i-1}^{j+1}]$, $[\mathbf{v}_i^j, \hat{\mathbf{v}}_{i-1}^j]$ y $[\mathbf{v}_i^j, \hat{\mathbf{v}}_i^j]$ in terms of its corresponding values at the vertices as follows,

$$\begin{cases} \tilde{f}(t) = A\phi_1(t; \lambda) + B\phi_2(t; \lambda) \\ \tilde{g}(t) = A\phi_1(t; \lambda) + C\phi_2(t; \lambda) \\ \tilde{h}(t) = A\phi_1(t; \lambda) + D\phi_2(t; \lambda) \end{cases} \quad (\text{A.5.12})$$

where \tilde{f}, \tilde{g} and \tilde{h} represent the composition of the functions f, g, h with the parameterization σ defined in (A.3.6) for each edge. With this notation, the condition (A.3.11) written at the vertex $\hat{\mathbf{v}}_i^j$ is equivalent to

$$\tilde{f}'(0) + \tilde{g}'(0) + \tilde{h}'(0) = 0. \quad (\text{A.5.13})$$

Then, taking derivatives in (A.5.12) and replacing in (A.5.13), we get

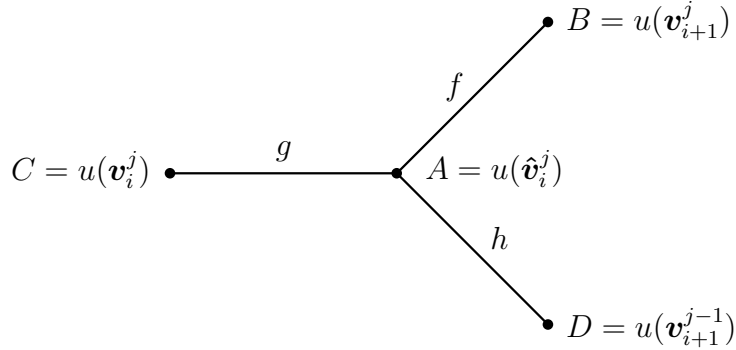


Fig. A.5: Vertices where the values of function u are A, B, C and D .

$$3A\phi_1'(0; \lambda) + (B + C + D)\phi_2'(0; \lambda) = 0. \quad (\text{A.5.14})$$

The values $\phi_1'(0; \lambda)$ and $\phi_2'(0; \lambda)$ can be directly obtained by taking derivatives in the definitions (A.5.9)–(A.5.10), evaluating at $t = 0$ and using the properties (A.2.2). Thus, the identity (A.5.14) is equivalent to

$$-3A \left(\frac{\varphi_1(1; \lambda)}{\varphi_2(1; \lambda)} \right) + (B + C + D) \left(\frac{1}{\varphi_2(1; \lambda)} \right) = 0.$$

Multiplying this expression by $\varphi_2(1; \lambda)$, we finally obtain

$$-3A\varphi_1(1; \lambda) + B + C + D = 0,$$

which is exactly the identity (A.5.1) with the corresponding changes in nomenclature.

The proof for (A.5.2) is similar, since equation (A.5.2) is equivalent to the flux conditions (A.3.11) established at the vertices $\hat{\mathbf{v}}_i^j$ (Figure A.4 - Case (b)). \square

A.5.2. Proof of Theorem A.2

In this section we study the particular case where $\varphi_2(1; \lambda) = 0$. Since the function $\varphi_2(\cdot; \lambda)$ also vanishes at $t = 0$ (see (A.2.2)), then $\varphi_2(\cdot; \lambda)$ is a non-trivial solution of the following Dirichlet boundary value problem:

$$\begin{cases} -\varphi_2''(x; \lambda) + V(x)\varphi_2(x; \lambda) = \lambda\varphi_2(x; \lambda), & \text{in } (0, 1) \\ \varphi_2(0; \lambda) = \varphi_2(1; \lambda) = 0. \end{cases}$$

Hence, the case we are interested in this section corresponds to the values of λ of the spectrum of the Dirichlet operator associated to the differential operator \mathcal{H} .

In the following lemma we summarize additional properties of the functions $\varphi_1(\cdot; \lambda)$ and $\varphi_2(\cdot; \lambda)$ that are satisfied in this case.

Lemma A.2. *If $\varphi_2(1; \lambda) = 0$, then*

$$\begin{aligned} \varphi_2'(1; \lambda) = \varphi_1(1; \lambda) = 1 & \quad y \quad \mathcal{D}(\lambda) = 2, \quad \text{o bien} \\ \varphi_2'(1; \lambda) = \varphi_1(1; \lambda) = -1 & \quad y \quad \mathcal{D}(\lambda) = -2. \end{aligned}$$

where $\mathcal{D}(\lambda)$ has been defined in (A.2.5).

DEMOSTRACIÓN. From (A.4.1), we have that $\varphi_1(1-t; \lambda)$ and $\varphi_2(1-t; \lambda)$ are solution of (A.2.1) and, therefore, they can be written as linear combination of $\varphi_1(\cdot; \lambda)$ and $\varphi_2(\cdot; \lambda)$ as follow

$$\varphi_1(1-t; \lambda) = \varphi_1(1; \lambda)\varphi_1(t; \lambda) - \varphi_1'(1; \lambda)\varphi_2(t; \lambda) \quad (\text{A.5.15})$$

$$\varphi_2(1-t; \lambda) = \varphi_2(1; \lambda)\varphi_1(t; \lambda) - \varphi_2'(1; \lambda)\varphi_2(t; \lambda). \quad (\text{A.5.16})$$

Considering $t = 1$ in (A.5.15) and in the derivative of (A.5.16), we have

$$\begin{aligned} 1 &= \varphi_1(1; \lambda)^2 - \varphi_1'(1; \lambda)\varphi_2(1; \lambda) \\ -1 &= \varphi_2(1; \lambda)\varphi_1'(1; \lambda) - \varphi_2'(1; \lambda)^2, \end{aligned}$$

i.e.,

$$\varphi_1'(1; \lambda)\varphi_2(1; \lambda) = \varphi_1(1; \lambda)^2 - 1 \quad (\text{A.5.17})$$

$$\varphi_1'(1; \lambda)\varphi_2(1; \lambda) = \varphi_2'(1; \lambda)^2 - 1. \quad (\text{A.5.18})$$

From (A.5.17)–(A.5.18), we have

$$\varphi_2'(1; \lambda)^2 = \varphi_1(1; \lambda)^2 = 1 \quad (\text{A.5.19})$$

and, from (A.2.4), we conclude

$$\varphi_2'(1; \lambda) = \varphi_1(1; \lambda) = 1, \text{ or } \varphi_2'(1; \lambda) = \varphi_1(1; \lambda) = -1.$$

Thus, from (A.2.5),

$$\mathcal{D}(\lambda) = 2, \text{ o bien } \mathcal{D}(\lambda) = -2,$$

respectively. \square

PROOF OF THEOREM A.2. In order to show part (1), we consider an arbitrary edge $a = [\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2] \in \mathcal{A}$ joining the vertices $\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2$. Since Ψ satisfies (A.4.3), from (A.2.3), we can write

$$\tilde{\Psi}_{[\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2]}(t) = \tilde{\Psi}_{[\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2]}(0)\varphi_1(t; \lambda) + \tilde{\Psi}'_{[\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2]}(0)\varphi_2(t; \lambda), \quad \forall t \in [0, 1].$$

Since $\varphi_2(1; \lambda) = 0$, we get

$$\tilde{\Psi}_{[\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2]}(1) = \tilde{\Psi}_{[\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2]}(0)\varphi_1(1; \lambda).$$

That is,

$$\Psi(\mathbf{v}_2) = \Psi(\mathbf{v}_1)\varphi_1(1; \lambda). \quad (\text{A.5.20})$$

Since this relation is true on each edge and $\varphi_1(1; \lambda)^2 = 1$, we conclude that going through two consecutive edges $[\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2]$ – $[\mathbf{v}_2, \mathbf{v}_3]$ there holds $\Psi(\mathbf{v}_3) = \Psi(\mathbf{v}_1)$. Then, using the notation $k_\Psi = \Psi(\mathbf{v}_0^0)$ and noticing that all the vertices \mathbf{v}_i^j are connected by the union of two consecutive edges, we get that

$$\Psi(\mathbf{v}_i^j) = k_\Psi \quad \forall i, j \in \mathbb{Z}.$$

Thus (A.5.3) is obtained using this identity together with (A.5.20) which allows us to relate the vertices \mathbf{v}_i^j with $\hat{\mathbf{v}}_i^j$.

In order to prove (A.5.5), we study the flux condition on the vertices of type $\mathbf{v}_i^j \in \mathcal{V}$. To simplify notation, we denote by f, g and h the restriction of the function Ψ to the edges $[\hat{\mathbf{v}}_{i-1}^{j+1}, \mathbf{v}_i^j]$, $[\hat{\mathbf{v}}_{i-1}^j, \mathbf{v}_i^j]$ and $[\mathbf{v}_i^j, \hat{\mathbf{v}}_i^j]$, respectively, and by A , the trace of the function Ψ on the central vertex \mathbf{v}_i^j (see Figure (A.6)). Using (A.5.20), we obtain that the traces of Ψ on the external vertices $\hat{\mathbf{v}}_{i-1}^{j+1}$, $\hat{\mathbf{v}}_{i-1}^j$ and $\hat{\mathbf{v}}_i^j$, are equal to $A\varphi_1(1; \lambda)$. In order to use the notation in (A.5.4), we denote by c_f, c_g and c_h the corresponding constants $c_{[\hat{\mathbf{v}}_{i-1}^{j+1}, \mathbf{v}_i^j]}$, $c_{[\hat{\mathbf{v}}_{i-1}^j, \mathbf{v}_i^j]}$ and $c_{[\mathbf{v}_i^j, \hat{\mathbf{v}}_i^j]}\varphi_1(1; \lambda)$.

Then, using (A.5.4), we write

$$\begin{cases} \tilde{f}(t) = A\varphi_1(1; \lambda) \varphi_1(t; \lambda) + c_f \varphi_2(t; \lambda) \\ \tilde{g}(t) = A\varphi_1(1; \lambda) \varphi_1(t; \lambda) + c_g \varphi_2(t; \lambda) \\ \tilde{h}(t) = A \varphi_1(t; \lambda) + c_h \varphi_2(t; \lambda) \end{cases} \quad (\text{A.5.21})$$

where \tilde{f}, \tilde{g} and \tilde{h} represent the composition of f, g, h with the parameterization σ defined in (A.3.6) for each edge.

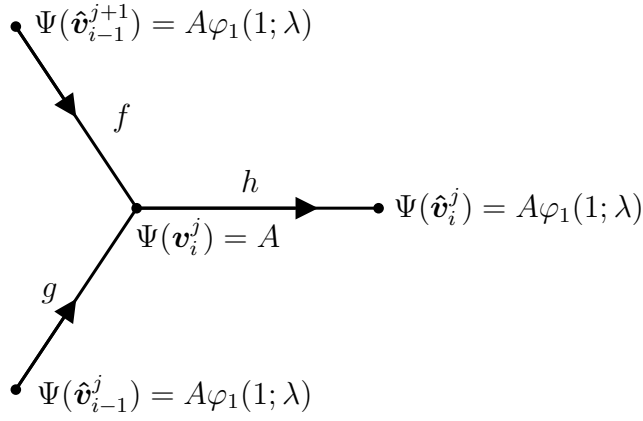


Fig. A.6: Vertices where the function u is A and $A\varphi_1(1; \lambda)$, and the respective orientation of the parameterization t .

Thus, the flux condition (A.3.11) on the vertex \mathbf{v}_i^j can be written as

$$-\tilde{f}'(1) - \tilde{g}'(1) + \tilde{h}'(0) = 0. \quad (\text{A.5.22})$$

Hence, taking derivative in (A.5.21) and replacing in (A.5.22), from (A.2.2), we get

$$2A\varphi_1(1; \lambda)\varphi_1'(1; \lambda) + (c_f + c_g)\varphi_2'(1; \lambda) = c_h.$$

Multiplying by $\varphi_1(1; \lambda)$ and using (A.2.4) and (A.5.19), we conclude that

$$2A\varphi_1'(1; \lambda) + c_f + c_g = c_h\varphi_1(1; \lambda).$$

We have proved, with corresponding changes of notation, that the flux condition (A.3.11) written at the vertex \mathbf{v}_i^j is equivalent to the identity (A.5.5).

Similarly, we can prove that the flux condition (A.3.11) written at the vertex $\hat{\mathbf{v}}_i^j$ is equivalent to the identity (A.5.6).

Thus, the conditions (A.3.10)–(A.3.11) are satisfied if and only if the identities (A.5.3), (A.5.5) and (A.5.6) are also satisfied. \square

A.6. Spectral Theory in the Graphene

In this section we are interested in characterize all functions $\Psi = (\Psi_a)_{a \in \mathcal{A}}$ that satisfy (A.4.3), the continuity and flux conditions (A.3.10)–(A.3.11), and also the quasi-periodicity conditions (A.4.4)–(A.4.5). The analysis in this section is restricted to the case where the values $\lambda \in \mathbb{R}$ satisfy $\varphi_2(1; \lambda) \neq 0$.

We will use the result showed in Theorem A.1, applied to the vertices \mathbf{v}_i^j and $\hat{\mathbf{v}}_i^j$, for all $i, j \in \mathbb{Z}$ (see A.7).

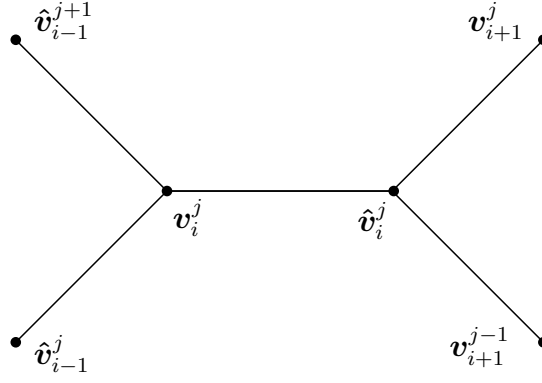


Fig. A.7: Vertices \mathbf{v}_i^j and $\hat{\mathbf{v}}_i^j$ and their corresponding adjacent vertices.

From the definitions (A.3.3)–(A.3.4) it holds that

$$\begin{aligned}\mathbf{v}_i^j &= \mathbf{v}_{i+1}^j - \mathbf{e}_1, & \mathbf{v}_{i+1}^{j-1} &= \mathbf{v}_{i+1}^j - \mathbf{e}_2 \\ \hat{\mathbf{v}}_i^j &= \hat{\mathbf{v}}_{i-1}^j + \mathbf{e}_1, & \hat{\mathbf{v}}_{i-1}^{j+1} &= \hat{\mathbf{v}}_{i-1}^j + \mathbf{e}_2.\end{aligned}$$

Hence, properties (A.4.4)–(A.4.5), transform the identities (A.5.1)–(A.5.2) to

$$\begin{aligned}-3\varphi_1(1; \lambda)\Psi(\mathbf{v}_i^j) + (1 + R_1^{-1} + R_1^{-1}R_2)\Psi(\hat{\mathbf{v}}_i^j) &= 0, \\ -3\varphi_1(1; \lambda)\Psi(\hat{\mathbf{v}}_i^j) + (1 + R_1 + R_1R_2^{-1})\Psi(\mathbf{v}_i^j) &= 0.\end{aligned}$$

If we multiply the first equation by R_1 and reorder the system leaving as variables the quantities $R_1\Psi(\mathbf{v}_i^j)$ and $\Psi(\hat{\mathbf{v}}_i^j)$, we get

$$-3\varphi_1(1; \lambda)R_1\Psi(\mathbf{v}_i^j) + (1 + R_1 + R_2)\Psi(\hat{\mathbf{v}}_i^j) = 0, \quad (\text{A.6.1})$$

$$(1 + R_1^{-1} + R_2^{-1})R_1\Psi(\mathbf{v}_i^j) - 3\varphi_1(1; \lambda)\Psi(\hat{\mathbf{v}}_i^j) = 0. \quad (\text{A.6.2})$$

These identities allow us to obtain the solutions in terms of λ , R_1 and R_2 , as a homogeneous linear system of equations. Thus, we conclude that it as a non-trivial solution if and only if the determinant of the corresponding matrix is zero, i.e., if

$$9\varphi_1(1; \lambda)^2 = (1 + R_1 + R_2)(1 + R_1^{-1} + R_2^{-1}). \quad (\text{A.6.3})$$

Equation (A.6.3) constitutes the dispersion relation of graphene for bounded or unbounded solutions having the quasi-periodic behavior (A.4.4)–(A.4.5). This equation relates the type of functions we seek, represented by the constants R_1 and R_2 (wave-type), with the values of $\lambda \in \mathbb{C}$ (frequencies) through the function $\varphi_1(1; \lambda)$.

In the following sections we will investigate for which values of λ bounded or unbounded solutions of the problem are obtained.

A.6.1. Bounded solutions

In this section we study the dispersion relation (A.6.3) in the case where R_1 and R_2 are such that the solution $\Psi = (\Psi_a)_{a \in \mathcal{A}}$ is bounded. Clearly, R_1 and R_2 must satisfy $|R_1| = |R_2| = 1$.

For this analysis, it is convenient to introduce the auxiliary variables $\theta_1, \theta_2 \in [-\pi, \pi]$ such that

$$R_1 = e^{i\theta_1} \quad R_2 = e^{i\theta_2}. \quad (\text{A.6.4})$$

In this way, the dispersion relation of graphene (A.6.3) becomes

$$9\varphi_1(1; \lambda)^2 = (1 + e^{i\theta_1} + e^{i\theta_2})(1 + e^{-i\theta_1} + e^{-i\theta_2}). \quad (\text{A.6.5})$$

Noticing here that the right hand side is the product of a complex number and its conjugate, we can write

$$\varphi_1(1; \lambda)^2 = F(\theta_1, \theta_2) := \frac{1}{9} |1 + e^{i\theta_1} + e^{i\theta_2}|^2. \quad (\text{A.6.6})$$

Simple calculations show that

$$0 \leq F(\theta_1, \theta_2) \leq 1, \quad \forall \theta_1, \theta_2 \in [-\pi, \pi].$$

In addition,

$$\left\{ F(\theta_1, \theta_2) : \theta_1, \theta_2 \in [-\pi, \pi] \right\} = [0, 1].$$

This result is summarized in the following lemma.

Lemma A.3. *For each $\theta_1, \theta_2 \in [-\pi, \pi]$, the solutions $\varphi_1(1; \lambda)$ of (A.4.3) that satisfy (A.2.2) also satisfy*

$$\varphi_1(1; \lambda) \in [-1, 1].$$

This result, together with the theory developed in Section A.2, implies the following corollary.

Corollary A.4. *For each $\theta_1, \theta_2 \in [-\pi, \pi]$, the values of λ associated to the solutions $\varphi_1(1; \lambda)$ of (A.4.3) that satisfy (A.2.2), are given by*

$$\lambda \in \varphi_1^{-1} \left(\sqrt{F(\theta_1, \theta_2)} \right) \cup \varphi_1^{-1} \left(-\sqrt{F(\theta_1, \theta_2)} \right)$$

where φ_1^{-1} denotes the preimage set of the function $\varphi_1(1; \lambda)$.

Remark A.5. *From (A.2.10), (A.2.11) y (A.2.12), follows that*

$$\lambda \in \mathfrak{A}_\theta \cup \mathfrak{A}_{\pi-\theta}$$

where

$$\theta = \cos^{-1} \sqrt{F(\theta_1, \theta_2)}$$

and the sets \mathfrak{A}_θ are defined by

$$\mathfrak{A}_\theta = \{\lambda_i(\theta) : i \in \mathbb{N}\}.$$

A.6.2. Unbounded solutions

We study now the dispersion relation (A.6.3) when $R_1, R_2 \in \mathbb{R}^*$. In this case, the expression on the right hand side can have different values for different R_1 and R_2 . That is why we are interested in characterizing the regions:

$$\mathcal{R}_S = \left\{ (R_1, R_2) \in \mathbb{R}^2 : 0 \leq (1 + R_1 + R_2)(1 + R_1^{-1} + R_2^{-1}) < 9 \right\} \quad (\text{A.6.7})$$

$$\mathcal{R}_U = \left\{ (R_1, R_2) \in \mathbb{R}^2 : 9 \leq (1 + R_1 + R_2)(1 + R_1^{-1} + R_2^{-1}) \right\}. \quad (\text{A.6.8})$$

We will show Theorem A.3.

