

Anexos

A Modelo *tight-binding* en una red de grafeno

Para determinar la relación de dispersión de los electrones de una red de grafeno vamos a emplear un modelo *tight-binding*. Llamando \mathbf{R}_i a las posiciones de los átomos de la subred i y $\boldsymbol{\tau}_l$ a las posiciones de los primeros vecinos de un átomo, el hamiltoniano del modelo que empleamos es [17]

$$H = -t \sum_{\mathbf{R}_B} \sum_{l=1}^3 a_{\mathbf{R}_B + \boldsymbol{\tau}_l}^\dagger b_{\mathbf{R}_B} + h.c. \quad (\text{A.1})$$

$$\boldsymbol{\tau}_1 = -\frac{\sqrt{3}a_0}{2}\hat{x} - \frac{a_0}{2}\hat{y} \quad \boldsymbol{\tau}_2 = \frac{\sqrt{3}a_0}{2}\hat{x} - \frac{a_0}{2}\hat{y} \quad \boldsymbol{\tau}_3 = a_0\hat{y}$$

donde $h.c.$ denota 'el complejo conjugado de lo anterior', y donde t es la integral de *hopping* y a^\dagger/a y b^\dagger/b son operadores creación/destrucción de electrones en un punto de las subredes A y B, respectivamente.

Una forma más útil de este hamiltoniano la obtenemos mediante la transformada de Fourier, definiendo los operadores creación/destrucción de estados con momento \mathbf{k} , que denotamos por α (β) para la subred A (B):

$$\begin{aligned} a_{\mathbf{R}_A}^\dagger &= \frac{1}{\sqrt{L_x L_y}} \sum_{\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_A} \alpha_{\mathbf{k}}^\dagger & b_{\mathbf{R}_B}^\dagger &= \frac{1}{\sqrt{L_x L_y}} \sum_{\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_B} \beta_{\mathbf{k}}^\dagger \\ a_{\mathbf{R}_A} &= \frac{1}{\sqrt{L_x L_y}} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_A} \alpha_{\mathbf{k}} & b_{\mathbf{R}_B} &= \frac{1}{\sqrt{L_x L_y}} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_B} \beta_{\mathbf{k}} \end{aligned} \quad (\text{A.2})$$

Introduciendo estas definiciones en el hamiltoniano se tiene

$$H = -t \sum_{\mathbf{k}} \sum_{l=1}^3 e^{-i\mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\tau}_l} \alpha_{\mathbf{k}}^\dagger \beta_{\mathbf{k}} + h.c. \quad (\text{A.3})$$

Para obtener la relación de dispersión $E(\mathbf{k})$ tomamos un estado de una partícula con momento definido definido sobre una celda unidad

$$|\psi(\mathbf{k})\rangle = (A\alpha_{\mathbf{k}}^\dagger + B\beta_{\mathbf{k}}^\dagger) |0\rangle \quad (\text{A.4})$$

donde $|0\rangle = |0_A, 0_B\rangle$ es el estado vacío, es decir, el estado sin electrones en ninguno de los dos átomos. Introduciendo este estado en la ecuación de autovalores $H|\psi(\mathbf{k})\rangle = E(\mathbf{k})|\psi(\mathbf{k})\rangle$ y usando las relaciones

$$\begin{aligned}
\alpha_{\mathbf{k}} \alpha_{\mathbf{k}}^\dagger |0\rangle &= |0\rangle & \alpha_{\mathbf{k}} |0_A, \psi_B\rangle &= 0 \\
\beta_{\mathbf{k}} \beta_{\mathbf{k}}^\dagger |0\rangle &= |0\rangle & \beta_{\mathbf{k}} |\psi_A, 0_B\rangle &= 0
\end{aligned} \tag{A.5}$$

puede verse que la ecuación de autovalores se convierte en la relación matricial

$$\begin{pmatrix} 0 & f_{AB}^*(\mathbf{k}) \\ f_{AB}(\mathbf{k}) & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} \quad \text{donde} \quad f_{AB}(\mathbf{k}) = -t \sum_{l=1}^3 e^{-i\mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\tau}_l} \tag{A.6}$$

Las soluciones de esta ecuación son $E(\mathbf{k}) = \pm \sqrt{|f_{AB}(\mathbf{k})|^2}$. Introduciendo los vectores $\boldsymbol{\tau}_l$ de (A.1) queda, tras un poco de álgebra, la relación de dispersión

$$E(\mathbf{k}) = \pm \sqrt{|f_{AB}(\mathbf{k})|^2} = \pm t \sqrt{1 + 4 \cos^2 \frac{k_x a}{2} + 4 \cos \frac{k_x a}{2} \cos \sqrt{3} k_y a} \tag{A.7}$$

Notar que es una función simétrica respecto del plano $E = 0$, correspondiendo cada signo a la banda de valencia y la de conducción. Esto, junto con el hecho de que solamente participa en la conducción un electrón de cada átomo, a temperatura cero la banda de valencia se ocupa completamente y la de conducción está vacía, quedando el nivel de Fermi en $E_F = 0$. Además, esta función se anula en seis puntos, de los cuales solo dos son no-equivalentes, y usualmente se denominan valles K^+ y K^-

$$K^+ = \frac{2\pi}{a} \begin{pmatrix} 2/3 \\ 0 \end{pmatrix} \quad K^- = \frac{2\pi}{a} \begin{pmatrix} -2/3 \\ 0 \end{pmatrix} \tag{A.8}$$

Si nos situamos en un punto $\mathbf{k} = \mathbf{K}^\pm + \mathbf{q}$, con $|\mathbf{q}| \ll |\mathbf{K}^\pm|$ y expandimos el hamiltoniano en una serie de Taylor en torno a $\mathbf{q} = 0$ tenemos:

$$H_{\mathbf{K}^\pm + \mathbf{q}} = \frac{3a_0}{2} t \begin{pmatrix} 0 & q_x - iq_y \\ q_x + iq_y & 0 \end{pmatrix} \equiv \hbar v_F (q_x \sigma_x + q_y \sigma_y) \tag{A.9}$$

donde σ_i son las matrices de Pauli

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

Este hamiltoniano es equivalente al hamiltoniano de Dirac para partículas sin masa,

$$H_D = i\hbar c \gamma^\mu \partial_\mu = \hbar c \sigma^\mu k_\mu = \hbar c (k_x \sigma_x + k_y \sigma_y) \tag{A.10}$$

y la relación de dispersión cerca de los puntos K^\pm queda

$$E(\mathbf{K}^\pm + \mathbf{q}) = \hbar v_F \sqrt{q_x^2 + q_y^2} \quad (\text{A.11})$$

Vemos que los electrones del grafeno en el nivel de Fermi no tienen la relación de dispersión parabólica propia de materiales convencionales, sino que es lineal, comportándose como fermiones relativistas con masa efectiva nula.

B Modelo *tight-binding* en nanocintas de grafeno

Análogamente a como hemos hecho con el grafeno en el Anexo A, podemos emplear un método de *tight-binding* en nanocintas para cada geometría para obtener tanto la estructura de bandas como las funciones de onda.

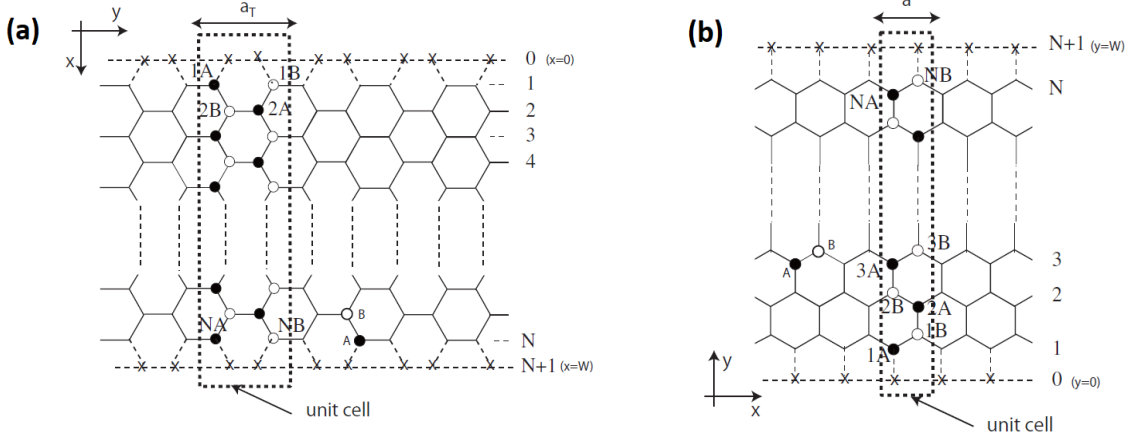


Figura 14: Representación de los dos tipos de nanocintas de grafeno: (a) Armchair y (b) Zigzag. Se asume que los átomos situados en los bordes están enlazados a hidrógenos para que no contribuyan a la conductividad. Imágenes tomadas de [17].