Remark A.6. *We are not interested in the analysis in the region $(1+R_1+R_2)(1+R_1^{-1}+R_2^{-1}) < 0$, because in this case the system (A.6.1)–(A.6.2) does not have a non-trivial solution.*

Theorem A.3. *The regions \mathcal{R}_S and \mathcal{R}_U defined in (A.6.7)–(A.6.8) are not empty. Moreover, they are characterized by (see Figure A.8):*

(i) *If $R_1, R_2 > 0$, then $(R_1, R_2) \in \mathcal{R}_U$.*

(ii) *If $R_2 \in (-\infty, -1)$, then*

$$(R_1, R_2) \in \mathcal{R}_S \iff R_1 \in \left[\frac{-R_2}{1+R_2}, R_{1,2} \right) \cup [-(1+R_2), R_{1,1})$$

$$(R_1, R_2) \in \mathcal{R}_U \iff R_1 \in [R_{1,2}, 0) \cup [R_{1,1}, +\infty).$$

(iii) *If $R_2 = -1$, then $(R_1, R_2) \in \mathcal{R}_S$.*

(iv) *If $R_2 \in (-1, 0)$, then*

$$(R_1, R_2) \in \mathcal{R}_S \iff R_1 \in (R_{1,1}, -(1+R_2)] \cup \left(R_{1,2}, \frac{-R_2}{1+R_2} \right]$$

$$(R_1, R_2) \in \mathcal{R}_U \iff R_1 \in (-\infty, R_{1,1}] \cup (0, R_{1,2}].$$

(v) *If $R_2 \in (0, 7 - 4\sqrt{3})$, then*

$$(R_1, R_2) \in \mathcal{R}_S \iff R_1 \in [-(1+R_2), R_{1,1}) \cup \left(R_{1,2}, \frac{-R_2}{1+R_2} \right]$$

$$(R_1, R_2) \in \mathcal{R}_U \iff R_1 \in [R_{1,1}, R_{1,2}] \cup (0, +\infty).$$

(vi) *If $R_2 \in [7 - 4\sqrt{3}, 7 + 4\sqrt{3}]$, then*

$$(R_1, R_2) \in \mathcal{R}_S \iff R_1 \in \left[-(1+R_2), \frac{-R_2}{1+R_2} \right]$$

$$(R_1, R_2) \in \mathcal{R}_U \iff R_1 \in (0, \infty).$$

(vii) If $R_2 \in (7 + 4\sqrt{3}, \infty)$, then

$$\begin{aligned} (R_1, R_2) \in \mathcal{R}_S &\iff R_1 \in [-(1 + R_2), R_{1,2}) \cup \left(R_{1,1}, \frac{-R_2}{1 + R_2} \right] \\ (R_1, R_2) \in \mathcal{R}_U &\iff R_1 \in [R_{1,2}, R_{1,1}] \cup (0, +\infty). \end{aligned}$$

In (ii), (iv), (v) and (vii), $R_{1,1}$ and $R_{1,2}$ are given by

$$\begin{aligned} R_{1,1} &= -\left(\frac{R_2^2 - 6R_2 + 1}{2(R_2 + 1)} \right) + \frac{(R_2 - 1)\sqrt{R_2^2 - 14R_2 + 1}}{2(R_2 + 1)} \\ R_{1,2} &= -\left(\frac{R_2^2 - 6R_2 + 1}{2(R_2 + 1)} \right) - \frac{(R_2 - 1)\sqrt{R_2^2 - 14R_2 + 1}}{2(R_2 + 1)} \end{aligned}$$

DEMOSTRACIÓN. In order to show (i), it is enough to notice that

$$(1 + R_1 + R_2)(1 + R_1^{-1} + R_2^{-1}) = 3 + (R_1 + R_1^{-1}) + (R_2 + R_2^{-1}) + \left(\frac{R_1}{R_2} + \left(\frac{R_1}{R_2} \right)^{-1} \right).$$

Thus, if $R_1, R_2 > 0$, each term in parenthesis of the right hand side is greater or equal than two; hence, $(R_1, R_2) \in \mathcal{R}_U$.

To study the other cases, let us begin by characterizing those points that belong to $\mathcal{R}_U \cup \mathcal{R}_S$, i.e., those points in the plane that satisfy

$$G_1(R_1, R_2) := (1 + R_1 + R_2)(1 + R_1^{-1} + R_2^{-1}) \geq 0. \quad (\text{A.6.9})$$

First, it is convenient to reorder the expression $G_1(R_1, R_2)$ from (A.6.9) as follows:

$$G_1(R_1, R_2) = \frac{(R_1 + R_2 + 1)(R_1(R_2 + 1) + R_2)}{R_1 R_2}.$$

Here, the numerator is a quadratic expression when $R_2 \neq -1$. In this case, $G_1(R_1, R_2)$ changes sign at the points

$$-(1 + R_2), \quad \frac{-R_2}{1 + R_2}, \quad 0$$

and, towards $-\infty$, has the same sign as $\frac{R_2+1}{R_2}$. With this information we can solve inequality (A.6.9) for R_2 in different intervals:

$$\text{If } R_2 < -1, \text{ it holds } R_1 \in \left[\frac{-R_2}{1 + R_2}, 0 \right) \cup [-(1 + R_2), \infty). \quad (\text{A.6.10})$$

$$\text{If } R_2 \in (-1, 0), \text{ it holdse } R_1 \in (-\infty, -(1 + R_2)] \cup \left(0, \frac{-R_2}{1 + R_2} \right]. \quad (\text{A.6.11})$$

$$\text{If } R_2 > 0, \text{ it holds } R_1 \in \left[-(1 + R_2), \frac{-R_2}{1 + R_2} \right] \cup (0, \infty). \quad (\text{A.6.12})$$

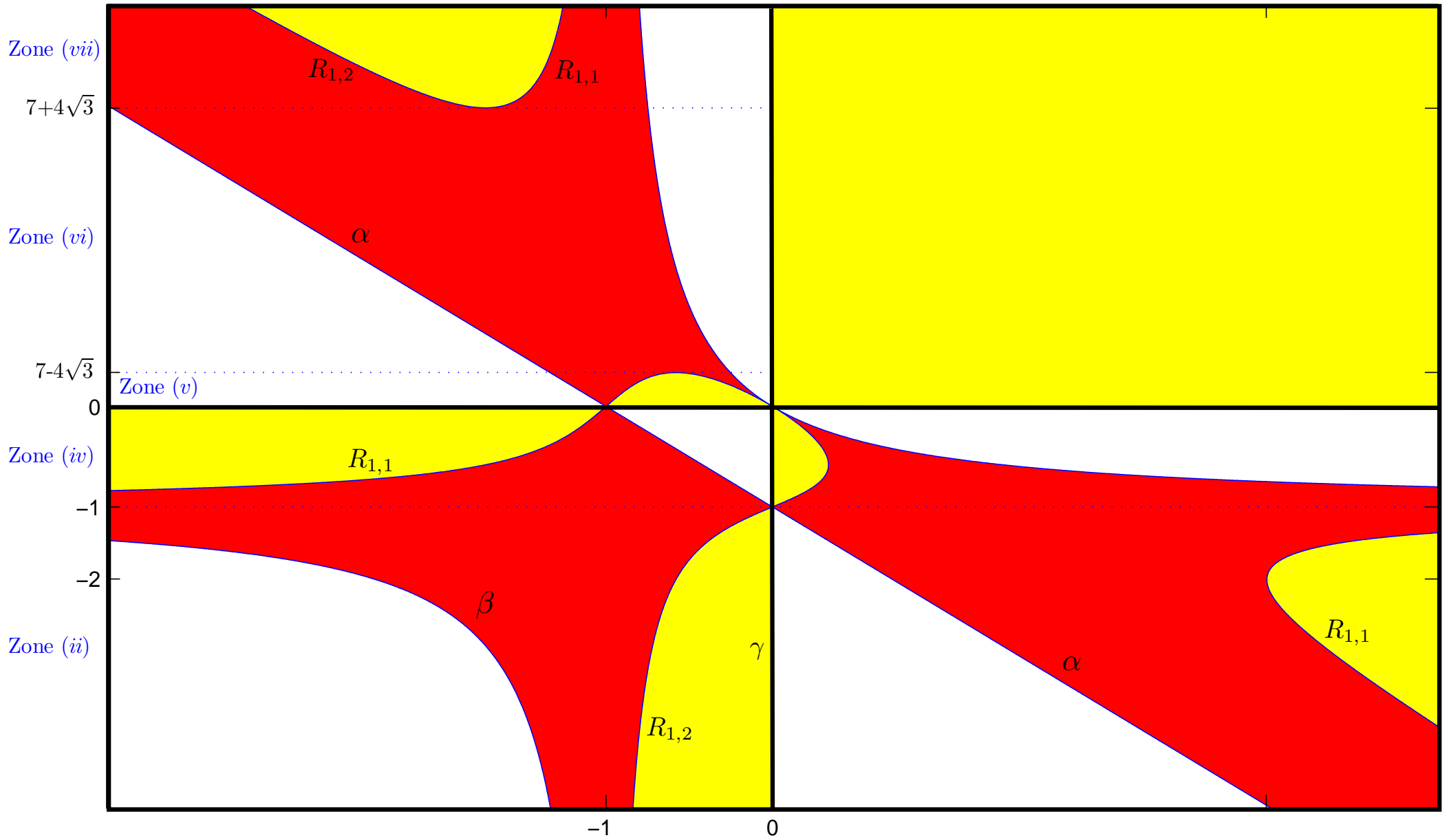


Fig. A.8: Regions \mathcal{R}_S (red) and \mathcal{R}_U (yellow), separated by the curves $\alpha : R_1 = -(1 + R_2)$, $\beta : R_1 = \frac{-R_2}{1 + R_2}$, $\gamma : R_1 = 0$, $R_1 = R_{1,1}$ and $R_1 = R_{1,2}$. The white regions are not interesting (see Remark A.6).

If $R_2 = -1$, inequality (A.6.9) becomes

$$G_1(R_1, -1) := 1 \geq 0, \quad (\text{A.6.13})$$

which is valid for all $R_1 \in \mathbb{R}^*$.

To find the separation between the regions \mathcal{R}_S and \mathcal{R}_U , it is enough to find the solution to the inequality

$$G_2(R_1, R_2) := (1 + R_1 + R_2)(1 + R_1^{-1} + R_2^{-1}) - 9 \geq 0,$$

which is equivalent to

$$G_2(R_1, R_2) = \frac{1}{R_1 R_2} (R_1^2(R_2 + 1) + R_1(R_2^2 - 6R_2 + 1) + R_2(R_2 + 1)) \geq 0. \quad (\text{A.6.14})$$

Once again, the case $R_2 = -1$ can be isolated and (A.6.14) becomes

$$G_2(R_1, R_2) = -8 \geq 0,$$

which is false for all $R_1 \in \mathbb{R}^*$. This, together with (A.6.13), implies (iii).

In the general case $R_2 \neq -1$, if we factor out $R_2 + 1$ in (A.6.14), we have

$$G_2(R_1, R_2) = \frac{R_2 + 1}{R_1 R_2} \left(R_1^2 + R_1 \frac{R_2^2 - 6R_2 + 1}{R_2 + 1} + R_2 \right). \quad (\text{A.6.15})$$

Then, to solve inequality (A.6.14), we can see that it is convenient to factorize the quadratic expression

$$R_1^2 + R_1 \frac{R_2^2 - 6R_2 + 1}{R_2 + 1} + R_2, \quad (\text{A.6.16})$$

whose discriminant is

$$\Delta = \frac{(R_2 - 1)^2(R_2^2 - 14R_2 + 1)}{(R_2 + 1)^2} = \frac{(R_2 - 1)^2(R_2 - (7 + 4\sqrt{3}))(R_2 - (7 - 4\sqrt{3}))}{(R_2 + 1)^2}.$$

Thus, if $R_2 \in [7 - 4\sqrt{3}, 7 + 4\sqrt{3}] \subseteq \mathbb{R}^+$, the quadratic expression (A.6.16) is always greater or equal than zero, and then, inequality (A.6.14) is equivalent to

$$\frac{1}{R_1} \geq 0, \quad (\text{A.6.17})$$

whose solution belong to $(0, \infty)$. This, together with (A.6.12), implies (vi).

If $R_2 \notin [7 - 4\sqrt{3}, 7 + 4\sqrt{3}]$, the quadratic (A.6.16) can be written as

$$(R_1 - R_{1,1})(R_1 - R_{1,2}),$$

where $R_{1,1}$ and $R_{1,2}$ are given by

$$R_{1,1} = -\left(\frac{R_2^2 - 6R_2 + 1}{2(R_2 + 1)}\right) + \frac{(R_2 - 1)\sqrt{R_2^2 - 14R_2 + 1}}{2(R_2 + 1)}$$

$$R_{1,2} = -\left(\frac{R_2^2 - 6R_2 + 1}{2(R_2 + 1)}\right) - \frac{(R_2 - 1)\sqrt{R_2^2 - 14R_2 + 1}}{2(R_2 + 1)}.$$

Hence, we can factorize (A.6.15) as follows:

$$G_2(R_1, R_2) = \frac{R_2 + 1}{R_1 R_2} (R_1 - R_{1,1})(R_1 - R_{1,2}).$$

In this case, $G_2(R_1, R_2)$ changes sign at the points

$$R_{1,1}, \quad R_{1,2}, \quad 0$$

and, towards $-\infty$, has the same sign as $\frac{R_2+1}{R_2}$. Using this information we can solve inequality (A.6.14) for R_2 in different intervals as follows:

- If $R_2 < -1$, it holds that $R_1 \in [R_{1,2}, 0) \cup [R_{1,1}, +\infty)$,
- If $R_2 \in (-1, 0)$, it holds that $R_1 \in (-\infty, R_{1,1}] \cup (0, R_{1,2}]$,
- If $R_2 \in (0, 7 - 4\sqrt{3})$, it holds that $R_1 \in [R_{1,1}, R_{1,2}] \cup (0, +\infty)$,
- If $R_2 > 7 + 4\sqrt{3}$, it holds that $R_1 \in [R_{1,2}, R_{1,1}] \cup (0, +\infty)$.

Comparing this result and (A.6.10)–(A.6.11), we obtain the cases (ii), (iv), (v) and (vii). \square

Remark A.7. From (A.2.10), (A.2.11) y (A.2.12), the following cases hold:

- If $(R_1, R_2) \in \mathcal{R}_S$, $\lambda \in \mathfrak{A}_\theta \cup \mathfrak{A}_{\pi-\theta}$, with $\theta = \cos^{-1} \sqrt{G(\theta_1, \theta_2)} \in (0, \pi/2]$
- If $(R_1, R_2) \in \mathcal{R}_U$, $\lambda \in \mathfrak{B}_\theta \cup \mathfrak{C}_\theta$, with $\theta = \cosh^{-1} \sqrt{G(\theta_1, \theta_2)} \in (0, \infty)$.

Here, the sets \mathfrak{A}_θ , \mathfrak{B}_θ and \mathfrak{C}_θ are defined by

$$\mathfrak{A}_\theta = \{\lambda_i(\theta) : i \in \mathbb{N}\}, \quad \mathfrak{B}_\theta = \{\mu_i(\theta) : i \in \mathbb{N}\}, \quad \mathfrak{C}_\theta = \{\nu_i(\theta) : i \in \mathbb{N}\},$$

where $\lambda_i(\theta)$, $\mu_i(\theta)$ and $\nu_i(\theta)$ are the eigenvalues mentioned in the problems (A.2.6), (A.2.7) and (A.2.8), respectively, and the function G is given by

$$G(\theta_1, \theta_2) = \frac{1}{9}(1 + R_1 + R_2)(1 + R_1^{-1} + R_2^{-1}).$$

Remark A.8. The eigenvectors obtained for each value of $\lambda = \lambda(R_1, R_2)$ satisfy (A.6.1) and (A.6.3). Then, its values at the vertices (\mathbf{v}_i^j) and $(\hat{\mathbf{v}}_i^j)$ satisfy the relation

$$\Psi(\hat{\mathbf{v}}_i^j) = \pm R_1 \sqrt{\frac{1 + R_1^{-1} + R_2^{-1}}{1 + R_1 + R_2}} \Psi(\mathbf{v}_i^j) \quad (\text{A.6.18})$$

Using (A.4.4)–(A.4.5) and (A.6.18) we obtain that the eigenvectors are characterized by:

$$\begin{aligned}\Psi(\mathbf{v}_i^j) &= R_1^i R_2^j \Psi(\mathbf{v}_0^0), \\ \Psi(\hat{\mathbf{v}}_i^j) &= \pm R_1^{i+1} R_2^j \sqrt{\frac{1 + R_1^{-1} + R_2^{-1}}{1 + R_1 + R_2}} \Psi(\mathbf{v}_0^0).\end{aligned}$$

A.7. Conclusions

We solved the eigenvalues problem for the Hamiltonian of the electron wave function in graphene considering Kirchhoff conditions, characterizing the stability of the solution.

Knowing that the spectrum of the Hill equation (A.2.1) can be completely characterized in one dimension by Theorem A.2.9, we looked for an analogous result for the spectrum of the Hamiltonian \mathcal{H} , defined in (A.4.2), in the hexagonal network G for graphene.

We divided the problem in two cases depending on the boundary condition: Dirichlet conditions when one of the basis function of the Hill equation is equal to zero, $\varphi_2(1, \lambda) = 0$; and a non-trivial case otherwise, $\varphi_2(1, \lambda) \neq 0$. The analysis of both cases led us to the two main theorems of this work, A.1 and A.2 respectively.

We obtained bounded solutions when considering normalized imaginary characteristic multipliers, (A.6.4), which are two dimensional analog of the one dimensional Bloch spectrum. We explicitly obtained the dispersion relation of the problem (A.6.3). From this we verified that the basis function $\varphi_1(1; \lambda)$ is greater than minus one and less than one, as established by the Lemma A.3. Thus, this result coincides with the theory developed in one dimension [3]. However, when we consider real characteristic multipliers, $R_1, R_2 \in \mathbb{R}^*$, the analogy breaks down. In one dimension all the solutions are unstable, while in the graph G we obtained different regions where the solutions can be stable or unstable depending upon the eigenvalues. These regions are completely defined as indicated in Theorem A.3 and the spectrum of \mathcal{H} is completely determined.

Acknowledgements

C. Conca and J. San Martín were partially supported from PFBasal-01 (CeBiB), PFBasal-03 (CMM) projects and by Fondecyt Grant 1140773. C.Conca also received partial support from Ecos-Conicyt Grant C13E05.

V. Solano was partially supported by CONICYT and PFBasal-03 (CMM) project.

We would like to thank M. Solano for valuable comments on the manuscript.

Apéndice B

A mathematical basis for the graphene

C. Conca ¹, J. San Martín ² and V. Solano ³

ABSTRACT: In this paper we introduce the concept of mathematical basis for the graphene honeycomb structure, and thus the study of eigenvalues problem can be reduced to one dimension.

B.1. Introduction

Graphene is a novel material with carbon atoms arranged in a honeycomb lattice. In the past years it has caught the attention of the scientific community for its unique electronic properties [2, 8, 19, 28, 32, 39, 53]. The behavior of the electrons in the lattice can be captured by solving the Hamilton equations of the system as an spectral, or eigenvalues, problem $\mathcal{H}\Psi \equiv \lambda\Psi$. However, a complete analytical solution stands as a mathematical challenge.

We present a new basis of representation for the graphene honeycomb structure G that facilitates the solution of the eigenvalue problem by reducing it to one dimension. For this, we define two spaces in the geometrical basis G , $L^2(G)$ and $H^2(G)$, that allow us to solve the Hamiltonian in the edges of G as $\mathcal{H} : H^2(G) \subset L^2(G) \rightarrow L^2(G)$.

¹Mathematical Engineering Department, Center for Mathematical Modeling - UMI 2807 CNRS-UCHile and Center for Biotechnology and Bioengineering, Universidad de Chile, Beauchef 851, Santiago, Chile. Email: cconca@dim.uchile.cl.

²Mathematical Engineering Department, Center for Mathematical Modeling - UMI 2807 CNRS-UCHile and Center for Biotechnology and Bioengineering, Universidad de Chile, Beauchef 851, Santiago, Chile. Email: jorge@dim.uchile.cl.

³Mathematical Engineering Department and Center for Mathematical Modeling UMI 2807 CNRS-UCHile, Universidad de Chile, Beauchef 851, Santiago, Chile, and Engineering Faculty, Universidad del Desarrollo, Avenida La Plaza 700, Santiago, Chile. Email: vsolano@udd.cl.

The paper is organized as follows. As part of this introduction, in Subsection B.1.1 we show a survey of the previous results and in Subsection B.1.2 we define the basis of the graphene as a set of edges L_q of G such that every eigenfunction Ψ can be extended to all G from the values of Ψ in each edge L_q . We also explicitly show the canonical basis of the system and some of its properties are presented. In Section B.2, we present the proofs of the principal results exposed in Subsection B.1.2. Finally, in Section B.3 we analyze bases with support in the half-plane, i.e., we seek for solutions of $\mathcal{H}\Psi \equiv \lambda\Psi$ such that $\Psi \in L^2(G)$ has a compact support.

B.1.1. Survey of the previous results

The mathematical definition of the problem has been set in previous works [16]. However, here we summarize theorems and definitions necessary to present our current results.

Floquet Theory

Let us consider the Hill's equation defined in [22] as

$$-u''(x) + V(x)u(x) = \lambda u(x). \quad (\text{B.1.1})$$

Here, the function V is real, piecewise-continuous and 1-periodic. We know that equation (B.1.1) has a basis of two linearly independent solutions $\varphi_1(\cdot; \lambda)$ and $\varphi_2(\cdot; \lambda)$, functions of the parameter λ , that satisfy

$$\varphi_1(0; \lambda) = 1, \varphi_1'(0; \lambda) = 0, \varphi_2(0; \lambda) = 0, \varphi_2'(0; \lambda) = 1. \quad (\text{B.1.2})$$

It is clear that any solution u of (B.1.1) can be written as a linear combination:

$$u(x) = u(0)\varphi_1(x; \lambda) + u'(0)\varphi_2(x; \lambda). \quad (\text{B.1.3})$$

The *discriminant* of (B.1.1) is given by

$$\mathcal{D}(\lambda) = \varphi_1(1; \lambda) + \varphi_2'(1; \lambda).$$

If the function V satisfies the symmetry relation $V(1-x) = V(x)$, then

$$\varphi_2'(1; \lambda) = \varphi_1(1; \lambda), \quad (\text{B.1.4})$$

implying

$$\mathcal{D} = 2\varphi_1(1; \lambda). \quad (\text{B.1.5})$$

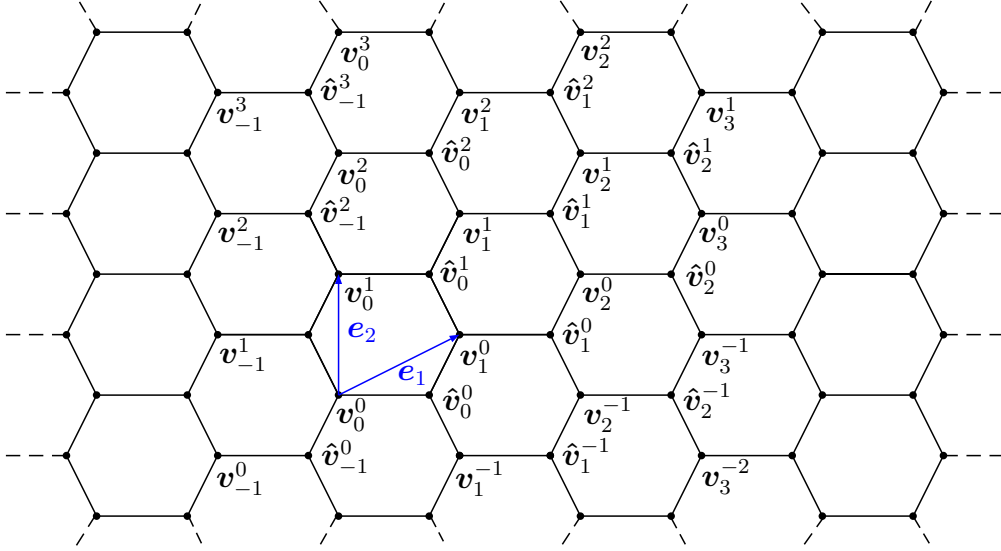


Fig. B.1: Vertices \mathbf{v}_i^j and $\hat{\mathbf{v}}_i^j$ representing the graphene G .

The graphene

The graphene is a substance made of pure carbon, where the atoms follow a regular hexagon pattern. This atoms are mathematically described by a set of vertices $\mathcal{V} \subseteq \mathbb{R}^2$ as Figure B.1 shows.

More precisely, let us introduce the vectors

$$\mathbf{e}_1 = \left(\frac{3}{2}, \frac{\sqrt{3}}{2} \right) \quad \text{y} \quad \mathbf{e}_2 = \left(0, \sqrt{3} \right). \quad (\text{B.1.6})$$

Then, the set of vertices \mathcal{V} is defined by

$$\mathcal{V} = \{ \mathbf{v}_i^j, \hat{\mathbf{v}}_i^j : i, j \in \mathbb{Z} \}, \quad (\text{B.1.7})$$

where the family of vertices $(\mathbf{v}_i^j)_{i,j \in \mathbb{Z}}$ and $(\hat{\mathbf{v}}_i^j)_{i,j \in \mathbb{Z}}$ are defined by the relations:

$$\mathbf{v}_i^j = i\mathbf{e}_1 + j\mathbf{e}_2 \quad (\text{B.1.8})$$

$$\hat{\mathbf{v}}_i^j = \mathbf{v}_i^j + (1, 0). \quad (\text{B.1.9})$$

As Figure B.1 shows, these vertices are connected by a set of edges \mathcal{A} defined by

$$\mathcal{A} = \{ a_E^{i,j}, a_N^{i,j}, a_S^{i,j} : a_E^{i,j} = [\mathbf{v}_i^j, \hat{\mathbf{v}}_i^j], a_N^{i,j} = [\mathbf{v}_i^j, \hat{\mathbf{v}}_{i-1}^j], a_S^{i,j} = [\mathbf{v}_i^j, \hat{\mathbf{v}}_{i-1}^{j+1}], i, j \in \mathbb{Z} \}, \quad (\text{B.1.10})$$

as it is displayed in Figure B.2. These set of edges and vertices constitute an hexagonal grid.

Using this notation, the structure of the graphene is represented by a non-oriented graph G determined by the set of vertices and edges previously defined, i.e.,

$$G = (\mathcal{V}, \mathcal{A}).$$

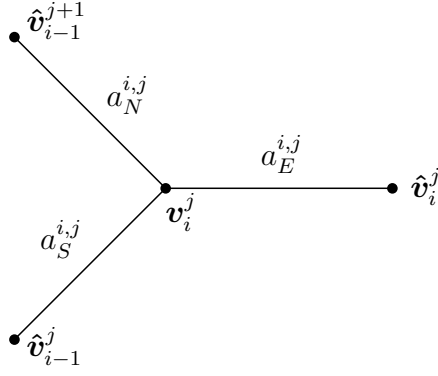


Fig. B.2: Edges $a_E^{i,j}$, $a_N^{i,j}$ and $a_S^{i,j}$, and their respective vertices.

We notice that each edge of the graphene is bijective to the segment $[0, 1] \subseteq \mathbb{R}$. In fact, in order to visualize this bijection, we consider the parameterization σ , oriented from \mathbf{v} to \mathbf{w} , defined by:

$$\begin{aligned} \sigma : [0, 1] \times \mathbb{R}^2 \times \mathbb{R}^2 &\rightarrow \mathbb{R}^2 \\ (t; \mathbf{v}, \mathbf{w}) &\mapsto \sigma(t; \mathbf{v}, \mathbf{w}) = \mathbf{v} + t(\mathbf{w} - \mathbf{v}). \end{aligned} \quad (\text{B.1.11})$$

Thus, each edge $[\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2] \in \mathcal{A}$ can be written as $\sigma([0, 1]; \mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2)$. The inverse function is such that

$$\mathbf{x} \in [\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2] \mapsto \sigma^{-1}(\mathbf{x}; \mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2) = \frac{\|\mathbf{x} - \mathbf{v}_1\|}{\|\mathbf{v}_2 - \mathbf{v}_1\|}. \quad (\text{B.1.12})$$

Using the parametrization (B.1.11), whose inverse is (B.1.12), for each edge $[\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2] \in \mathcal{A}$ we can define the space $L^2(\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2)$ as follows:

$$L^2(\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2) = \left\{ \tilde{\Psi} \circ \sigma^{-1}(\cdot; \mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2) : \tilde{\Psi} \in L^2(0, 1) \right\},$$

endowed with the norm $\|\tilde{\Psi} \circ \sigma^{-1}(\cdot; \mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2)\|_{L^2(\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2)} = \|\tilde{\Psi}\|_{L^2(0,1)}$. Then, we can define $L^2(\mathcal{A})$ as:

$$L^2(\mathcal{A}) = \left\{ (\Psi_a)_{a \in \mathcal{A}} \in \bigotimes_{a \in \mathcal{A}} L^2(a) : \sum_{a \in \mathcal{A}} \|\Psi_a\|_{L^2(a)}^2 < \infty \right\}. \quad (\text{B.1.13})$$

This space can be also called $L^2(G)$.

Similarly, for each edge $[\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2] \in \mathcal{A}$ we can define the Sobolev space $H^2(\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2)$ by:

$$H^2(\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2) = \left\{ \tilde{\Psi} \circ \sigma^{-1}(\cdot; \mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2) : \tilde{\Psi} \in H^2(0, 1) \right\},$$

endowed the norm $\|\tilde{\Psi} \circ \sigma^{-1}(\cdot; \mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2)\|_{H^2(\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2)} = \|\tilde{\Psi}\|_{H^2(0,1)}$. Thus, the Sobolev space $H^2(G)$ is defined as the subset of functions $(\Psi_a)_{a \in \mathcal{A}} \in \bigotimes_{a \in \mathcal{A}} H^2(a)$ which satisfy the three following conditions:

$$\sum_{a \in \mathcal{A}} \|\Psi_a\|_{H^2(a)}^2 < \infty, \quad (\text{B.1.14})$$

$$\forall \mathbf{v} \in \mathcal{V}, \forall a_1, a_2 \in \mathcal{A} [\mathbf{v} \in a_1 \cap a_2 \Rightarrow \Psi_{a_1}(\mathbf{v}) = \Psi_{a_2}(\mathbf{v})], \quad (\text{B.1.15})$$

$$\forall \mathbf{v} \in \mathcal{V} \sum_{\substack{\mathbf{v}_2 \in \mathcal{V} \\ [\mathbf{v}, \mathbf{v}_2] \in \mathcal{A}}} D\Psi_{[\mathbf{v}, \mathbf{v}_2]}(\mathbf{v}; \mathbf{v}_2 - \mathbf{v}) = 0, \quad (\text{B.1.16})$$

where we have denoted by $D\Psi_{[\mathbf{v}, \mathbf{v}_2]}(\mathbf{v}; \mathbf{v}_2 - \mathbf{v})$ the directional derivative of the function $\Psi_{[\mathbf{v}, \mathbf{v}_2]}$ at the point \mathbf{v} in the direction $[\mathbf{v}_2 - \mathbf{v}]$. These conditions are usually called Neumann conditions of the graphene or Kirchhoff conditions. The first condition, (B.1.15), corresponds to the continuity condition on each vertex going from one edge to the other. The second condition, (B.1.16), states that the sum of the outward fluxes from the vertex \mathbf{v} must be zero.

The Hamiltonian of graphene

Let us now define the Hamiltonian of graphene in $L^2(G)$. Let $V(t)$ be a function in $L^2(0, 1)$ such that

$$V(t) = V(1 - t). \quad (\text{B.1.17})$$

The *Hamiltonian of graphene* $\mathcal{H} : \mathcal{D}(\mathcal{H}) \subset L^2(G) \rightarrow L^2(G)$ is the operator, with domain $\mathcal{D}(\mathcal{H}) = H^2(G)$, that maps $\Psi = (\Psi_a)_{a \in \mathcal{A}} \in H^2(G)$ to $\mathcal{H}\Psi \in L^2(G)$, $\mathcal{H}\Psi = ((\mathcal{H}\Psi)_a)_{a \in \mathcal{A}}$, such that

$$(\mathcal{H}\Psi)_a(\mathbf{x}) = \left(-\tilde{\Psi}_a'' + V\tilde{\Psi}_a \right) \circ \sigma^{-1}(\mathbf{x}; a), \quad (\text{B.1.18})$$

where, for each edge $a \in \mathcal{A}$, $\tilde{\Psi}_a = \Psi_a \circ \sigma(\cdot; a) \in H^2(0, 1)$.

The goal of this section is to study the spectrum of the operator \mathcal{H} , characterizing the functions Ψ which are bounded or unbounded solutions. In order to do this, we seek for non-zero functions $\Psi = (\Psi_a)_{a \in \mathcal{A}}$ satisfying (B.1.15)–(B.1.16) and the following differential equations

$$-\tilde{\Psi}_a''(t) + V(t)\tilde{\Psi}_a(t) = \lambda\tilde{\Psi}_a(t), \quad \forall a \in \mathcal{A}, \forall t \in (0, 1), \quad (\text{B.1.19})$$

where $\lambda \in \mathbb{R}$ is a parameter.

Kirchhoff's conditions

In this section we will properly characterize the functions $\Psi = (\Psi_a)_{a \in \mathcal{A}}$ that satisfy Kirchhoff's conditions (B.1.15)–(B.1.16). First of all, we notice that each vertex $\mathbf{v} \in \mathcal{V}$ has exactly three adjacent edges, as Figure B.3 shows. Hence, continuity and flux conditions will be explicitly written at the vertices of type \mathbf{v}_i^j and $\hat{\mathbf{v}}_i^j$ of \mathcal{V} , where $i, j \in \mathbb{Z}$ (see definition (B.1.7)).

The main result in this section will be split in two theorems separating the cases $\varphi_2(1; \lambda) \neq 0$ and $\varphi_2(1; \lambda) = 0$, where $\varphi_2(\cdot; \lambda)$ is the function defined in (B.1.2). This separation is important because in the second case λ is included in the Dirichlet case. The first Theorem completely characterizes the functions that satisfy the flux and continuity conditions stated in (B.1.15)–(B.1.16).

Theorem B.1. *If $\varphi_2(1; \lambda) \neq 0$, then every function $\Psi = (\Psi_a)_{a \in \mathcal{A}}$ satisfying (B.1.19), also*

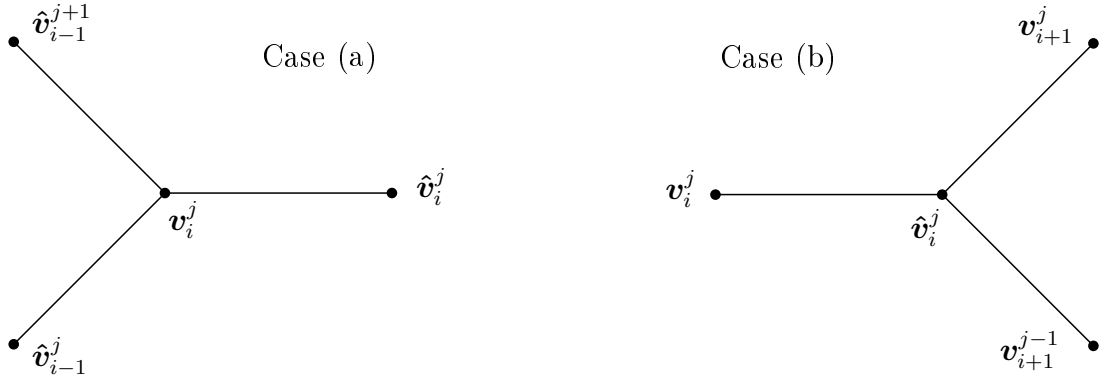


Fig. B.3: Adjacent edges to the vertices of type \hat{v}_i^j (Case (a)) and type v_i^j (Case (b)).

satisfies (B.1.15)–(B.1.16) if and only if, for each $i, j \in \mathbb{Z}$, it holds

$$-3\varphi_1(1; \lambda)\Psi(v_i^j) + \Psi(\hat{v}_i^j) + \Psi(\hat{v}_{i-1}^j) + \Psi(\hat{v}_{i-1}^{j+1}) = 0, \quad (\text{B.1.20})$$

$$-3\varphi_1(1; \lambda)\Psi(\hat{v}_i^j) + \Psi(v_i^j) + \Psi(v_{i+1}^j) + \Psi(v_{i+1}^{j-1}) = 0, \quad (\text{B.1.21})$$

where $\varphi_1(\cdot; \lambda)$ and $\varphi_2(\cdot; \lambda)$ are the functions described in (B.1.2).

Theorem B.2. *If $\varphi_2(1; \lambda) = 0$, every function $\Psi = (\Psi_a)_{a \in \mathcal{A}}$ satisfying (B.1.19), also satisfies the (B.1.15)–(B.1.16) if and only if the following conditions hold:*

(1) *There exists $k_\Psi \in \mathbb{R}$, depending on Ψ , such that*

$$\Psi(v_i^j) = k_\Psi \quad \text{y} \quad \Psi(\hat{v}_i^j) = k_\Psi \varphi_1(1; \lambda), \quad \forall i, j \in \mathbb{Z}. \quad (\text{B.1.22})$$

(2) *If on each edge $a \in \mathcal{A}$ the functions Ψ_a can be written as*

$$\tilde{\Psi}_a(t) = \tilde{\Psi}_a(0)\varphi_1(t; \lambda) + c_a\varphi_2(t; \lambda), \quad (\text{B.1.23})$$

where the parameterization t is chosen such that the edge goes from left to right, then the constants $(c_a)_{a \in \mathcal{A}}$ satisfy the relations:

$$2k_\Psi\varphi_1'(1; \lambda) + c_{[\hat{v}_{i-1}^{j+1}, v_i^j]} + c_{[\hat{v}_{i-1}^j, v_i^j]} = c_{[v_i^j, \hat{v}_i^j]}\varphi_1(1; \lambda), \quad \forall i, j \in \mathbb{Z}, \quad (\text{B.1.24})$$

$$k_\Psi\varphi_1'(1; \lambda) + c_{[v_i^j, \hat{v}_i^j]}\varphi_1(1; \lambda) = c_{[\hat{v}_i^j, v_{i+1}^j]} + c_{[\hat{v}_i^j, v_{i+1}^{j-1}]}, \quad \forall i, j \in \mathbb{Z}. \quad (\text{B.1.25})$$

B.1.2. Presentation of new results

The goal of this article is to study in more detail the structure of the function space $\Psi = (\Psi_a)_{a \in \mathcal{A}}$ that satisfies the Kirchhoff conditions (B.1.15)–(B.1.16) and the equations (B.1.19). Onwards we will consider these type of functions, and a parameter λ such that $\varphi_2(1; \lambda) \neq 0$,

where $\varphi_2(\cdot; \lambda)$ is the function described in (B.1.2), and therefore the conclusions in Theorem B.1 hold true.

In the hexagonal grid G , we call *profile* L_q , $q \in \mathbb{Z}$, to the following set of vertices (see Figure B.4):

$$L_q = \{\mathbf{v}_{2k}^{q-k}, \hat{\mathbf{v}}_{2k}^{q-k}, \mathbf{v}_{2k+1}^{q-k}, \hat{\mathbf{v}}_{2k+1}^{q-k} : k \in \mathbb{Z}\}. \quad (\text{B.1.26})$$

Thus, all the vertices of G belong to one of these sets, i.e.,

$$\mathcal{V} = \bigcup_{q \in \mathbb{Z}} L_q.$$

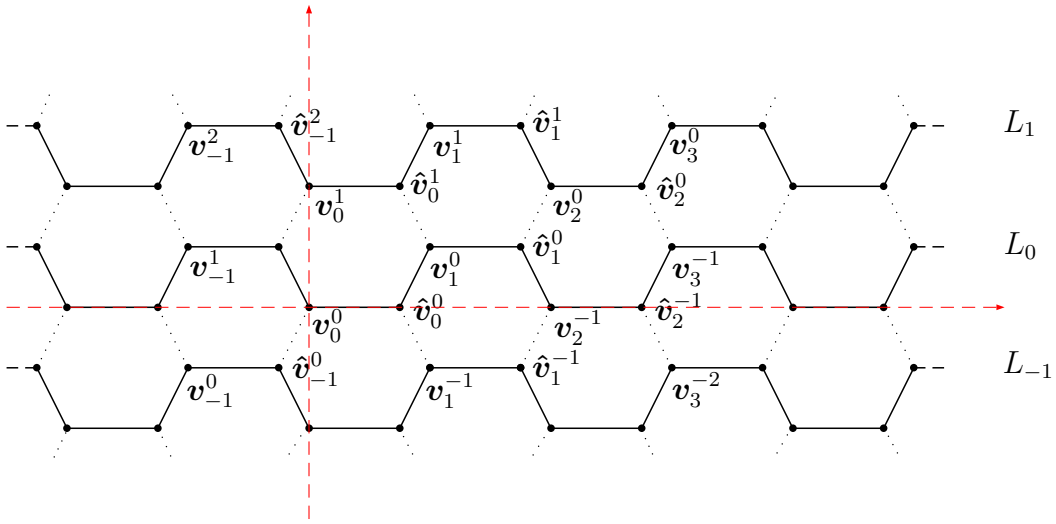


Fig. B.4: Set L_q , $q \in \{-1, 0, 1\} \subset \mathbb{Z}$ and its respective edges.

The profile L_q consists of four generating vertices periodically repeated with period $2\mathbf{e}_1 - \mathbf{e}_2$. That is, for all $k \in \mathbb{N}$,

$$\mathbf{v}_{2k}^{q-k} = \mathbf{v}_0^q + k(2\mathbf{e}_1 - \mathbf{e}_2) \quad (\text{B.1.27})$$

$$\hat{\mathbf{v}}_{2k}^{q-k} = \hat{\mathbf{v}}_0^q + k(2\mathbf{e}_1 - \mathbf{e}_2) \quad (\text{B.1.28})$$

$$\mathbf{v}_{2k+1}^{q-k} = \mathbf{v}_1^q + k(2\mathbf{e}_1 - \mathbf{e}_2) \quad (\text{B.1.29})$$

$$\hat{\mathbf{v}}_{2k+1}^{q-k} = \hat{\mathbf{v}}_1^q + k(2\mathbf{e}_1 - \mathbf{e}_2). \quad (\text{B.1.30})$$

Proposition B.1. *Let $\Psi \in L^2(G)$ such that $\mathcal{H}\Psi \equiv \lambda\Psi$. If the values of Ψ at the vertices of L_q are known, then the value of Ψ at every node and edge of G can be determined by using the following recursive relations:*

$$\begin{pmatrix} \Psi\left(\hat{\mathbf{v}}_{2(k-1)+1}^{(q+1)-(k-1)}\right) \\ \Psi\left(\mathbf{v}_{2k}^{(q+1)-k}\right) \\ \Psi\left(\hat{\mathbf{v}}_{2k}^{(q+1)-k}\right) \\ \Psi\left(\mathbf{v}_{2k+1}^{(q+1)-k}\right) \end{pmatrix} = \mathcal{M} \begin{pmatrix} \Psi\left(\mathbf{v}_{2(k-1)+1}^{q-(k-1)}\right) \\ \Psi\left(\hat{\mathbf{v}}_{2(k-1)+1}^{q-(k-1)}\right) \\ \Psi\left(\mathbf{v}_{2k}^{q-k}\right) \\ \Psi\left(\hat{\mathbf{v}}_{2k}^{q-k}\right) \\ \Psi\left(\mathbf{v}_{2k+1}^{q-k}\right) \\ \Psi\left(\hat{\mathbf{v}}_{2k+1}^{q-k}\right) \end{pmatrix}, \quad (\text{B.1.31})$$

$$\begin{pmatrix} \Psi\left(\hat{\mathbf{v}}_{2(k-1)}^{(q-1)-k}\right) \\ \Psi\left(\mathbf{v}_{2(k-1)+1}^{(q-1)-k}\right) \\ \Psi\left(\hat{\mathbf{v}}_{2(k-1)+1}^{(q-1)-(k+1)}\right) \\ \Psi\left(\mathbf{v}_{2k}^{(q-1)-(k+1)}\right) \end{pmatrix} = \mathcal{M} \begin{pmatrix} \Psi\left(\mathbf{v}_{2(k-1)}^{q-k}\right) \\ \Psi\left(\hat{\mathbf{v}}_{2(k-1)}^{q-k}\right) \\ \Psi\left(\mathbf{v}_{2(k-1)+1}^{q-k}\right) \\ \Psi\left(\hat{\mathbf{v}}_{2(k-1)+1}^{q-k}\right) \\ \Psi\left(\mathbf{v}_{2k}^{q-(k+1)}\right) \\ \Psi\left(\hat{\mathbf{v}}_{2k}^{q-(k+1)}\right) \end{pmatrix}, \quad (\text{B.1.32})$$

with

$$\mathcal{M} = \begin{pmatrix} s & s^2 - 1 & s & 1 & s & 1 \\ -1 & -s & -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 & -s & -1 \\ 1 & s & 1 & s & s^2 - 1 & s \end{pmatrix}. \quad (\text{B.1.33})$$

and

$$s = -3\varphi_1(1; \lambda),$$

where $\varphi_1(\cdot; \lambda)$ defined (B.1.2).

Corollary B.2. *If $\Psi \in L^2(G)$ is such that $\mathcal{H}\Psi \equiv \lambda\Psi$ and $\Psi = 0$ at each vertex of L_q , for some fix $q \in \mathbb{Z}$, then $\Psi \equiv 0$.*

Remark B.3. *We say that the profile L_q is a basis for the graphene G , because every function Ψ defined on G can be generated from the values of Ψ at each node of L_q .*

Remark B.4. *Since all profiles L_q can be chosen as a basis for graphene, without loss of generality we explicitly defined the basis function for $q = 0$. Using the one-dimensional structure*

of L_0 , it is known that an arbitrary function in this profile, can be generated by introducing a canonical basis. This basis is composed by functions, whose values on each vertex of L_0 are equal to zero, except in one of them where the value becomes one. The L_0 vertices are defined in (B.1.26), from four core vertices and the observed periodicity on (B.1.27)–(B.1.30). We denote the canonical basis functions in L_0 by $\Phi_{1,k}$, $\Phi_{2,k}$, $\Phi_{3,k}$, $\Phi_{4,k}$, $k \in \mathbb{Z}$, such that

$$\Phi_{1,k}(\mathbf{v}) = 0 \quad \forall \mathbf{v} \in L_0 \setminus \{\mathbf{v}_{2k}^{-k}\}, \quad \Phi_{1,k}(\mathbf{v}_{2k}^{-k}) = 1, \quad (\text{B.1.34})$$

$$\Phi_{2,k}(\mathbf{v}) = 0 \quad \forall \mathbf{v} \in L_0 \setminus \{\hat{\mathbf{v}}_{2k}^{-k}\}, \quad \Phi_{2,k}(\hat{\mathbf{v}}_{2k}^{-k}) = 1, \quad (\text{B.1.35})$$

$$\Phi_{3,k}(\mathbf{v}) = 0 \quad \forall \mathbf{v} \in L_0 \setminus \{\mathbf{v}_{2k+1}^{-k}\}, \quad \Phi_{3,k}(\mathbf{v}_{2k+1}^{-k}) = 1, \quad (\text{B.1.36})$$

$$\Phi_{4,k}(\mathbf{v}) = 0 \quad \forall \mathbf{v} \in L_0 \setminus \{\hat{\mathbf{v}}_{2k+1}^{-k}\}, \quad \Phi_{4,k}(\hat{\mathbf{v}}_{2k+1}^{-k}) = 1. \quad (\text{B.1.37})$$

If we have defined this functions in the profile L_0 , we can extend it to G thanks to Proposition B.1, and thus we obtain a canonical basis for the complete graphene G .

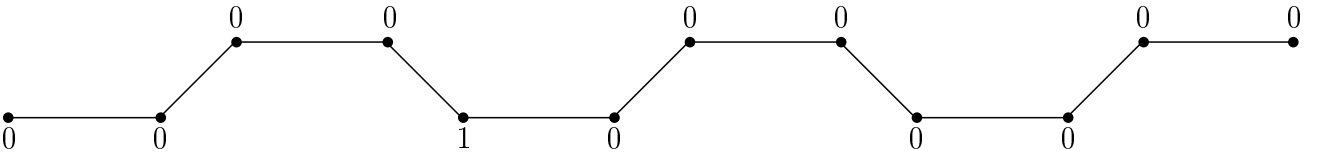


Fig. B.5: Function $\Phi_{1,k}$ in some vertices of L_0 , including the vertex \mathbf{v}_{2k}^{-k} where is equal to one.

In (B.1.34)–(B.1.37) we introduced the functions $\Phi_{1,k}$, $\Phi_{2,k}$, $\Phi_{3,k}$, $\Phi_{4,k}$, $k \in \mathbb{Z}$, that form the canonical base of the graphene. Also, by definition, we know the value of these functions in the vertices of the profile L_0 . In this section, we are interested in calculating the values of these functions in the others profiles L_q , for $q \in \mathbb{Z} \setminus \{0\}$.

The support is bounded in the profile L_0 . One of the question that we want to address is whether the support is still bounded in the rest of the profiles and in the complete graphene. Using the periodicity of the L_0 , all the analysis in this section can be concentrated in the study of the functions $\Phi_{1,0}$, $\Phi_{2,0}$, $\Phi_{3,0}$ y $\Phi_{4,0}$. Once we know completely these functions, the other ones are horizontal translations (respect to the vector $2\mathbf{e}_1 - \mathbf{e}_2$).

Theorem B.3. *Let us consider the function $\Phi_{1,0}$ defined in (B.1.34) and the vector $\mathbf{X} = 2\mathbf{e}_1 - \mathbf{e}_2 = (3, 0)$.*

(i) *In all the profiles L_q , with $q \geq 1$, we have that for all $j \geq q$*

$$\Phi_{1,0}(\hat{\mathbf{v}}_1^q + (j-1)\mathbf{X}) = \Phi_{1,0}(\mathbf{v}_0^q + j\mathbf{X}) = \Phi_{1,0}(\hat{\mathbf{v}}_0^q + j\mathbf{X}) = \Phi_{1,0}(\mathbf{v}_1^q + j\mathbf{X}) = 0. \quad (\text{B.1.38})$$

(ii) *In all the profiles L_q , with $q \geq 1$, we have that for all $j \geq -q$*

$$\Phi_{1,0}(\hat{\mathbf{v}}_1^q + (j-1)\mathbf{X}) = \Phi_{1,0}(\mathbf{v}_0^q + j\mathbf{X}) = \Phi_{1,0}(\hat{\mathbf{v}}_0^q + j\mathbf{X}) = \Phi_{1,0}(\mathbf{v}_1^q + j\mathbf{X}) = 0. \quad (\text{B.1.39})$$

(iii) In all the profiles L_q , with $q \geq 1$, we have that for $j = q - 1$

$$\begin{aligned}\Phi_{1,0}(\hat{\mathbf{v}}_1^q + (j-1)\mathbf{X}) &= s, & \Phi_{1,0}(\mathbf{v}_0^q + j\mathbf{X}) &= -1, \\ \Phi_{1,0}(\hat{\mathbf{v}}_0^q + j\mathbf{X}) &= 0, & \Phi_{1,0}(\mathbf{v}_1^q + j\mathbf{X}) &= 1.\end{aligned}\tag{B.1.40}$$

(iv) In all the profiles L_q , with $q \geq 2$, we have that for $j = -q + 1$

$$\begin{aligned}\Phi_{1,0}(\hat{\mathbf{v}}_1^q + (j-1)\mathbf{X}) &= s, & \Phi_{1,0}(\mathbf{v}_0^q + j\mathbf{X}) &= 0, \\ \Phi_{1,0}(\hat{\mathbf{v}}_0^q + j\mathbf{X}) &= -s, & \Phi_{1,0}(\mathbf{v}_1^q + j\mathbf{X}) &= s^2.\end{aligned}\tag{B.1.41}$$

(v) In all the profiles L_q , with $q \geq 2$, we have that for $j = q - 2$

$$\begin{aligned}\Phi_{1,0}(\hat{\mathbf{v}}_1^q + (j-1)\mathbf{X}) &= (2q-3)s(s^2-1), \\ \Phi_{1,0}(\mathbf{v}_0^q + j\mathbf{X}) &= -(2q-3)(s^2-1), \\ \Phi_{1,0}(\hat{\mathbf{v}}_0^q + j\mathbf{X}) &= -s, \\ \Phi_{1,0}(\mathbf{v}_1^q + j\mathbf{X}) &= (2q-2)(s^2-1).\end{aligned}\tag{B.1.42}$$

(vi) In all the profiles L_q , with $q \geq 3$, we have that for $j = -q + 2$

$$\begin{aligned}\Phi_{1,0}(\hat{\mathbf{v}}_1^q + (j-1)\mathbf{X}) &= (2q-3)s(s^2+1), \\ \Phi_{1,0}(\mathbf{v}_0^q + j\mathbf{X}) &= -s^2, \\ \Phi_{1,0}(\hat{\mathbf{v}}_0^q + j\mathbf{X}) &= -(2q-4)s(s^2+1), \\ \Phi_{1,0}(\mathbf{v}_1^q + j\mathbf{X}) &= (2q-4)s^2(s^2+1).\end{aligned}\tag{B.1.43}$$

(vii) The values of $\Phi_{1,0}$ in the profiles L_q with $q < 0$ can be obtained from the previous items considering the antisymmetry as follows:

$$\frac{y_1 + y_2}{2} = \frac{\sqrt{3}}{2} \Rightarrow \Phi_{1,0}(x, y_1) + \Phi_{1,0}(x, y_2) = 0.\tag{B.1.44}$$

Moreover, we can characterize the functions $\Phi_{2,0}$, $\Phi_{3,0}$ y $\Phi_{4,0}$. Considering the respective symmetries, we can write

$$\begin{aligned}\Phi_2(x, y) &= \Phi_1(1-x, y) \\ \Phi_3(x, y) &= \Phi_1\left(x - \frac{3}{2}, \frac{\sqrt{3}}{2} - y\right). \\ \Phi_4(x, y) &= \Phi_1\left(\frac{5}{2} - x, \frac{\sqrt{3}}{2} - y\right)\end{aligned}$$

Therefore, from here, we have that

- From (iii) of Theorem B.3, we can conclude that $\Phi_{1,0}$, $\Phi_{2,0}$, $\Phi_{3,0}$ and $\Phi_{4,0}$ are not bounded.

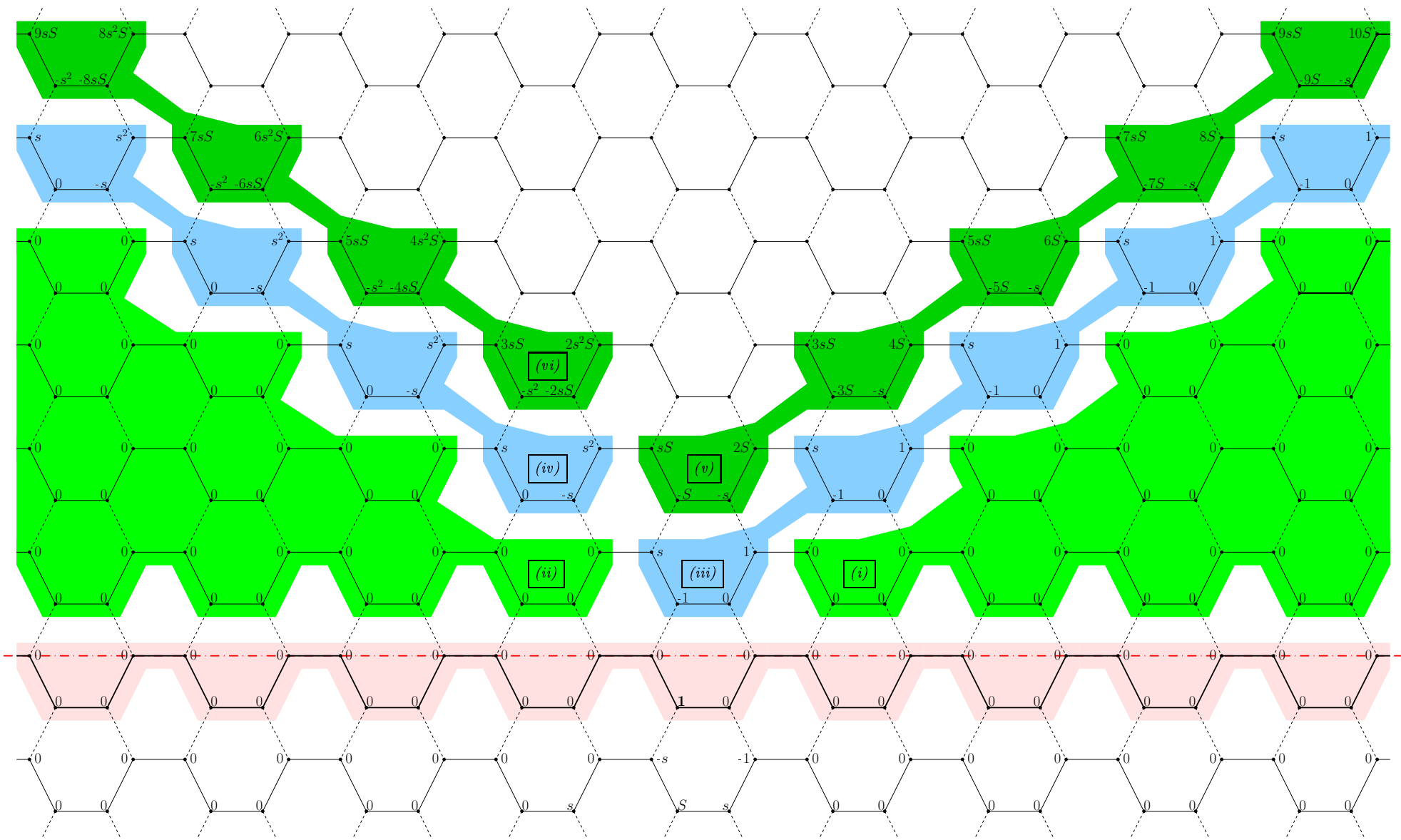


Fig. B.6: Function $\Phi_{1,0}$ evaluated at each vertex of G . The different colors illustrate the respective parts (i)–(vi) of Theorem B.3. Here, $S = s^2 - 1$.

- From (v) of Theorem B.3, we can conclude that $\Phi_{1,0}$, $\Phi_{2,0}$, $\Phi_{3,0}$ and $\Phi_{4,0}$ do not have compact support.
- It is possible to prove that the finite linear combinations of $\Phi_{1,0}$, $\Phi_{2,0}$, $\Phi_{3,0}$ and $\Phi_{4,0}$ are not bounded and do not have compact support.

B.2. Proof of the main results

Now we will prove the main results stated in Section B.1.2.

B.2.1. A canonical basis for the graphene

This subsection is devoted to the proof of Proposition B.1, and its respective corollary.

For $q, k \in \mathbb{Z}$, we consider the vertices in the sets L_q and L_{q+1} , as Figure B.7 shows. We recall that L_q is 4-periodic, for all $q \in \mathbb{Z}$.

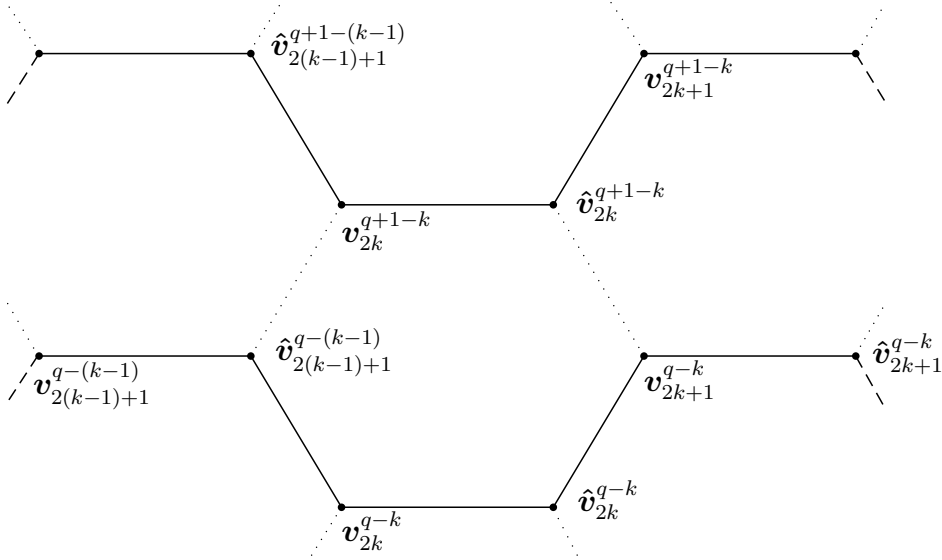


Fig. B.7: Vertices of L_q and L_{q+1} , $k \in \mathbb{Z}$.

In order to make notation simpler, we write Ψ_i^j instead of $\Psi(\mathbf{v}_i^j)$ and $\hat{\Psi}_i^j$ instead of $\Psi(\hat{\mathbf{v}}_i^j)$.

Using (B.1.21), with $i = 2(k-1) + 1$ y $j = q - k$, and (B.1.20), with $i = 2k + 1$ y $j = k - q$, we get the following equations (see Figure B.7):

$$\Psi_{2k}^{(q+1)-k} = - \left(\Psi_{2(k-1)+1}^{q-(k-1)} + s \hat{\Psi}_{2(k-1)+1}^{q-(k-1)} + \Psi_{2k}^{q-k} \right) \quad (\text{B.2.1})$$

$$\hat{\Psi}_{2k}^{(q+1)-k} = - \left(\hat{\Psi}_{2k}^{q-k} + s\Psi_{2k+1}^{q-k} + \hat{\Psi}_{2k+1}^{q-k} \right). \quad (\text{B.2.2})$$

Similarly, from (B.1.20) and (B.1.21), both with $i = 2k$ y $j = (q+1) - k$, we obtain the system

$$\hat{\Psi}_{2(k-1)+1}^{(q+1)-(k-1)} = - \left(\hat{\Psi}_{2(k-1)+1}^{q-(k-1)} + s\Psi_{2k}^{(q+1)-k} + \hat{\Psi}_{2k}^{(q+1)-k} \right) \quad (\text{B.2.3})$$

$$\Psi_{2k+1}^{(q+1)-k} = - \left(\Psi_{2k}^{(q+1)-k} + s\hat{\Psi}_{2k}^{(q+1)-k} + \Psi_{2k+1}^{q-k} \right). \quad (\text{B.2.4})$$

Replacing (B.2.1) and (B.2.2) in (B.2.3) and (B.2.4), and factorizing we obtain (B.1.31).

We analyze now the vertices in L_{q-1} (see Figure B.8). Following the same procedure as before, from (B.1.20), with $i = 2(k-1) + 1$ y $j = (q-1) - k$, and (B.1.21), with $i = 2(k-1)$ y $j = q - k$, we get

$$\begin{aligned} \hat{\Psi}_{2(k-1)}^{(q-1)-k} &= - \left(\hat{\Psi}_{2(k-1)}^{q-k} + s\Psi_{2(k-1)+1}^{(q-1)-k} + \hat{\Psi}_{2(k-1)+1}^{(q-1)-k} \right), \\ \Psi_{2(k-1)+1}^{(q-1)-k} &= - \left(\Psi_{2(k-1)}^{q-k} + s\hat{\Psi}_{2(k-1)}^{q-k} + \Psi_{2(k-1)+1}^{q-k} \right). \end{aligned}$$

By using (B.1.20), with $i = 2k$ y $j = q - k$, and (B.1.21), with $i = 2(k-1) + 1$ y $j = (q-1) - k$, we also obtain

$$\begin{aligned} \hat{\Psi}_{2(k-1)+1}^{(q-1)-k} &= - \left(\hat{\Psi}_{2(k-1)+1}^{q-k} + s\Psi_{2k}^{q-k} + \hat{\Psi}_{2k}^{q-k} \right) \\ \Psi_{2k}^{(q-1)-k} &= - \left(\Psi_{2(k-1)+1}^{(q-1)-k} + s\hat{\Psi}_{2(k-1)+1}^{(q-1)-k} + \Psi_{2k}^{q-k} \right). \end{aligned}$$

This completes the proof of Proposition B.1.

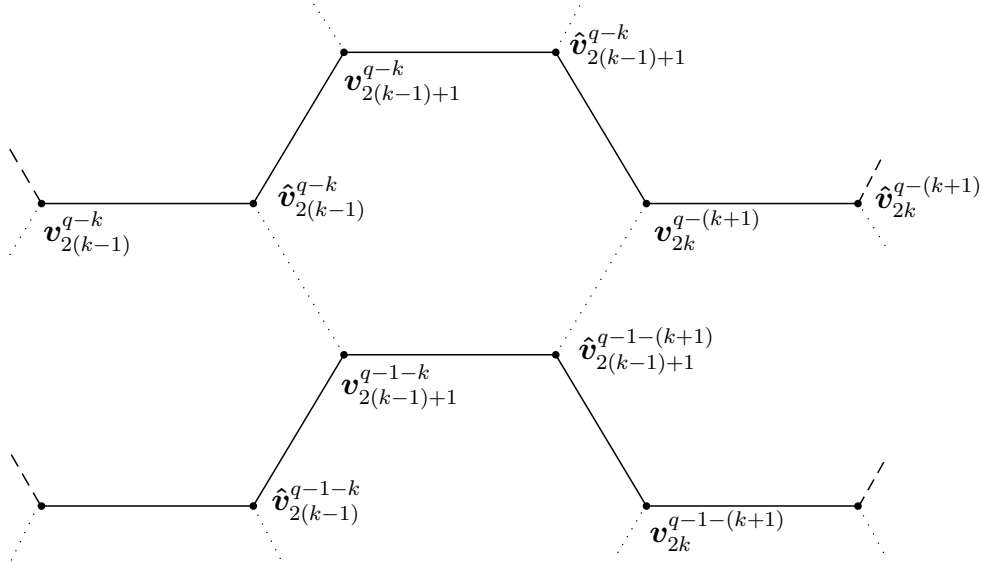


Fig. B.8: Vertices of L_q and L_{q-1} , $k \in \mathbb{Z}$.

If $\Psi \equiv 0$ at each vertex of L_q , then, from (B.1.20) and (B.1.21), we can conclude that $\Psi(\mathbf{x})$ at each vertex of L_{q+k} , for all $k \in \mathbb{Z}$. Thus, Ψ is zero on each edge of G , hence it is zero in all G .

B.2.2. Properties of the canonical basis

In this subsection, we will prove parts (i)–(vii) of Theorem B.3, one by one.

(i) We will prove that (B.1.38) is true for all $q \geq 1$ by induction over q .

For $q = 1$, we have to show that

$$\Phi_{1,0}(\hat{\mathbf{v}}_1^1 + (j-1)\mathbf{X}) = \Phi_{1,0}(\mathbf{v}_0^1 + j\mathbf{X}) = \Phi_{1,0}(\hat{\mathbf{v}}_0^1 + j\mathbf{X}) = \Phi_{1,0}(\mathbf{v}_1^1 + j\mathbf{X}) = 0, \forall j \geq 1,$$

i.e.,

$$\Phi_{1,0}(\hat{\mathbf{v}}_{2(j-1)+1}^{1-(j-1)}) = \Phi_{1,0}(\mathbf{v}_{2j}^{1-j}) = \Phi_{1,0}(\hat{\mathbf{v}}_{2j}^{1-j}) = \Phi_{1,0}(\mathbf{v}_{2j+1}^{1-j}) = 0, \quad \forall j \geq 1. \quad (\text{B.2.5})$$

Using (B.1.31) with $q = 0$ and $k = j$, we have that

$$\begin{pmatrix} \Phi_{1,0}(\hat{\mathbf{v}}_{2(j-1)+1}^{1-(j-1)}) \\ \Phi_{1,0}(\mathbf{v}_{2j}^{1-j}) \\ \Phi_{1,0}(\hat{\mathbf{v}}_{2j}^{1-j}) \\ \Phi_{1,0}(\mathbf{v}_{2j+1}^{1-j}) \end{pmatrix} = \mathcal{M} \begin{pmatrix} \Phi_{1,0}(\mathbf{v}_{2(j-1)+1}^{-(j-1)}) \\ \Phi_{1,0}(\hat{\mathbf{v}}_{2(j-1)+1}^{-(j-1)}) \\ \Phi_{1,0}(\mathbf{v}_{2j}^{-j}) \\ \Phi_{1,0}(\hat{\mathbf{v}}_{2j}^{-j}) \\ \Phi_{1,0}(\mathbf{v}_{2j+1}^{-j}) \\ \Phi_{1,0}(\hat{\mathbf{v}}_{2j+1}^{-j}) \end{pmatrix}.$$

In the right hand side we have the values of $\Phi_{1,0}$ in L_0 , that are given by (B.1.34), and we can see that they are all zero when $j > 0$. Thus, (B.2.5) is true.

Suppose now that (B.1.38) is true for q . Let us see that is also true for $q + 1$, i.e., we will show it for all $j \geq q + 1$

$$\Phi_{1,0}(\hat{\mathbf{v}}_1^{q+1} + (j-1)\mathbf{X}) = \Phi_{1,0}(\mathbf{v}_0^{q+1} + j\mathbf{X}) = \Phi_{1,0}(\hat{\mathbf{v}}_0^{q+1} + j\mathbf{X}) = \Phi_{1,0}(\mathbf{v}_1^{q+1} + j\mathbf{X}) = 0,$$

i.e.,

$$\Phi_{1,0}(\hat{\mathbf{v}}_{2(j-1)+1}^{(q+1)-(j-1)}) = \Phi_{1,0}(\mathbf{v}_{2j}^{(q+1)-j}) = \Phi_{1,0}(\hat{\mathbf{v}}_{2j}^{(q+1)-j}) = \Phi_{1,0}(\mathbf{v}_{2j+1}^{(q+1)-j}) = 0, \quad \forall j \geq q + 1.$$

Using (B.1.31) with $k = j$,

$$\begin{pmatrix} \Phi_{1,0}(\hat{\mathbf{v}}_{2(j-1)+1}^{(q+1)-(j-1)}) \\ \Phi_{1,0}(\mathbf{v}_{2j}^{(q+1)-j}) \\ \Phi_{1,0}(\hat{\mathbf{v}}_{2j}^{(q+1)-j}) \\ \Phi_{1,0}(\mathbf{v}_{2j+1}^{(q+1)-j}) \end{pmatrix} = \mathcal{M} \begin{pmatrix} \Phi_{1,0}(\mathbf{v}_{2(j-1)+1}^{q-(j-1)}) \\ \Phi_{1,0}(\hat{\mathbf{v}}_{2(j-1)+1}^{q-(j-1)}) \\ \Phi_{1,0}(\mathbf{v}_{2j}^{q-j}) \\ \Phi_{1,0}(\hat{\mathbf{v}}_{2j}^{q-j}) \\ \Phi_{1,0}(\mathbf{v}_{2j+1}^{q-j}) \\ \Phi_{1,0}(\hat{\mathbf{v}}_{2j+1}^{q-j}) \end{pmatrix}.$$

Here again the right hand side is the null vector. Indeed, from the induction hypothesis, the four central terms are zero, because $j \geq q$. The lower term is zero using the induction hypothesis for $j + 1 \geq q$. Finally, the first term is null using the induction hypothesis for $j - 1 \geq q$.

In this way, (B.1.38) is true for all $q \geq 1$.

(ii) We will prove that (B.1.39) is true for all $q \geq 1$ by induction over q .

For $q = 1$, we have to show that

$$\Phi_{1,0}(\hat{\mathbf{v}}_1^1 + (j-1)\mathbf{X}) = \Phi_{1,0}(\mathbf{v}_0^1 + j\mathbf{X}) = \Phi_{1,0}(\hat{\mathbf{v}}_0^1 + j\mathbf{X}) = \Phi_{1,0}(\mathbf{v}_1^1 + j\mathbf{X}) = 0,$$

i.e.,

$$\Phi_{1,0}(\hat{\mathbf{v}}_{2(j-1)+1}^{1-(j-1)}) = \Phi_{1,0}(\mathbf{v}_{2j}^{1-j}) = \Phi_{1,0}(\hat{\mathbf{v}}_{2j}^{1-j}) = \Phi_{1,0}(\mathbf{v}_{2j+1}^{1-j}) = 0, \quad \forall j \leq -1. \quad (\text{B.2.6})$$

Using (B.1.31) with $q = 0$ and $k = j$, we have that

$$\begin{pmatrix} \Phi_{1,0}(\hat{\mathbf{v}}_{2(j-1)+1}^{1-(j-1)}) \\ \Phi_{1,0}(\mathbf{v}_{2j}^{1-j}) \\ \Phi_{1,0}(\hat{\mathbf{v}}_{2j}^{1-j}) \\ \Phi_{1,0}(\mathbf{v}_{2j+1}^{1-j}) \end{pmatrix} = \mathcal{M} \begin{pmatrix} \Phi_{1,0}(\mathbf{v}_{2(j-1)+1}^{-(j-1)}) \\ \Phi_{1,0}(\hat{\mathbf{v}}_{2(j-1)+1}^{-(j-1)}) \\ \Phi_{1,0}(\mathbf{v}_{2j}^{-j}) \\ \Phi_{1,0}(\hat{\mathbf{v}}_{2j}^{-j}) \\ \Phi_{1,0}(\mathbf{v}_{2j+1}^{-j}) \\ \Phi_{1,0}(\hat{\mathbf{v}}_{2j+1}^{-j}) \end{pmatrix}.$$

In the right hand side we have the values of $\Phi_{1,0}$ in the profile L_0 , that are given by (B.1.34), and we can see that they are all zero when $j \leq -1$. Thus, (B.2.6) is true.

Suppose now that (B.2.6) is true for q . Let us see that it is also true for $q + 1$, i.e., we will show it for all $j \leq -q - 1$

$$\Phi_{1,0}(\hat{\mathbf{v}}_1^{q+1} + (j-1)\mathbf{X}) = \Phi_{1,0}(\mathbf{v}_0^{q+1} + j\mathbf{X}) = \Phi_{1,0}(\hat{\mathbf{v}}_0^{q+1} + j\mathbf{X}) = \Phi_{1,0}(\mathbf{v}_1^{q+1} + j\mathbf{X}) = 0,$$

i.e.,

$$\Phi_{1,0}(\hat{\mathbf{v}}_{2(j-1)+1}^{(q+1)-(j-1)}) = \Phi_{1,0}(\mathbf{v}_{2j}^{(q+1)-j}) = \Phi_{1,0}(\hat{\mathbf{v}}_{2j}^{(q+1)-j}) = \Phi_{1,0}(\mathbf{v}_{2j+1}^{(q+1)-j}) = 0, \quad \forall j \leq -q - 1.$$

Using (B.1.31) with $k = j$.

$$\begin{pmatrix} \Phi_{1,0}(\hat{\mathbf{v}}_{2(j-1)+1}^{(q+1)-(j-1)}) \\ \Phi_{1,0}(\mathbf{v}_{2j}^{(q+1)-j}) \\ \Phi_{1,0}(\hat{\mathbf{v}}_{2j}^{(q+1)-j}) \\ \Phi_{1,0}(\mathbf{v}_{2j+1}^{(q+1)-j}) \end{pmatrix} = \mathcal{M} \begin{pmatrix} \Phi_{1,0}(\mathbf{v}_{2(j-1)+1}^{q-(j-1)}) \\ \Phi_{1,0}(\hat{\mathbf{v}}_{2(j-1)+1}^{q-(j-1)}) \\ \Phi_{1,0}(\mathbf{v}_{2j}^{q-j}) \\ \Phi_{1,0}(\hat{\mathbf{v}}_{2j}^{q-j}) \\ \Phi_{1,0}(\mathbf{v}_{2j+1}^{i-j}) \\ \Phi_{1,0}(\hat{\mathbf{v}}_{2j+1}^{q-j}) \end{pmatrix}.$$

Here again the right hand side is the null vector. Indeed, from the induction hypothesis, the four central terms are zero, because $j \leq -q - 1 \leq -q$. The lower term is zero using the induction hypothesis for $j + 1 \leq -q$. Finally, the first term is null using the induction hypothesis for $j - 1 \leq -q$.

In this way, (B.1.39) is true for all $q \geq 1$ by induction over q .

(iii) We will show that (B.1.40) is true for all $q \geq 1$ by induction over q .

For $q = 1$, we have to show that

$$\begin{aligned} \Phi_{1,0}(\hat{\mathbf{v}}_1^1 + (j-1)\mathbf{X}) &= s, & \Phi_{1,0}(\mathbf{v}_0^1 + j\mathbf{X}) &= -1, \\ \Phi_{1,0}(\hat{\mathbf{v}}_0^1 + j\mathbf{X}) &= 0, & \Phi_{1,0}(\mathbf{v}_1^1 + j\mathbf{X}) &= 1, \end{aligned}$$

for $j = q - 1 = 0$, i.e.,

$$\Phi_{1,0}(\hat{\mathbf{v}}_{-1}^2) = s, \quad \Phi_{1,0}(\mathbf{v}_0^1) = -1, \quad \Phi_{1,0}(\hat{\mathbf{v}}_0^1) = 0, \quad \Phi_{1,0}(\mathbf{v}_1^1) = 1. \quad (\text{B.2.7})$$

Using (B.1.31) with $q = 0$ and $k = 0$, (B.2.7) comes from the following calculation

$$\begin{pmatrix} \Phi_{1,0}(\hat{\mathbf{v}}_{-1}^2) \\ \Phi_{1,0}(\mathbf{v}_0^1) \\ \Phi_{1,0}(\hat{\mathbf{v}}_0^1) \\ \Phi_{1,0}(\mathbf{v}_1^1) \end{pmatrix} = \mathcal{M} \begin{pmatrix} \Phi_{1,0}(\mathbf{v}_{-1}^1) \\ \Phi_{1,0}(\hat{\mathbf{v}}_{-1}^1) \\ \Phi_{1,0}(\mathbf{v}_0^0) \\ \Phi_{1,0}(\hat{\mathbf{v}}_0^0) \\ \Phi_{1,0}(\mathbf{v}_1^0) \\ \Phi_{1,0}(\hat{\mathbf{v}}_1^0) \end{pmatrix} = \mathcal{M} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} = \mathcal{M}_{\bullet,3}.$$

Suppose now that (B.1.40) is true for q . We will see that it is also true for $q + 1$, i.e., we will show that

$$\begin{aligned} \Phi_{1,0}(\hat{\mathbf{v}}_1^{q+1} + (j-1)\mathbf{X}) &= s, & \Phi_{1,0}(\mathbf{v}_0^{q+1} + j\mathbf{X}) &= -1, \\ \Phi_{1,0}(\hat{\mathbf{v}}_0^{q+1} + j\mathbf{X}) &= 0, & \Phi_{1,0}(\mathbf{v}_1^{q+1} + j\mathbf{X}) &= 1, \end{aligned}$$

for $j = (q + 1) - 1 = q$, i.e.,

$$\Phi_{1,0}(\hat{\mathbf{v}}_{2(q-1)+1}^2) = s, \quad \Phi_{1,0}(\mathbf{v}_{2q}^1) = -1, \quad \Phi_{1,0}(\hat{\mathbf{v}}_{2q}^1) = 0, \quad \Phi_{1,0}(\mathbf{v}_{2q+1}^1) = 1. \quad (\text{B.2.8})$$

Using (B.1.31) with $k = q$,

$$\begin{pmatrix} \Phi_{1,0}(\hat{\mathbf{v}}_{2(q-1)+1}^2) \\ \Phi_{1,0}(\mathbf{v}_{2q}^1) \\ \Phi_{1,0}(\hat{\mathbf{v}}_{2q}^1) \\ \Phi_{1,0}(\mathbf{v}_{2q+1}^1) \end{pmatrix} = \mathcal{M} \begin{pmatrix} \Phi_{1,0}(\mathbf{v}_{2(q-1)+1}^1) \\ \Phi_{1,0}(\hat{\mathbf{v}}_{2(q-1)+1}^1) \\ \Phi_{1,0}(\mathbf{v}_{2q}^0) \\ \Phi_{1,0}(\hat{\mathbf{v}}_{2q}^0) \\ \Phi_{1,0}(\mathbf{v}_{2q+1}^0) \\ \Phi_{1,0}(\hat{\mathbf{v}}_{2q+1}^0) \end{pmatrix}. \quad (\text{B.2.9})$$

From (B.1.38) with $j = q$ we have $\Phi_{1,0}(\hat{\mathbf{v}}_{2(q-1)+1}^1) = \Phi_{1,0}(\mathbf{v}_{2q}^0) = \Phi_{1,0}(\hat{\mathbf{v}}_{2q}^0) = \Phi_{1,0}(\mathbf{v}_{2q+1}^0) = 0$. Also, from (B.1.38) with $j = q + 1$ we have $\Phi_{1,0}(\hat{\mathbf{v}}_{2q+1}^0) = 0$. Finally, using the induction hypothesis (B.1.40) we have $\Phi_{1,0}(\mathbf{v}_{2(q-1)+1}^1) = 1$. Thus, (B.2.9) is reduced to

$$\begin{pmatrix} \Phi_{1,0}(\hat{\mathbf{v}}_{2(q-1)+1}^2) \\ \Phi_{1,0}(\mathbf{v}_{2q}^1) \\ \Phi_{1,0}(\hat{\mathbf{v}}_{2q}^1) \\ \Phi_{1,0}(\mathbf{v}_{2q+1}^1) \end{pmatrix} = \mathcal{M} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} = \mathcal{M}_{\bullet,1}.$$

Therefore, (B.2.8) is true thanks to (B.1.33).

Thus, we proved (B.1.40) for all $q \geq 1$.

(iv) We will prove that (B.1.41) is true for all $q \geq 2$ by induction over q .

For $q = 2$, we have to show that

$$\begin{aligned} \Phi_{1,0}(\hat{\mathbf{v}}_1^2 + (j-1)\mathbf{X}) &= s, & \Phi_{1,0}(\mathbf{v}_0^2 + j\mathbf{X}) &= 0, \\ \Phi_{1,0}(\hat{\mathbf{v}}_0^2 + j\mathbf{X}) &= -s, & \Phi_{1,0}(\mathbf{v}_1^2 + j\mathbf{X}) &= s^2, \end{aligned}$$

for $j = -q + 1 = -1$, i.e.,

$$\begin{aligned} \Phi_{1,0}(\hat{\mathbf{v}}_{-3}^4) &= s, & \Phi_{1,0}(\mathbf{v}_{-2}^3) &= 0, \\ \Phi_{1,0}(\hat{\mathbf{v}}_{-2}^3) &= -s, & \Phi_{1,0}(\mathbf{v}_{-1}^3) &= s^2. \end{aligned} \quad (\text{B.2.10})$$

Using (B.1.31) with $q = 1$ and $k = -1$, (B.2.10) comes from the following calculation

$$\begin{pmatrix} \Phi_{1,0}(\hat{\mathbf{v}}_{-3}^4) \\ \Phi_{1,0}(\mathbf{v}_{-2}^3) \\ \Phi_{1,0}(\hat{\mathbf{v}}_{-2}^3) \\ \Phi_{1,0}(\mathbf{v}_{-1}^3) \end{pmatrix} = \mathcal{M} \begin{pmatrix} \Phi_{1,0}(\mathbf{v}_{-3}^3) \\ \Phi_{1,0}(\hat{\mathbf{v}}_{-3}^3) \\ \Phi_{1,0}(\mathbf{v}_{-2}^2) \\ \Phi_{1,0}(\hat{\mathbf{v}}_{-2}^2) \\ \Phi_{1,0}(\mathbf{v}_{-1}^2) \\ \Phi_{1,0}(\hat{\mathbf{v}}_{-1}^2) \end{pmatrix}, \quad (\text{B.2.11})$$

From (B.2.6) with $j = -1$, $\Phi_{1,0}(\hat{\mathbf{v}}_{-3}^3) = \Phi_{1,0}(\mathbf{v}_{-2}^2) = \Phi_{1,0}(\hat{\mathbf{v}}_{-2}^2) = \Phi_{1,0}(\mathbf{v}_{-1}^2) = 0$, from (B.2.6) with $j = -2$, $\Phi_{1,0}(\mathbf{v}_{-3}^3) = 0$ and from (B.1.40) with $q = 1$, $\Phi_{1,0}(\hat{\mathbf{v}}_{-1}^2) = s$. Thus, the right hand side of (B.2.11) is equal to

$$\mathcal{M} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ s \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} s \\ 0 \\ -s \\ s^2 \end{pmatrix}.$$

Suppose now that (B.1.41) is true for q . Let us see that it is also true for $q + 1$, i.e., we will show that

$$\begin{aligned} \Phi_{1,0}(\hat{\mathbf{v}}_1^{q+1} + (j-1)\mathbf{X}) &= s, & \Phi_{1,0}(\mathbf{v}_0^{q+1} + j\mathbf{X}) &= 0, \\ \Phi_{1,0}(\hat{\mathbf{v}}_0^{q+1} + j\mathbf{X}) &= -s, & \Phi_{1,0}(\mathbf{v}_1^{q+1} + j\mathbf{X}) &= s^2, \end{aligned}$$

with $j = -(q+1) + 1 = -q$, i.e.,

$$\begin{aligned} \Phi_{1,0}(\hat{\mathbf{v}}_{-2(q+1)+1}^{2q+2}) &= s, & \Phi_{1,0}(\mathbf{v}_{-2q}^{2q+1}) &= 0, \\ \Phi_{1,0}(\hat{\mathbf{v}}_{-2q}^{2q+1}) &= -s, & \Phi_{1,0}(\mathbf{v}_{-2q+1}^{2q+1}) &= s^2. \end{aligned} \quad (\text{B.2.12})$$

Using (B.1.31) with $k = -q$,

$$\begin{pmatrix} \Phi_{1,0}(\hat{\mathbf{v}}_{-2(q+1)+1}^{2q+2}) \\ \Phi_{1,0}(\mathbf{v}_{-2q}^{2q+1}) \\ \Phi_{1,0}(\hat{\mathbf{v}}_{-2q}^{2q+1}) \\ \Phi_{1,0}(\mathbf{v}_{-2q+1}^{2q+1}) \end{pmatrix} = \mathcal{M} \begin{pmatrix} \Phi_{1,0}(\mathbf{v}_{-2(q+1)+1}^{2q+1}) \\ \Phi_{1,0}(\hat{\mathbf{v}}_{-2(q+1)+1}^{2q+1}) \\ \Phi_{1,0}(\mathbf{v}_{-2q}^{2q}) \\ \Phi_{1,0}(\hat{\mathbf{v}}_{-2q}^{2q}) \\ \Phi_{1,0}(\mathbf{v}_{-2q+1}^{2q}) \\ \Phi_{1,0}(\hat{\mathbf{v}}_{-2q+1}^{2q}) \end{pmatrix}. \quad (\text{B.2.13})$$

From (B.1.39) with $j = -q$, $\Phi_{1,0}(\hat{\mathbf{v}}_{-2(q+1)+1}^{2q+1}) = \Phi_{1,0}(\mathbf{v}_{-2q}^{2q}) = \Phi_{1,0}(\hat{\mathbf{v}}_{-2q}^{2q}) = \Phi_{1,0}(\mathbf{v}_{-2q+1}^{2q}) = 0$, from (B.1.39) with $j = -q-1$, $\Phi_{1,0}(\mathbf{v}_{-2(q+1)+1}^{2q+1}) = 0$ and from the induction hypothesis (B.1.41), $\Phi_{1,0}(\hat{\mathbf{v}}_{-2q+1}^{2q}) = s$. Thus, (B.2.13) is reduced to

$$\begin{pmatrix} \Phi_{1,0}(\hat{\mathbf{v}}_{-2(q+1)+1}^{2q+2}) \\ \Phi_{1,0}(\mathbf{v}_{-2q}^{2q+1}) \\ \Phi_{1,0}(\hat{\mathbf{v}}_{-2q}^{2q+1}) \\ \Phi_{1,0}(\mathbf{v}_{-2q+1}^{2q+1}) \end{pmatrix} = \mathcal{M} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ s \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} s \\ 0 \\ -s \\ s^2 \end{pmatrix}.$$

Therefore, (B.2.12) is true thanks to (B.1.33).

Thus, we proved (B.1.41) for all $q \geq 1$.

(v) We will prove that (B.1.42) is true for all $q \geq 2$ by induction over q .

For $q = 2$, we will show that

$$\begin{aligned} \Phi_{1,0}(\hat{\mathbf{v}}_1^2 + (j-1)\mathbf{X}) &= s(s^2 - 1), \\ \Phi_{1,0}(\mathbf{v}_0^2 + j\mathbf{X}) &= -(s^2 - 1), \\ \Phi_{1,0}(\hat{\mathbf{v}}_0^2 + j\mathbf{X}) &= -s, \\ \Phi_{1,0}(\mathbf{v}_1^2 + j\mathbf{X}) &= 2(s^2 - 1), \end{aligned}$$

for $j = q - 2 = 0$, i.e.,

$$\begin{aligned} \Phi_{1,0}(\hat{\mathbf{v}}_{-1}^3) &= s(s^2 - 1), & \Phi_{1,0}(\mathbf{v}_0^2) &= -(s^2 - 1), \\ \Phi_{1,0}(\hat{\mathbf{v}}_0^2) &= -s, & \Phi_{1,0}(\mathbf{v}_1^2) &= 2(s^2 - 1). \end{aligned} \tag{B.2.14}$$

Using (B.1.31) with $q = 1$ and $k = 0$, we have

$$\begin{pmatrix} \Phi_{1,0}(\hat{\mathbf{v}}_{-1}^3) \\ \Phi_{1,0}(\mathbf{v}_0^2) \\ \Phi_{1,0}(\hat{\mathbf{v}}_0^2) \\ \Phi_{1,0}(\mathbf{v}_1^2) \end{pmatrix} = \mathcal{M} \begin{pmatrix} \Phi_{1,0}(\mathbf{v}_{-1}^2) \\ \Phi_{1,0}(\hat{\mathbf{v}}_{-1}^2) \\ \Phi_{1,0}(\mathbf{v}_0^1) \\ \Phi_{1,0}(\hat{\mathbf{v}}_0^1) \\ \Phi_{1,0}(\mathbf{v}_1^1) \\ \Phi_{1,0}(\hat{\mathbf{v}}_1^1) \end{pmatrix}.$$

From (B.2.6) with $j = -1$ we have $\Phi_{1,0}(\mathbf{v}_{-1}^2) = 0$, from (B.2.5) with $j = 1$ we have $\Phi_{1,0}(\hat{\mathbf{v}}_1^1) = 0$,

and using (B.2.7), we obtain

$$\begin{pmatrix} \Phi_{1,0}(\hat{\mathbf{v}}_{-1}^3) \\ \Phi_{1,0}(\mathbf{v}_0^2) \\ \Phi_{1,0}(\hat{\mathbf{v}}_0^2) \\ \Phi_{1,0}(\mathbf{v}_1^2) \end{pmatrix} = \mathcal{M} \begin{pmatrix} 0 \\ s \\ -1 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}.$$

Therefore, (B.2.14) comes from the product between a matrix and a vector, considering the definition of \mathcal{M} given in (B.1.33).

Suppose now that (B.1.42) is true for q . Let us see that it is also true for $q + 1$, i.e., we will show that

$$\begin{aligned} \Phi_{1,0}(\hat{\mathbf{v}}_1^{q+1} + (j-1)\mathbf{X}) &= (2q-1)s(s^2-1), \\ \Phi_{1,0}(\mathbf{v}_0^{q+1} + j\mathbf{X}) &= -(2q-1)(s^2-1), \\ \Phi_{1,0}(\hat{\mathbf{v}}_0^{q+1} + j\mathbf{X}) &= -s, \\ \Phi_{1,0}(\mathbf{v}_1^{q+1} + j\mathbf{X}) &= 2q(s^2-1), \end{aligned}$$

for $j = (q+1) - 2 = q - 1$, i.e.,

$$\begin{aligned} \Phi_{1,0}(\hat{\mathbf{v}}_{2(q-2)+1}^3) &= (2q-1)s(s^2-1), & \Phi_{1,0}(\mathbf{v}_{2(q-1)}^2) &= -(2q-1)(s^2-1), \\ \Phi_{1,0}(\hat{\mathbf{v}}_{2(q-1)}^2) &= -s, & \Phi_{1,0}(\mathbf{v}_{2(q-1)+1}^2) &= 2q(s^2-1). \end{aligned} \tag{B.2.15}$$

Using (B.1.31) with $k = q - 1$,

$$\begin{pmatrix} \Phi_{1,0}(\hat{\mathbf{v}}_{2(q-2)+1}^3) \\ \Phi_{1,0}(\mathbf{v}_{2(q-1)}^2) \\ \Phi_{1,0}(\hat{\mathbf{v}}_{2(q-1)}^2) \\ \Phi_{1,0}(\mathbf{v}_{2(q-1)+1}^2) \end{pmatrix} = \mathcal{M} \begin{pmatrix} \Phi_{1,0}(\mathbf{v}_{2(q-2)+1}^2) \\ \Phi_{1,0}(\hat{\mathbf{v}}_{2(q-2)+1}^2) \\ \Phi_{1,0}(\mathbf{v}_{2(q-1)}^1) \\ \Phi_{1,0}(\hat{\mathbf{v}}_{2(q-1)}^1) \\ \Phi_{1,0}(\mathbf{v}_{2(q-1)+1}^1) \\ \Phi_{1,0}(\hat{\mathbf{v}}_{2(q-1)+1}^1) \end{pmatrix} \tag{B.2.16}$$

From the induction hypothesis (B.1.42), we have $\Phi_{1,0}(\mathbf{v}_{2(q-2)+1}^2) = (2q-2)(s^2-1)$. Also, using (B.1.38) with $j = q$ we have $\Phi_{1,0}(\hat{\mathbf{v}}_{2(q-1)+1}^1) = 0$. Finally, thanks to (B.1.40), (B.2.16) can be

written as

$$\begin{pmatrix} \Phi_{1,0}(\hat{\mathbf{v}}_{2(q-2)+1}^3) \\ \Phi_{1,0}(\mathbf{v}_{2(q-1)}^2) \\ \Phi_{1,0}(\hat{\mathbf{v}}_{2(q-1)}^2) \\ \Phi_{1,0}(\mathbf{v}_{2(q-1)+1}^2) \end{pmatrix} = \mathcal{M} \begin{pmatrix} (2q-2)(s^2-1) \\ s \\ -1 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}.$$

Multiplying by the matrix defined in (B.1.33), we have that (B.2.15) is true.

With this, (B.1.42) is true for all $q \geq 2$.

(vi) We will prove that (B.1.43) is true for all $q \geq 3$ by induction over q .

For $q = 3$, we have to show that

$$\begin{aligned} \Phi_{1,0}(\hat{\mathbf{v}}_1^3 + (j-1)\mathbf{X}) &= 3s(s^2+1), \\ \Phi_{1,0}(\mathbf{v}_0^3 + j\mathbf{X}) &= -s^2, \\ \Phi_{1,0}(\hat{\mathbf{v}}_0^3 + j\mathbf{X}) &= -2s(s^2+1), \\ \Phi_{1,0}(\mathbf{v}_1^3 + j\mathbf{X}) &= 2s^2(s^2+1), \end{aligned}$$

for $j = -q + 2 = -1$, i.e.,

$$\begin{aligned} \Phi_{1,0}(\hat{\mathbf{v}}_{-3}^5) &= 3s(s^2+1), \\ \Phi_{1,0}(\mathbf{v}_{-2}^4) &= -s^2, \\ \Phi_{1,0}(\hat{\mathbf{v}}_{-2}^4) &= -2s(s^2+1), \\ \Phi_{1,0}(\mathbf{v}_{-1}^4) &= 2s^2(s^2+1). \end{aligned} \tag{B.2.17}$$

Using (B.1.31) with $q = 2$ and $k = -1$, we obtain

$$\begin{pmatrix} \Phi_{1,0}(\hat{\mathbf{v}}_{-3}^5) \\ \Phi_{1,0}(\mathbf{v}_{-2}^4) \\ \Phi_{1,0}(\hat{\mathbf{v}}_{-2}^4) \\ \Phi_{1,0}(\mathbf{v}_{-1}^4) \end{pmatrix} = \mathcal{M} \begin{pmatrix} \Phi_{1,0}(\mathbf{v}_{-3}^4) \\ \Phi_{1,0}(\hat{\mathbf{v}}_{-3}^4) \\ \Phi_{1,0}(\mathbf{v}_{-2}^3) \\ \Phi_{1,0}(\hat{\mathbf{v}}_{-2}^3) \\ \Phi_{1,0}(\mathbf{v}_{-1}^3) \\ \Phi_{1,0}(\hat{\mathbf{v}}_{-1}^3) \end{pmatrix}.$$

Using (B.1.39) with $q = 2$ and $j = -2$ to obtain $\Phi_{1,0}(\mathbf{v}_{-3}^4) = 0$, the equality (B.2.10) and

(B.2.14) to obtain $\Phi_{1,0}(\hat{\mathbf{v}}_{-1}^3) = s(s^2 - 1)$, the expression above is equivalent to

$$\begin{pmatrix} \Phi_{1,0}(\hat{\mathbf{v}}_{-3}^5) \\ \Phi_{1,0}(\mathbf{v}_{-2}^4) \\ \Phi_{1,0}(\hat{\mathbf{v}}_{-2}^4) \\ \Phi_{1,0}(\mathbf{v}_{-1}^4) \end{pmatrix} = \mathcal{M} \begin{pmatrix} 0 \\ s \\ 0 \\ -s \\ s^2 \\ s(s^2 - 1) \end{pmatrix}.$$

Therefore, (B.2.17) comes from the product between a matrix and a vector, considering the definition of \mathcal{M} given in (B.1.33).

Suppose now that (B.1.43) is true for q . Let us see that it is also true for $q + 1$, i.e., we will show that

$$\begin{aligned} \Phi_{1,0}(\hat{\mathbf{v}}_1^{q+1} + (j-1)\mathbf{X}) &= (2q-1)s(s^2+1), \\ \Phi_{1,0}(\mathbf{v}_0^{q+1} + j\mathbf{X}) &= -s^2, \\ \Phi_{1,0}(\hat{\mathbf{v}}_0^{q+1} + j\mathbf{X}) &= -(2q-2)s(s^2+1), \\ \Phi_{1,0}(\mathbf{v}_1^{q+1} + j\mathbf{X}) &= (2q-2)s^2(s^2+1), \end{aligned}$$

for $j = -(q+1) + 2 = -(q-1)$, i.e.,

$$\begin{aligned} \Phi_{1,0}(\hat{\mathbf{v}}_{-2q+1}^{2q+1}) &= (2q-1)s(s^2-1), & \Phi_{1,0}(\mathbf{v}_{-2(q-1)}^{2q}) &= -s^2, \\ \Phi_{1,0}(\hat{\mathbf{v}}_{-2(q-1)}^{2q}) &= -(2q-2)s(s^2-1), & \Phi_{1,0}(\mathbf{v}_{-2(q-1)+1}^{2q}) &= (2q-2)s^2(s^2-1). \end{aligned} \tag{B.2.18}$$

Using (B.1.31) with $k = -(q-1)$,

$$\begin{pmatrix} \Phi_{1,0}(\hat{\mathbf{v}}_{-2q+1}^{2q+1}) \\ \Phi_{1,0}(\mathbf{v}_{-2(q-1)}^{2q}) \\ \Phi_{1,0}(\hat{\mathbf{v}}_{-2(q-1)}^{2q}) \\ \Phi_{1,0}(\mathbf{v}_{-2(q-1)+1}^{2q}) \end{pmatrix} = \mathcal{M} \begin{pmatrix} \Phi_{1,0}(\mathbf{v}_{-2q+1}^{2q}) \\ \Phi_{1,0}(\hat{\mathbf{v}}_{-2q+1}^{2q}) \\ \Phi_{1,0}(\mathbf{v}_{-2(q-1)}^{2q-1}) \\ \Phi_{1,0}(\hat{\mathbf{v}}_{-2(q-1)}^{2q-1}) \\ \Phi_{1,0}(\mathbf{v}_{-2(q-1)+1}^{2q-1}) \\ \Phi_{1,0}(\hat{\mathbf{v}}_{-2(q-1)+1}^{2q-1}) \end{pmatrix} \tag{B.2.19}$$

From (B.1.38) with $j = -q$, $\Phi_{1,0}(\mathbf{v}_{-2q+1}^{2q}) = 0$. From the induction hypothesis (B.1.43), we have

$\Phi_{1,0}(\hat{\mathbf{v}}_{-2(q-1)+1}^{2q-1}) = (2q-3)s(s^2-1)$. Finally, thanks to (B.1.41), (B.2.16) can be written as

$$\begin{pmatrix} \Phi_{1,0}(\hat{\mathbf{v}}_{-2q+1}^{2q+1}) \\ \Phi_{1,0}(\mathbf{v}_{-2(q-1)}^{2q}) \\ \Phi_{1,0}(\hat{\mathbf{v}}_{-2(q-1)}^{2q}) \\ \Phi_{1,0}(\mathbf{v}_{-2(q-1)+1}^{2q}) \end{pmatrix} = \mathcal{M} \begin{pmatrix} 0 \\ s \\ 0 \\ -s \\ s^2 \\ (2q-3)s(s^2-1) \end{pmatrix},$$

Multiplying by the matrix defined in (B.1.33), we have that (B.2.18) is true.

With this, (B.1.43) is true for all $q \geq 2$.

(vii) Using (B.1.38), (B.1.39) and (B.1.40), we have that the property is true for all the vertices of the graphene with y-coordinate $y = \sqrt{3}$.

The total symmetry is obtained considering that the line composed by all the vertices of y-coordinate $y = \sqrt{3}/2$ and $y = \sqrt{3}$ is a basis of graphene, symmetric to L_0 , but with component $\Phi_{1,0}(0, \sqrt{3}) = -1$. This new basis generates the same solutions found in (B.1.38)–(B.1.43), but with opposite signs. Thus, we obtain the desired symmetry.

B.3. Basis with support in the semi-plane

We seek for solutions $\Psi \in L^2(G)$ such that $\mathcal{H}\Psi \equiv \lambda\Psi$ with compact support. In this section we use A_i^q, B_i^q, C_i^q and $D_i^q, i \in \mathbb{Z}$ to denote the value of $\Psi \in L^2(G)$ such that $\mathcal{H}\Psi \equiv \lambda\Psi$, at the four vertices which generate the profile L_q , i.e.,

$$A_i^q = \Psi(\mathbf{v}_{2i}^{q-i}), \quad B_i^q = \Psi(\hat{\mathbf{v}}_{2i}^{q-i}), \quad C_i^q = \Psi(\mathbf{v}_{2i+1}^{q-i}), \quad D_i^q = \Psi(\hat{\mathbf{v}}_{2i+1}^{q-i}). \quad (\text{B.3.1})$$

See definition of the profile L_q in (B.1.26) and Figure B.9 for more details.

From (B.1.31) and (B.1.32), we can write all the values of Ψ at the vertices of L_{q+1} and L_{q-1} in terms of its values at the vertices of L_q as follows. For all $i \in \mathbb{Z}$,

$$A_i^{q+1} = -C_{i-1}^q - sD_{i-1}^q - A_i^q \quad (\text{B.3.2})$$

$$B_i^{q+1} = -B_i^q - sC_i^q - D_i^q \quad (\text{B.3.3})$$

$$C_i^{q+1} = C_{i-1}^q + sD_{i-1}^q + A_i^q + sB_i^q + (s^2 - 1)C_i^q + sD_i^q \quad (\text{B.3.4})$$

$$D_i^{q+1} = sC_i^q + (s^2 - 1)D_i^q + sA_{i+1}^q + B_{i+1}^q + sC_{i+1}^q + D_{i+1}^q \quad (\text{B.3.5})$$

$$A_i^{q-1} = A_{i-1}^q + sB_{i-1}^q + C_{i-1}^q + sD_{i-1}^q + (s^2 - 1)A_i^q + sB_i^q \quad (\text{B.3.6})$$

$$B_i^{q-1} = sA_i^q + (s^2 - 1)B_i^q + sC_i^q + D_i^q + sA_{i+1}^q + B_{i+1}^q \quad (\text{B.3.7})$$

$$C_i^{q-1} = -A_i^q - sB_i^q - C_i^q \quad (\text{B.3.8})$$

$$D_i^{q-1} = -D_i^q - sA_{i+1}^q - B_{i+1}^q \quad (\text{B.3.9})$$

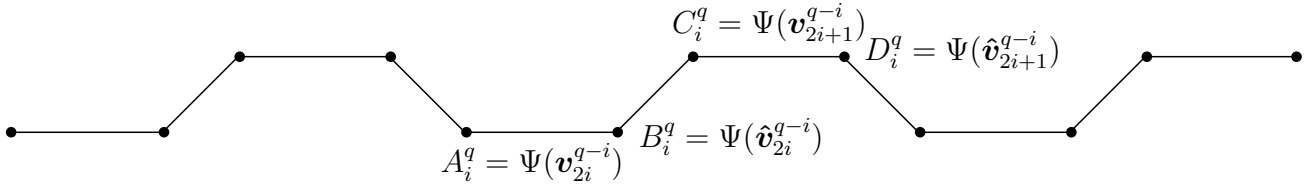


Fig. B.9: Definition of the constants A_i^q, B_i^q, C_i^q y D_i^q .

If solutions $\Psi \in L^2(G)$ such that $\mathcal{H}\Psi \equiv \lambda\Psi$ with compact support exist, then there is an $i_0 \in \mathbb{Z}$ such that

$$A_i^q = B_i^q = C_i^q = D_i^q = 0, \quad \forall i < i_0, \forall q \in \mathbb{Z}. \quad (\text{B.3.10})$$

Without loss of generality, we can assume $i_0 = 0$. In other words, we study the case in which the function Ψ is zero in all the gray region of FigureB.10. In addition, we write “ $-n$, with $n \in \mathbb{N}$ ” instead of “ $i < 0$, with $i \in \mathbb{Z}$ ”.

In order to prove the results in this section and determine the structure of all functions Ψ satisfying (B.3.10) (with $i_0 = 0$), the polynomials P_n , recursively defined as follows, play a crucial role.

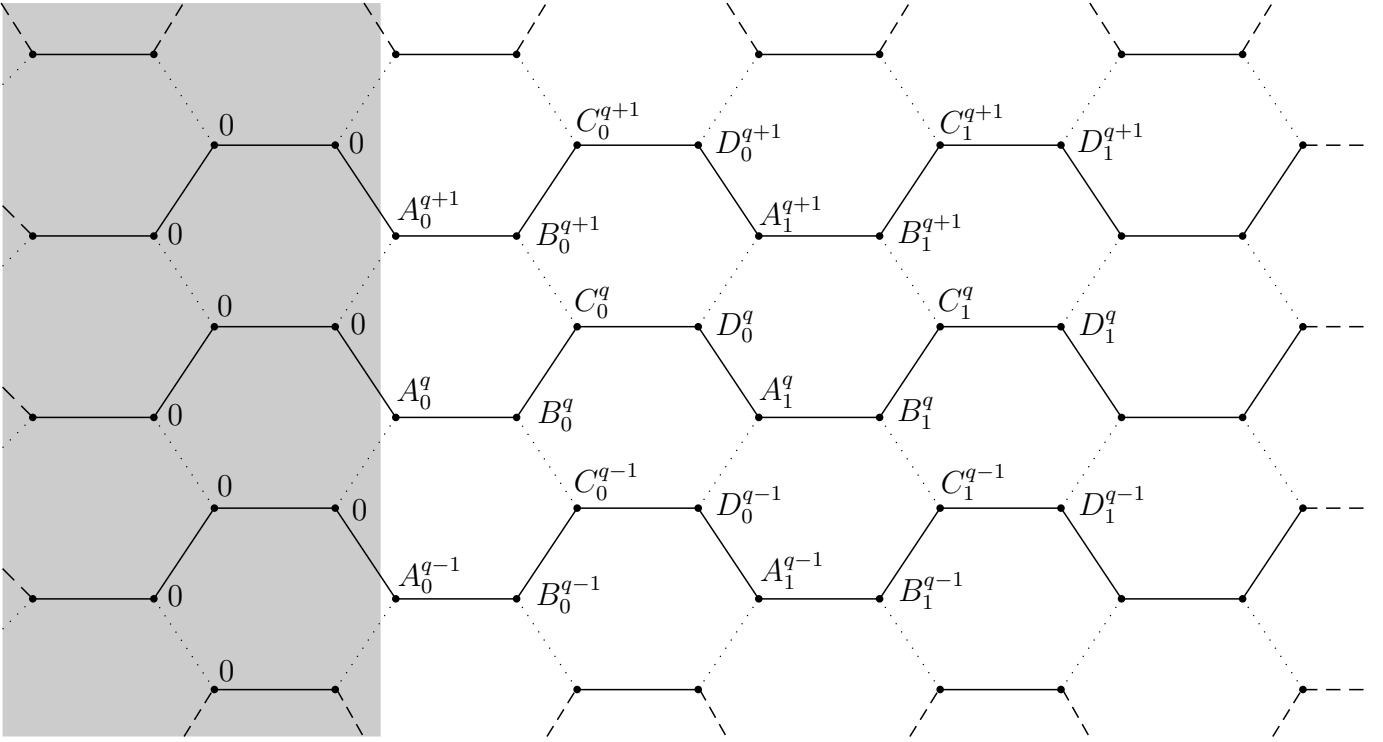


Fig. B.10: Values non-zero of A_i^j , B_i^j , C_i^j y D_i^j , $i, j \in \mathbb{Z}, i \geq 0$.

The family of polynomials $(P_n)_{n \in \mathbb{N}}$ is defined by the recursive relation:

$$P_0(s) = -s \tag{B.3.11}$$

$$P_n(s) = P_{n-1}(s) + s \sum_{k=0}^{n-1} P_k(s) P_{n-1-k}(s) \text{ for } n \geq 1. \tag{B.3.12}$$

For $n = 1$, we notice that

$$P_1(s) = P_0 + sP_0^2 = -s + s^3 = s(s^2 - 1) = (s^2 - 1)s. \tag{B.3.13}$$

The degree of each polynomial P_n , $n \in \mathbb{N}$, is $2n + 1$.

By using these polynomials, we now present the main result of this section.

Theorem B.4. *For $\Psi \in L^2(G)$ such that $\mathcal{H}\Psi \equiv \lambda\Psi$, let A_i^q , B_i^q , C_i^q , D_i^q be the values of Ψ at the vertices that generate L_q defined in (B.3.1). The following propositions are equivalent:*

(a) *For each $q \in \mathbb{Z}$ it holds that*

$$A_{-n}^q = B_{-n}^q = C_{-n}^q = D_{-n}^q = 0 \quad \forall n \in \mathbb{N}. \tag{B.3.14}$$

(b) There exists $q_0 \in \mathbb{Z}$ such that $A_{-n}^{q_0} = B_{-n}^{q_0} = C_{-n}^{q_0} = D_{-n}^{q_0} = 0$ for all $n \in \mathbb{N}$. Moreover,

$$B_n^q = \sum_{k=0}^n A_{n-k}^q P_k(s) \quad \forall n \in \mathbb{N}, \forall q \in \mathbb{Z} \quad (\text{B.3.15})$$

and

$$D_n^q = \sum_{k=0}^n C_{n-k}^q P_k(s) \quad \forall n \in \mathbb{N}, \forall q \in \mathbb{Z}. \quad (\text{B.3.16})$$

(c) There exists $q_0 \in \mathbb{Z}$ such that $A_{-n}^{q_0} = B_{-n}^{q_0} = C_{-n}^{q_0} = D_{-n}^{q_0} = 0$ for all $n \in \mathbb{N}$. Moreover,

$$B_n^{q_0} = \sum_{k=0}^n A_{n-k}^{q_0} P_k(s) \quad \forall n \in \mathbb{N} \quad (\text{B.3.17})$$

and

$$D_n^{q_0} = \sum_{k=0}^n C_{n-k}^{q_0} P_k(s) \quad \forall n \in \mathbb{N}. \quad (\text{B.3.18})$$

(d) For each $q \in \mathbb{Z}$ it holds

$$A_{-n}^q = B_{-n}^q = C_{-n}^q = D_{-n}^q = 0 \quad \forall n \in \mathbb{N}, i < 0, \quad (\text{B.3.19})$$

$$B_n^q = \sum_{k=0}^n A_{n-k}^q P_k(s) \quad \forall n \in \mathbb{N} \quad (\text{B.3.20})$$

and

$$D_n^q = \sum_{k=0}^n C_{n-k}^q P_k(s) \quad \forall n \in \mathbb{N}. \quad (\text{B.3.21})$$

In order to prove this result, we will show first several previous results which combine the definition of the polynomials P_n with the conditions (B.1.20) and (B.1.21). Let us begin with an algebraic lemma.

Lemma B.5. *If there exists $n_0 \in \mathbb{N}$ such that*

$$B_n^q = \sum_{k=0}^n A_{n-k}^q P_k(s) \quad \forall n \in \{0, \dots, n_0\} \quad (\text{B.3.22})$$

and

$$D_n^q = \sum_{k=0}^n C_{n-k}^q P_k(s) \quad \forall n \in \{0, \dots, n_0\}, \quad (\text{B.3.23})$$

where P_n are the polynomials given in (B.3.11), then

$$\sum_{k=0}^n (A_{n-k}^q + sB_{n-k}^q) P_k(s) = sA_{n+1}^q + B_{n+1}^q \quad \forall n \in \{0, \dots, n_0 - 1\}, \quad (\text{B.3.24})$$

$$\sum_{k=0}^n (C_{n-k}^q + sD_{n-k}^q)P_k(s) = sC_{n+1}^q + D_{n+1}^q \quad \forall n \in \{0, \dots, n_0 - 1\} \quad (\text{B.3.25})$$

and

$$s \sum_{k=0}^{n_0} B_{n_0-k}^q P_k(s) = \sum_{k=1}^{n_0+1} A_{n_0+1-k}^q P_k(s) - B_{n_0}^q, \quad (\text{B.3.26})$$

$$s \sum_{k=0}^{n_0} D_{n_0-k}^q P_k(s) = \sum_{k=1}^{n_0+1} C_{n_0+1-k}^q P_k(s) - D_{n_0}^q. \quad (\text{B.3.27})$$

DEMOSTRACIÓN. To show (B.3.24) we use the hypothesis (B.3.22) to deduce that, for each $n \in \{0, \dots, n_0\}$, we have

$$\begin{aligned} \sum_{k=0}^n (A_{n-k}^q + sB_{n-k}^q)P_k &= \sum_{k=0}^n A_{n-k}^q P_k + s \sum_{k=0}^n \sum_{r=0}^{n-k} A_{n-(k+r)}^q P_r P_k \\ &= \sum_{k=0}^n A_{n-k}^q P_k + s \sum_{t=0}^n \sum_{j=0}^t A_{n-t}^q P_j P_{t-j} \\ &= \sum_{k=0}^n A_{n-k}^q \left(P_k + s \sum_{j=0}^k P_j P_{k-j} \right). \end{aligned}$$

Now, by using the recursive relation (B.3.12) we obtain

$$\begin{aligned} \sum_{k=0}^n (A_{n-k}^q + sB_{n-k}^q)P_k &= \sum_{k=0}^n A_{n-k}^q P_{k+1} \\ &= \sum_{k=1}^{n+1} A_{n+1-k}^q P_k. \end{aligned} \quad (\text{B.3.28})$$

This directly implies (B.3.27), using the hypothesis (B.3.22) on the sum of left-hand side.

To obtain (B.3.24), we restrict the range of the variable n to the set $\{0, \dots, n_0 - 1\}$, and thus we can use the hypothesis (B.3.22) in the sum of the right-hand side in (B.3.28), hence

$$\sum_{k=0}^n (A_{n-k}^q + sB_{n-k}^q)P_k = -A_{n+1}^q P_0 + B_{n+1}^q.$$

The equality (B.3.24) is consequence of the last expression and the definition (B.3.11).

Finally, interchanging the name of the variables, the equalities (B.3.25) and (B.3.27) are the same as the ones that we have just shown. \square

Lemma B.6. *If*

$$A_{-n}^q = B_{-n}^q = C_{-n}^q = D_{-n}^q = 0, \quad \forall n \in \mathbb{N}, \quad \forall q \in \mathbb{Z}, \quad (\text{B.3.29})$$

then

$$B_0^q = A_0^q P_0, \quad \forall q \in \mathbb{Z}, \quad (\text{B.3.30})$$

$$D_0^q = C_0^q P_0, \quad \forall q \in \mathbb{Z}, \quad (\text{B.3.31})$$

$$B_1^q = A_1^q P_0 + A_0^q P_1, \quad \forall q \in \mathbb{Z}, \quad (\text{B.3.32})$$

$$D_1^q = C_1^q P_0 + C_0^q P_1, \quad \forall q \in \mathbb{Z}. \quad (\text{B.3.33})$$

DEMOSTRACIÓN. Using the identity (B.3.9) for $i = -1$, and the hypothesis (B.3.29) we obtain

$$0 = 0 - sA_0^q - B_0^q,$$

which implies (B.3.30), since $P_0 = -s$.

To show (B.3.31), we begin by considering the identity (B.3.5) with $i = -1$, and obtain

$$0 = 0 + 0 + sA_0^q + B_0^q + sC_0^q + D_0^q.$$

Thus, the property (B.3.31) follows from (B.3.30) and the fact that $P_0 = -s$.

Since equality (B.3.30) holds for all $q \in \mathbb{Z}$, we can write

$$B_0^{q-1} = A_0^{q-1} P_0. \quad (\text{B.3.34})$$

Hence, by using the identities (B.3.7) and (B.3.6), for $i = 0$, in (B.3.34), we obtain that

$$sA_0^q + (s^2 - 1)B_0^q + 0 + sA_1^q + B_1^q = -s(0 + 0 + 0 + 0 + (s^2 - 1)A_0^q + sB_0^q), \quad (\text{B.3.35})$$

which implies that

$$sA_1^q + B_1^q = -s(A_0^q + sB_0^q) - (s^2 - 1) \cdot 0. \quad (\text{B.3.36})$$

Thus (B.3.32), considering that $P_1(s) = (s^2 - 1)s$ (see (B.3.13)).

Finally, to obtain (B.3.33), we use (B.3.31) for $q + 1$, i.e.,

$$D_0^{q+1} = C_0^{q+1} P_0. \quad (\text{B.3.37})$$

Hence, by using the identities (B.3.5) and (B.3.4), for $i = 0$, in (B.3.37), we get

$$sC_0^q + (s^2 - 1)D_0^q + sA_1^q + B_1^q + sC_1^q + D_1^q = -s(0 + 0 + A_0^q + sB_0^q + (s^2 - 1)C_0^q + sD_0^q).$$

Using (B.3.36), previous equality becomes

$$sC_0^q + (s^2 - 1)D_0^q + sC_1^q + D_1^q = -s((s^2 - 1)C_0^q + sD_0^q).$$

Since this equation is analogue to the identity (B.3.35), the proofs follows similarly to the proof of the previous case. \square

We will now see how can be generalized these results. Let us show the following lemma.

Lemma B.7. *Let us assume that*

$$A_{-n}^q = B_{-n}^q = C_{-n}^q = D_{-n}^q = 0, \quad \forall n \in \mathbb{N}, \forall q \in \mathbb{Z}. \quad (\text{B.3.38})$$

If there exists $n_0 \in \mathbb{N}$ such that

$$B_n^q = \sum_{k=0}^n A_{n-k}^q P_k(s) \quad \forall q \in \mathbb{Z}, \forall n \in \{0, \dots, n_0\} \quad (\text{B.3.39})$$

and

$$D_n^q = \sum_{k=0}^n C_{n-k}^q P_k(s) \quad \forall q \in \mathbb{Z}, \forall n \in \{0, \dots, n_0\}, \quad (\text{B.3.40})$$

then

$$B_{n_0+1}^q = \sum_{k=0}^{n_0+1} A_{n_0+1-k}^q P_k(s) \quad (\text{B.3.41})$$

and

$$D_{n_0+1}^q = \sum_{k=0}^{n_0+1} C_{n_0+1-k}^q P_k(s). \quad (\text{B.3.42})$$

DEMOSTRACIÓN. To show (B.3.41) we first write the hypothesis (B.3.39) for $q - 1$ y n_0 , i.e.,

$$B_{n_0}^{q-1} = \sum_{k=0}^{n_0} A_{n_0-k}^{q-1} P_k(s).$$

Using the identities (B.3.7) with $i = n_0$ and (B.3.6) with $i = n_0 - k$, we get

$$\begin{aligned} sA_{n_0}^q + (s^2 - 1)B_{n_0}^q + sC_{n_0}^q + D_{n_0}^q + sA_{n_0+1}^q + B_{n_0+1}^q = \\ \sum_{k=0}^{n_0} (A_{n_0-k-1}^q + sB_{n_0-k-1}^q + C_{n_0-k-1}^q + sD_{n_0-k-1}^q + (s^2 - 1)A_{n_0-k}^q + sB_{n_0-k}^q) P_k. \end{aligned} \quad (\text{B.3.43})$$

Considering the hypothesis (B.3.38), these sums can be rewritten as:

$$\begin{aligned} sA_{n_0}^q + (s^2 - 1)B_{n_0}^q + sC_{n_0}^q + D_{n_0}^q + sA_{n_0+1}^q + B_{n_0+1}^q = \\ \sum_{k=0}^{n_0-1} (A_{n_0-k-1}^q + sB_{n_0-k-1}^q + C_{n_0-k-1}^q + sD_{n_0-k-1}^q) P_k + (s^2 - 1) \sum_{k=0}^{n_0} A_{n_0-k}^q P_k + s \sum_{k=0}^{n_0} B_{n_0-k}^q P_k. \end{aligned} \quad (\text{B.3.44})$$

Here, thanks to hypotheses (B.3.40)–(B.3.39), we can use Lemma B.5, in the first and third sums of the right-hand side. The second sum can be obtained directly from hypothesis (B.3.39). Thus, we get

$$\begin{aligned} sA_{n_0}^q + (s^2 - 1)B_{n_0}^q + sC_{n_0}^q + D_{n_0}^q + sA_{n_0+1}^q + B_{n_0+1}^q = \\ B_{n_0}^q + sA_{n_0}^q + D_{n_0}^q + sC_{n_0}^q + (s^2 - 1)B_{n_0}^q + \sum_{k=1}^{n_0+1} A_{n_0+1-k}^q P_k(s) - B_{n_0}. \end{aligned} \quad (\text{B.3.45})$$

Simplifying,

$$sA_{n_0+1}^q + B_{n_0+1}^q = \sum_{k=1}^{n_0+1} A_{n_0+1-k}^q P_k(s). \quad (\text{B.3.46})$$

This, together with definition (B.3.11), implies.

To show (B.3.42), we write the hypothesis (B.3.40) for $q + 1$ in the case $n = n_0$, i.e.,

$$D_{n_0}^{q+1} = \sum_{k=0}^{n_0} C_{n_0-k}^{q+1} P_k(s).$$

Replacing the identities (B.3.5), with $i = n_0$, and (B.3.4) with $i = n_0 - k$, the above expression becomes

$$\begin{aligned} sC_{n_0}^q + (s^2 - 1)D_{n_0}^q + sA_{n_0+1}^q + B_{n_0+1}^q + sC_{n_0+1}^q + D_{n_0+1}^q = \\ \sum_{k=0}^{n_0} (C_{n_0-k-1}^q + sD_{n_0-k-1}^q + A_{n_0-k}^q + sB_{n_0-k}^q + (s^2 - 1)C_{n_0-k}^q + sD_{n_0-k}^q) P_k. \end{aligned} \quad (\text{B.3.47})$$

Considering the hypothesis (B.3.38), these sums can be rewritten as follows:

$$\begin{aligned} sC_{n_0}^q + (s^2 - 1)D_{n_0}^q + sA_{n_0+1}^q + B_{n_0+1}^q + sC_{n_0+1}^q + D_{n_0+1}^q = \\ \sum_{k=0}^{n_0-1} (C_{n_0-k-1}^q + sD_{n_0-k-1}^q) P_k + \sum_{k=0}^{n_0} (A_{n_0-k}^q + sB_{n_0-k}^q) P_k + (s^2 - 1) \sum_{k=0}^{n_0} C_{n_0-k}^q P_k + s \sum_{k=0}^{n_0} D_{n_0-k}^q P_k. \end{aligned} \quad (\text{B.3.48})$$

For the first and last sums on the right-hand side, we use (B.3.25) from Lemma B.5 thanks to hypothesis (B.3.40). For the second sum, we also use the same lemma, since the identity (B.3.41) allows us to use the equality (B.3.24) up to $n = n_0$. Finally, the third sum can be obtained directly from hypothesis (B.3.40). Hence, we get

$$\begin{aligned} sC_{n_0}^q + (s^2 - 1)D_{n_0}^q + sA_{n_0+1}^q + B_{n_0+1}^q + sC_{n_0+1}^q + D_{n_0+1}^q = \\ sC_{n_0}^q + D_{n_0}^q + sA_{n_0+1}^q + B_{n_0+1}^q + (s^2 - 1)D_{n_0}^q + \sum_{k=1}^{n_0+1} C_{n_0+1-k}^q P_k - D_{n_0}^q. \end{aligned} \quad (\text{B.3.49})$$

Simplifying,

$$sC_{n_0+1}^q + D_{n_0+1}^q = \sum_{k=1}^{n_0+1} C_{n_0+1-k}^q P_k. \quad (\text{B.3.50})$$

Thus, (B.3.42) is consequence of definition (B.3.11).

□

Lemma B.8. *Suppose that there exists $q_0 \in \mathbb{Z}$ such that the following properties are satisfied in the profile L_{q_0} :*

$$A_i^{q_0} = B_i^{q_0} = C_i^{q_0} = D_i^{q_0} = 0 \quad \forall i \in \mathbb{Z}, i < 0, \quad (\text{B.3.51})$$

$$B_n^{q_0} = \sum_{k=0}^n A_{n-k}^{q_0} P_k(s) \quad \forall n \in \mathbb{N} \quad (\text{B.3.52})$$

and

$$D_n^{q_0} = \sum_{k=0}^n C_{n-k}^{q_0} P_k(s) \quad \forall n \in \mathbb{N}, \quad (\text{B.3.53})$$

where $P_k(s)$, $k \in \{0, \dots, n\}$ are the polynomials defined in (B.3.11)–(B.3.12). Then, in the profiles L_{q_0+1} y L_{q_0-1} the following relations are satisfied

$$A_i^{q_0+1} = B_i^{q_0+1} = C_i^{q_0+1} = D_i^{q_0+1} = 0 \quad \forall i \in \mathbb{Z}, i < 0, \quad (\text{B.3.54})$$

$$B_n^{q_0+1} = \sum_{k=0}^n A_{n-k}^{q_0+1} P_k(s) \quad \forall n \in \mathbb{N}, \quad (\text{B.3.55})$$

$$D_n^{q_0+1} = \sum_{k=0}^n C_{n-k}^{q_0+1} P_k(s) \quad \forall n \in \mathbb{N}, \quad (\text{B.3.56})$$

$$A_{-n}^{q_0-1} = B_{-n}^{q_0-1} = C_{-n}^{q_0-1} = D_{-n}^{q_0-1} = 0 \quad \forall n \in \mathbb{N}, \quad (\text{B.3.57})$$

$$B_n^{q_0-1} = \sum_{k=0}^n A_{n-k}^{q_0-1} P_k(s) \quad \forall n \in \mathbb{N}, \quad (\text{B.3.58})$$

$$D_n^{q_0-1} = \sum_{k=0}^n C_{n-k}^{q_0-1} P_k(s) \quad \forall n \in \mathbb{N}. \quad (\text{B.3.59})$$

DEMOSTRACIÓN. We begin by showing the properties in the profile L_{q_0+1} .

To prove (B.3.54) we consider the identities (B.3.2)–(B.3.5) with $i < 0$ and $q = q_0$. Using the hypothesis (B.3.51), we obtain (B.3.54) for all i , except for the case

$$D_{-1}^{q_0+1} = sA_0^{q_0} + B_0^{q_0} + sC_0^{q_0} + D_0^{q_0},$$

which is also zero thanks to hypotheses (B.3.52)–(B.3.53) for $n = 0$ and the definition (B.3.11).

To show (B.3.55), we calculate the sum of the right-hand side. For each $k \in \{0, \dots, n\}$, we consider the identity (B.3.2), with $i = n - k$ and $q = q_0$. Hence, we obtain that

$$\sum_{k=0}^n A_{n-k}^{q_0+1} P_k(s) = - \sum_{k=0}^n (C_{n-k-1}^{q_0} + sD_{n-k-1}^{q_0} + A_{n-k}^{q_0}) P_k(s).$$

Using hypothesis (B.3.51), we can write

$$\sum_{k=0}^n A_{n-k}^{q_0+1} P_k(s) = - \sum_{k=0}^{n-1} (C_{n-k-1}^{q_0} + sD_{n-k-1}^{q_0}) P_k(s) - \sum_{k=0}^n A_{n-k}^{q_0} P_k(s).$$

Since hypothesis (B.3.53) holds for all n , we can use the identity (B.3.25) from Lemma B.5 in the first sum of the right-hand side. The second sum can be directly calculated by using hypothesis (B.3.52). Then,

$$\sum_{k=0}^n A_{n-k}^{q_0+1} P_k(s) = -(sC_n^{q_0} + D_n^{q_0} + B_n^{q_0}).$$

Thus, equality (B.3.55) is consequence of previous identity and equality (B.3.3) with the respective indices.

Similarly, in order to show (B.3.56), we first calculate the sum on the right-hand side. For each $k \in \{0, \dots, n\}$, we use identity (B.3.4), with $i = n - k$ and $q = q_0$. Hence, we obtain

$$\sum_{k=0}^n C_{n-k}^{q_0+1} P_k = \sum_{k=0}^n (C_{n-k-1}^{q_0} + sD_{n-k-1}^{q_0} + A_{n-k}^{q_0} + sB_{n-k}^{q_0} + (s^2 - 1)C_{n-k}^{q_0} + sD_{n-k}^{q_0}) P_k,$$

which, thanks to hypothesis (B.3.51), can be rewritten as

$$\begin{aligned} \sum_{k=0}^n C_{n-k}^{q_0+1} P_k &= \sum_{k=0}^{n-1} (C_{n-k-1}^{q_0} + sD_{n-k-1}^{q_0}) P_k + \sum_{k=0}^n (A_{n-k}^{q_0} + sB_{n-k}^{q_0}) P_k \\ &\quad + (s^2 - 1) \sum_{k=0}^n C_{n-k}^{q_0} P_k + s \sum_{k=0}^n D_{n-k}^{q_0} P_k. \end{aligned} \quad (\text{B.3.60})$$

Since hypotheses (B.3.52)–(B.3.53) hold for all n , we can use the identities (B.3.24), (B.3.25) and (B.3.27) from Lemma B.5 in order to calculate the first, second and fourth sums of the right-hand side. Thus, we get

$$\sum_{k=0}^n C_{n-k}^{q_0+1} P_k = sC_n^{q_0} + D_n^{q_0} + sA_{n+1}^{q_0} + B_{n+1}^{q_0} + (s^2 - 1) \sum_{k=0}^n C_{n-k}^{q_0} P_k + \sum_{k=1}^{n+1} C_{n+1-k}^{q_0} P_k - D_n^{q_0}.$$

Simplifying and using hypothesis (B.3.53), we calculate the two last sums of the right hand side and obtain

$$\sum_{k=0}^n C_{n-k}^{q_0+1} P_k = sC_n^{q_0} + sA_{n+1}^{q_0} + B_{n+1}^{q_0} + (s^2 - 1)D_n^{q_0} + D_{n+1}^{q_0} - C_{n+1}^{q_0} P_0(s).$$

Since $P_0(s) = -s$, (see (B.3.11)), reordering terms we get

$$\sum_{k=0}^n C_{n-k}^{q_0+1} P_k = sC_n^{q_0} + (s^2 - 1)D_n^{q_0} + sA_{n+1}^{q_0} + B_{n+1}^{q_0} + sC_{n+1}^{q_0} + D_{n+1}^{q_0}.$$

Compering this identity with (B.3.5), with $i = n$ and $q = q_0$, we obtain equality (B.3.56).

Let us now prove the properties the profile L_{q_0-1} .

In order to show (B.3.57) we use the identities (B.3.6)–(B.3.9) with $i < 0$ and $q = q_0$. By using hypothesis (B.3.51), (B.3.57) is directly obtained for all i , except for the cases

$$\begin{aligned} B_{-1}^{q_0-1} &= sA_0^{q_0} + B_0^{q_0}, & y \\ D_{-1}^{q_0-1} &= -sA_0^{q_0} - B_0^{q_0}. \end{aligned}$$

However, from (B.3.30), $sA_0^{q_0} + B_0^{q_0} = 0$ and thus we get $B_{-1}^{q_0-1} = D_{-1}^{q_0-1} = 0$.

To show (B.3.58), we begin by calculating the sum on the right-hand side. For each $k \in \{0, \dots, n\}$, we use the identity (B.3.6), with $i = n - k$ and $q = q_0$. Hence, we obtain

$$\sum_{k=0}^n A_{n-k}^{q_0-1} P_k = \sum_{k=0}^n (A_{n-k-1}^{q_0} + sB_{n-k-1}^{q_0} + C_{n-k-1}^{q_0} + sD_{n-k-1}^{q_0} + (s^2 - 1)A_{n-k}^{q_0} + sB_{n-k}^{q_0}) P_k(s).$$

Using hypothesis (B.3.51), we can write

$$\begin{aligned} \sum_{k=0}^n A_{n-k}^{q_0-1} P_k &= \sum_{k=0}^{n-1} (A_{n-k-1}^{q_0} + sB_{n-k-1}^{q_0}) P_k + \sum_{k=0}^{n-1} (C_{n-k-1}^{q_0} + sD_{n-k-1}^{q_0}) P_k \\ &\quad + (s^2 - 1) \sum_{k=0}^n A_{n-k}^{q_0} P_k + s \sum_{k=0}^n B_{n-k}^{q_0} P_k(s). \end{aligned} \quad (\text{B.3.61})$$

Since hypotheses (B.3.52) and (B.3.53) hold for all n , we can use (B.3.24) in the first sum of the right-hand side, (B.3.25) in the second sum and (B.3.26) in the last sum. Hence,

$$\sum_{k=0}^n A_{n-k}^{q_0-1} P_k = sA_n^{q_0} + B_n^{q_0} + sC_n^{q_0} + D_n^{q_0} + (s^2 - 1) \sum_{k=0}^n A_{n-k}^{q_0} P_k + \sum_{k=1}^{n+1} A_{n+1-k}^{q_0} P_k - B_n^{q_0},$$

which, thanks to (B.3.52), is equivalent to

$$\sum_{k=0}^n A_{n-k}^{q_0-1} P_k = sA_n^{q_0} + B_n^{q_0} + sC_n^{q_0} + D_n^{q_0} + (s^2 - 1)B_n^{q_0} + B_{n+1}^{q_0} - A_{n+1}^{q_0} P_0 - B_n^{q_0}.$$

Since $P_0 = -s$, reordering terms we write

$$\sum_{k=0}^n A_{n-k}^{q_0-1} P_k = sA_n^{q_0} + (s^2 - 1)B_n^{q_0} + sC_n^{q_0} + D_n^{q_0} + sA_{n+1}^{q_0} + B_{n+1}^{q_0}.$$

This, equality (B.3.58) is a direct consequence from above identity and inequality (B.3.3) with the corresponding indices.

Similarly, in order to show (B.3.59), we begin by calculating the sum on the right hand side. For each $k \in \{0, \dots, n\}$, we use the identity (B.3.8), with $i = n - k$ and $q = q_0$. Hence, we obtain

$$\sum_{k=0}^n C_{n-k}^{q_0-1} P_k = - \sum_{k=0}^n (A_{n-k}^{q_0} + sB_{n-k}^{q_0} + C_{n-k}^{q_0}) P_k.$$

Thanks to (B.3.24), this can be rewritten as

$$\sum_{k=0}^n C_{n-k}^{q_0-1} P_k = -(sA_{n+1}^{q_0} + B_{n+1}^{q_0}) - \sum_{k=0}^n C_{n-k}^{q_0} P_k$$

and, from (B.3.53), we get

$$\sum_{k=0}^n C_{n-k}^{q_0-1} P_k(s) = -(sA_{n+1}^{q_0} + B_{n+1}^{q_0}) - D_n^{q_0}.$$

Thus, equality (B.3.59) is obtained directly from (B.3.9) with $i = n$ and $q = q_0$. \square

PROOF OF THEOREM B.4. We begin by showing (a) \Rightarrow (b). We will prove that the identities (B.3.15)–(B.3.16) hold for all $n \in \mathbb{N}$ by using induction over n . The case $n = 0$ is consequence of identities (B.3.30)–(B.3.31) of Lemma B.6. In fact, in this lemma, the case $n = 1$ has been explicitly studied. Now, let us suppose that the identities (B.3.15)–(B.3.16) hold up to $n \in \mathbb{N}$. Then, using Lemma B.7 we can deduce that they are also true for $n + 1$. Thus, we have shown that (a) \Rightarrow (b).

On the other hand, (b) \Rightarrow (c) is true because the property (b) is more general than property (c).

We now show that (c) \Rightarrow (d). In order to do that, we use double induction over $q \in \mathbb{Z}$. First of all, the hypothesis (c) is the case $q = q_0$ for which the equalities (B.3.19)–(B.3.21) are satisfied. Let us now assume that the identities (B.3.19)–(B.3.21) hold for $q \in \mathbb{Z}$. By using Lemma B.8 we conclude that these equalities also hold for $q + 1$ and $q - 1$. Hence, property (d) is true for all $q \in \mathbb{Z}$.

Finally, (d) \Rightarrow (a) is true since (d) is a more general property than (a). \square

Theorem B.5. *From above result, the functions $\Psi \in L^2(G)$ such taht $\mathcal{H}\Psi = \lambda\Psi$ are not bounded and do not have compact support.*

Using the properties in Theorem B.4, we can deduce additional properties of the solutions of $\mathcal{H}\Psi \equiv \lambda\Psi$ that are zeros for all $i \in \mathbb{Z}, i < 0$. Recursively using identities (B.3.2)–(B.3.5), we obtain the following properties.

Theorem B.6. *If $A_i^q, B_i^q, C_i^q, D_i^q$ satisfy hypotheses (B.3.14) of Theorem B.4, then*

$$A_0^{q+k} = (-1)^k A_0^q, \quad \forall q \in \mathbb{Z}, \forall k \in \mathbb{Z}, \quad (\text{B.3.62})$$

$$C_0^{q+k} = (-1)^k (C_0^q + k(s^2 - 1)A_0^q), \quad \forall q \in \mathbb{Z}, \forall k \in \mathbb{Z}. \quad (\text{B.3.63})$$

DEMOSTRACIÓN. Let $k \in \mathbb{N}$ and show (B.3.62) by induction on k . Clearly, the base case ($k = 0$) is true. We assume that (B.3.62) holds for $k \in \mathbb{N}$. In order to show that (B.3.62) is also true for $k + 1$, we consider the identity (B.3.2) with $i = 0$ and $q + k$ instead of q , i.e.,

$$A_0^{q+k+1} = -C_{-1}^{q+k} - sD_{-1}^{q+k} - A_0^{q+k}.$$

using hypothesis (B.3.14), we get

$$A_0^{q+k+1} = -A_0^{q+k}.$$

By induction hypothesis, the above equality becomes

$$A_0^{q+k+1} = -(-1)^k A_0^q,$$

i.e.,

$$A_0^{q+(k+1)} = (-1)^{k+1} A_0^q, \quad \forall q \in \mathbb{Z}.$$

Hence, for all $k \in \mathbb{N}$,

$$A_0^{q+k} = (-1)^k A_0^q. \quad (\text{B.3.64})$$

To show that (B.3.64) is also true if $k < 0$, we take $r = q + k$ in (B.3.64) and obtain

$$A_0^r = (-1)^k A_0^{r-k},$$

which is the same as

$$A_0^{r-k} = (-1)^k A_0^r. \quad (\text{B.3.65})$$

Thus, (B.3.62) holds.

We now prove (B.3.63) by induction on k . The base case is clearly true. Let us assume that (B.3.63) holds for $k \in \mathbb{N}$. We use the identity (B.3.4), with $i = 0$ and $q + k$ instead of q , i.e.,

$$C_0^{q+k+1} = C_{-1} + sD_{-1} + A_0^{q+k} + sB_0^{q+k} + (s^2 - 1)C_0^{q+k} + sD_0^{q+k}.$$

From hypothesis (B.3.14), we get that

$$C_0^{q+k+1} = A_0^{q+k} + sB_0^{q+k} + (s^2 - 1)C_0^{q+k} + sD_0^{q+k}$$

which is equivalent to

$$C_0^{q+k+1} = A_0^{q+k} - s^2 A_0^{q+k} + (s^2 - 1)C_0^{q+k} - s^2 C_0^{q+k},$$

thanks to (B.3.30) and (B.3.31) with $q + k$ instead of q . Thus,

$$C_0^{q+k+1} = -(s^2 - 1)A_0^{q+k} - C_0^{q+k}.$$

Using (B.3.62) and the induction hypothesis, we can write

$$C_0^{q+k+1} = -(s^2 - 1)(-1)^k A_0^q - (-1)^k (C_0^q + k(s^2 - 1)A_0^q),$$

i.e.,

$$C_0^{q+k+1} = (-1)^{k+1} (C_0^q + (k+1)(s^2 - 1)A_0^q), \quad \forall q \in \mathbb{Z}.$$

Then, for all $k \in \mathbb{N}$ we get

$$C_0^{q+k} = (-1)^k (C_0^q + k(s^2 - 1)A_0^q). \quad (\text{B.3.66})$$

In order to show that (B.3.66) is also true for $k < 0$, we take $r = q + k$ in (B.3.66) and obtain

$$C_0^r = (-1)^k (C_0^{r-k} + k(s^2 - 1)A_0^{r-k}),$$

which is the same as

$$C_0^r = (-1)^k (C_0^{r-k} + (-1)^k k(s^2 - 1)A_0^r),$$

thanks to (B.3.65). From this expression we get

$$C_0^{r-k} = (-1)^k (C_0^r - k(s^2 - 1)A_0^r),$$

which allows us to conclude (B.3.63). □

B.4. Conclusions

We found a recursive solution for the electron wave function in a graphene-like hexagonal lattice base on the physical conditions of wave continuity and flow incompressibility.

We defined the Hamiltonia \mathcal{H} that describes graphene parameterizing the problem in three edges joined by the same vertex. The eigenfunctions of \mathcal{H} together with the conditions of continuity and flow (B.1.15) and (B.1.16), led us to define a more convenient mathematical basis for the problem, namely the profiles L_q in (B.1.26). These profiles extend unidimensionally across the lattice, parallel to each other, and can describe any eigenfunction in the hexagonal network G . This means that if we know the value of the solution only in the vertices of the profile L_q , then it is possible to obtain the solution in each vertex in \mathcal{V} and in each edge in \mathcal{A} (see Remark B.3).

This leads us to conclude that it is enough to analyze a one-dimensional problem in a “chain” of ordinary second-order differential equations (a L_q profile) to obtain the behavior of the solution in the whole graphene, which is two-dimensional.

We defined four functions that form the canonical basis of G in the Remark B.4 and deduced that these functions are unbounded and do not have compact support, as shown in Theorem B.3. The same analysis is also valid for finite linear combinations of them.

We looked for eigenfunctions of \mathcal{H} with compact support. Then we proved Theorem B.4, which shows that the following statements are equivalent:

- (i) The eigenfunctions are equal to zero in all vertices to the left of an arbitrary vertex i_0 for all the profiles L_q , where the vertices i_0 in different profiles are simply connected.
- (ii) There exists a profile L_{q_0} such that the eigenfunctions are equal to zero in all its vertices to the left i_0 and satisfies the recursive formulas given in (B.3.15) - (B.3.16). These formulas are valid for all profiles L_q .
- (iii) There exists a profile L_{q_0} such that the eigenfunctions are equal to zero in all its vertices to the left i_0 and satisfies the recursive formulas given in (B.3.15) - (B.3.16) that are unique for that profile.
- (iv) The eigenfunctions are equal to zero in all vertex to the left of i_0 and in all profiles L_q , and satisfies the recursive formulas given in (B.3.15)-(B.3.16).

Acknowledgements

C. Conca and J. San Martín were partially supported from PFBasal-01 (CeBiB), PFBasal-03 (CMM) projects and by Fondecyt Grant 1140773. C.Conca also received partial support from Ecos-Conicyt Grant C13E05.

V. Solano was partially supported by CONICYT and PFBasal-03 (CMM) project.

We would like to thank M. Solano for valuable comments on the manuscript.

Bibliografía

- [1] F. Aguirre and C. Conca. Eigenfrequencies of a Tube Bundle Immersed in a Fluid. *Applied Mathematics and Optimization*, 18(1):1–38, 1988.
- [2] S. Alexander. Superconductivity of Networks. A Percolation Approach to the Effects of Disorder. *Physical Review B*, 27(3):1541, 1983.
- [3] G. Allaire and R. Orive. On the Band Gap Structure of Hill’s Equation. *Journal of Mathematical Analysis and Applications*, 306(2):462–480, 2005.
- [4] G. Alvarez and B. Sundaram. Perturbation Theory for Floquet Eigenvalues in a Zero-range Potential. *Physical Review A*, 42(1):452, 1990.
- [5] C. Amovilli, F. E. Leys, and N. H. March. Electronic Energy Spectrum of Two-dimensional Solids and a Chain of C Atoms From a Quantum Network Model. *Journal of Mathematical Chemistry*, 36(2):93–112, 2004.
- [6] F. M. Arscott. *Periodic Differential Equations*. A Pergamon Press Book, The Macmillan Co., New York, 1964.
- [7] F. M. Arscott. *Periodic Differential Equations: an Introduction to Mathieu, Lamé, and Allied Functions*, volume 66. Elsevier, 2014.
- [8] J. E. Avron, A. Raveh, and B. Zur. Adiabatic Quantum Transport in Multiply Connected Systems. *Reviews of Modern Physics*, 60(4):873, 1988.
- [9] H. Bateman, A. Erdélyi, W. Magnus, F. Oberhettinger, and F. G. Tricomi. *Higher Transcendental Functions*, volume 2. McGraw-Hill New York, 1955.
- [10] A. Bensoussan, J. L. Lions, and G. Papanicolaou. *Asymptotic analysis for periodic structures*, volume 5. North-Holland Publishing Company Amsterdam, 1978.
- [11] F. Bloch. Über die Quantenmechanik der Elektronen in Kristallgittern. *Zeitschrift für Physik*, 52(7-8):555–600, 1929.
- [12] L. Brillouin. *Wave Propagation in Periodic Structures: Electric Filters and Crystal Lattices*.

Courier Corporation, 2003.

- [13] E. Brown. Bloch Electrons in a Uniform Magnetic Field. *Physical Review*, 133(4A):A1038, 1964.
- [14] M. Burnat. The Stability of Eigenfunctions and the Spectrum of Hill's Equation. *Bull. Acad. Polon. Sci. Sér. Sci. Math. Astronom. Phys*, 9:795–797, 1961.
- [15] A. H. Castro Neto, F. Guinea, N. M. R. Peres, K. S. Novoselov, and A. K. Geim. The Electronic Properties of Graphene. *Reviews of Modern Physics*, 81(1):109, 2009.
- [16] C. Conca, R. Orive, J. San Martín, and V. Solano. On the Graphene Hamiltonian Operator (in progress).
- [17] C. Conca, J. Planchard, and M. Vanninathan. *Fluids and Periodic Structures*. Wiley Chichester, 1995.
- [18] C. Conca and M. Vanninathan. Homogenization of Periodic Structures via Bloch Decomposition. *SIAM Journal on Applied Mathematics*, 57(6):1639–1659, 1997.
- [19] P. G. De Gennes. Champ Critique d'une Boucle Supraconductrice Ramefiée. *C. R. Acad. Sci. Paris*, 292B:279–282, 1981.
- [20] V. I. Derguzov. Discreteness of the Spectrum of a Periodic Boundary-value Problem Related to the Radiation of Periodic Waveguides. *Siberian Mathematical Journal*, 21(5):664–672, 1980.
- [21] B. A. Dubrovin and S. P. Novikov. Ground States in a Periodic Field, Magnetic Bloch Functions and Vector Bundles. *Sov. Math., Dokl*, 22:240–244, 1980.
- [22] M. S. Eastham. *The Spectral Theory of Periodic Differential Equations*. Scottish Academic Press Edinburgh, 1973.
- [23] G. Eskin, J. Ralston, and E. Trubowitz. On Isospectral Periodic Potentials in \mathbb{R}^n . *Communications on Pure and Applied Mathematics*, 37(5):647–676, 1984.
- [24] S. Fassari. On the Schrödinger Operator with Periodic Point Interactions in the Three-dimensional Case. *Journal of Mathematical Physics*, 25(10):2910–2917, 1984.
- [25] G. Floquet. Sur les équations Différentielles Linéaires à Coefficients Périodiques. In *Annales Scientifiques de l'École Normale Supérieure*, volume 12, pages 47–88, 1883.
- [26] V. N. Fomin. Mathematical Theory of Parametric Resonance in Linear Distributed Systems. *Izd. Leningrad. Univ., Leningrad*, 1972 (In Russian).
- [27] D. Freed and J. A. Harvey. Instantons and the Spectrum of Bloch Electrons in a magnetic Field. *Physical Review B*, 41(16):11328, 1990.

- [28] P. J. F. Harris. *Carbon Nano-tubes and Related Structures: New Materials for the Twenty-first Century*. AAPT, 2002.
- [29] J. Howland. Scattering Theory for Hamiltonians Periodic in Time. *arXiv preprint arXiv:1212.2931*, 2012.
- [30] E. L. Ince. *Ordinary Diferential Equations*. Dover Publications, New York, 1956.
- [31] V. I. Iudovich. *The Linearization Method in Hydrodynamical Stability Theory*, volume 74. American Mathematical Soc., 1989.
- [32] M. I. Katsnelson. Graphene: Carbon in Two Dimensions. *Materials Today*, 10(1):20–27, 2007.
- [33] E. Korotyaev and I. Lobanov. Schrödinger Operators on Zigzag Graphs. *arXiv preprint math/0604006*, 2006.
- [34] E. Korotyaev and I. Lobanov. Zigzag Periodic Nanotube in Magnetic Field. *arXiv preprint math/0604007*, 2006.
- [35] E. L. Korotyaev. On the Spectrum of Monodromy Operator of the Schrödinger Operator with a Potential which is Periodic with Respect to Time. *Zapiski Nauchnykh Seminarov POMI*, 96:101–104, 1980.
- [36] I. M. Krichever. Spectral Theory of Two-dimensional Periodic Operators and its Applications. *Russian Mathematical Surveys*, 44(2):145–225, 1989.
- [37] P. Kuchment. Graph Models for Waves in Thin Structures. *Waves in Random Media*, 12(4):R1–R24, 2002.
- [38] P. Kuchment. Quantum Graphs and Their Applications in special issue of. *Waves in Random Media*, 14(1):S107–S128, 2004.
- [39] P. Kuchment and O. Post. On the Spectra of Carbon Nano-structures. *Communications in Mathematical Physics*, 275(3):805–826, 2007.
- [40] Nobel Lecture. Graphene: Materials in the Flatland. *Reviews of Modern Physics*, 83(3):837–849, 2011.
- [41] F. E. Leys, C. Amovilli, and N. H. March. Topology, Connectivity and Electronic Structure of C and B Cages and the Corresponding Nanotubes. *Journal of chemical information and computer Sciences*, 44(1):122–135, 2004.
- [42] W. Magnus and S. Winkler. *Hill's Equation*. Courier Corporation, 2013.
- [43] N. W. McLachlan. *Theory and Application of Mathieu Functions*. Oxford Univ. Press, 1947.

- [44] J. Meixner and F. W. Schäfke. *Mathieusche Funktionen und Sphäroidfunktionen*. Springer-Verlag, 1954.
- [45] R. G. J. Mills and E. W. Montroll. Quantum Theory on a Network. II. A Solvable Model Which may Have Several Bound States per Node Point. *Journal of Mathematical Physics*, 11(8):2525–2538, 1970.
- [46] R. Mittra and S. Lee. *Analytical Techniques in the Theory of Guided Waves*. Macmillan, 1971.
- [47] E. W. Montroll. Quantum Theory on a Network. I. A Solvable Model Whose Wavefunctions Are Elementary Functions. *Journal of Mathematical Physics*, 11(2):635–648, 1970.
- [48] S. P. Novikov. Two-dimensional Schrödinger Operators in Periodic Fields. *Journal of Soviet Mathematics*, 28(1):1–20, 1985.
- [49] A. Nuñez. Premio Nobel 2010. Grafeno: Un Mundo Bidimensional en la Punta de un Lápiz.
- [50] N. Panasenko and N. S. Bakhvalov. Homogenization: Averaging Processes in Periodic Media: Mathematical Problems in the Mechanics of Composite Materials, 1989.
- [51] L. Pauling. The Diamagnetic Anisotropy of Aromatic Molecules. *The Journal of Chemical Physics*, 4(10):673–677, 1936.
- [52] K. Ruedenberg and C. W. Scherr. Free-Electron Network Model for Conjugated Systems. I. Theory. *The Journal of Chemical Physics*, 21(9):1565–1581, 1953.
- [53] R. Saito, G. Dresselhaus, and M. S. Dresselhaus. *Physical properties of carbon nanotubes*. World Scientific, 1998.
- [54] E. Sánchez Palencia. Non-homogeneous Media and Vibration Theory. *Springer Verlag*, 127, 1980.
- [55] M. J. O. Strutt. *Lamésche-Mathieusche-und Verwandte Funktionen in Physik und Technik*, volume 3. Springer-Verlag, 2013.
- [56] T. Sunada. A Periodic Schrödinger Operator on an Abelian Cover. *J. Fac. Sci. Univ. Tokyo Sect. IA Math*, 37(3):575–583, 1990.
- [57] L. E. Thomas. Time Dependent Approach to Scattering from Impurities in a Crystal. *Communications in Mathematical Physics*, 33(4):335–343, 1973.
- [58] E. C. Titchmarsh. *Eigenfunction Expansions, Part II*. Oxford Univ. Press, 1958.
- [59] N. Turbe and C. Wilcox. Applications of Bloch Expansion to Periodic Elastic and Viscoelastic Media. *Mathematical Methods in the Applied Sciences*, 4(1):433–449, 1982.

- [60] V. A. Yakubovich and V. M. Starzhinski. *Linear Differential Equations with Periodic Coefficients, vol. 1, Wiley*, volume 2. Wiley, 1975.