Nanocinta tipo armchair

Primero tratamos el caso de una nanocinta tipo armchair. Definimos su anchura como el número de dímeros en la dirección transversal, etiquetados por m , y definimos la celda unidad como la sección que se repite periódicamente en la dirección longitudinal, etiquetadas por l (figura (14a)). El hamiltoniano *tight-binding* empleado para describir el sistema es [17]

$$H = -t \sum_l \left\{ \sum_{m \text{ impar}} a_l^\dagger(m) b_{l-1}(m) + \sum_{m \text{ par}} a_l^\dagger(m) b_l(m) \right\} + h.c. \\ - t \sum_l \sum_{m=1}^{N+1} \left\{ b_l^\dagger(m+1) a_l(m) + a_l^\dagger(m+1) b_l(m) \right\} + h.c. \quad (\text{B.1})$$

En este hamiltoniano, la primera línea representa movimiento de electrones en la dirección transversal, mientras que la segunda representa un movimiento longitudinal. Aquí, el operador $a_l^\dagger(m)$ representa la creación de un electrón en el átomo de la subred A, del dímerno m y la celda unidad l . Análogamente, $b_l^\dagger(m)$ crea un electrón en el átomo correspondiente de la subred B. Aprovechando la simetría bajo desplazamientos en el eje longitudinal, podemos definir operadores creación y destrucción de estados con momento definido k como la transformada de

Fourier

$$\begin{aligned} a_l^\dagger(m) &= \frac{1}{\sqrt{L_y}} \sum_k e^{-iky_l, mA} \alpha_k^\dagger(m) & b_l^\dagger(m) &= \frac{1}{\sqrt{L_y}} \sum_k e^{-iky_l, mB} \beta_k^\dagger(m) \\ a_l(m) &= \frac{1}{\sqrt{L_y}} \sum_k e^{iky_l, mA} \alpha_k(m) & b_l(m) &= \frac{1}{\sqrt{L_y}} \sum_k e^{iky_l, mB} \beta_k(m) \end{aligned} \quad (\text{B.2})$$

Por conveniencia definimos la coordenada y de los átomos como

$$\begin{aligned} y_{l,1A} &= y_{l,2B} = y_{l,3A} = \dots = y_l \\ y_{l,1B} &= y_{l,2A} = y_{l,3B} = \dots = y_l + a_T/2 \end{aligned} \quad (\text{B.3})$$

donde $a_T = 3a_0$ es la anchura de la celda unidad. Introduciendo todo esto en el hamiltoniano se tiene

$$\begin{aligned} H &= -t \sum_k \sum_m e^{-ika_T/2} \alpha_k^\dagger(m) \beta_k(m) + h.c. \\ &\quad - t \sum_k \sum_m \left\{ \beta_k^\dagger(m+1) \alpha_k(m) + \alpha_k^\dagger(m+1) \beta_k(m) \right\} + h.c. \end{aligned} \quad (\text{B.4})$$

Definimos un estado de un electrón en la celda unidad como

$$|\psi(k)\rangle = \sum_m (\psi_{mA} \alpha_k^\dagger(m) + \psi_{mB} \beta_k^\dagger(m)) |0\rangle \quad (\text{B.5})$$

donde $|0\rangle$ es el estado vacío. La relación de dispersión viene dada por la ecuación de autovalores $H |\psi(k)\rangle = E(k) |\psi(k)\rangle$, luego introduciendo este estado en el hamiltoniano y empleando las relaciones

$$\begin{aligned} \alpha_k(m) \alpha_k^\dagger(m) |0\rangle &= |0\rangle & \alpha_k(m) |0_A, \psi_B\rangle &= 0 \\ \beta_k(m) \beta_k^\dagger(m) |0\rangle &= |0\rangle & \beta_k(m) |\psi_A, 0_B\rangle &= 0 \end{aligned} \quad (\text{B.6})$$

se llega al sistema de ecuaciones (a partir de ahora denotamos $E = E/t$)

$$\begin{aligned} E\psi_{mA} &= -e^{-ika_T/2} \psi_{mB} - \psi_{(m-1)B} - \psi_{(m+1)B} \\ E\psi_{mB} &= -e^{ika_T/2} \psi_{mA} - \psi_{(m-1)A} - \psi_{(m+1)A} \end{aligned} \quad (\text{B.7})$$

que debemos resolver con las condiciones de contorno adecuadas. Estas condiciones consisten en suponer que los átomos de los bordes de la nanocinta están enlazados a átomos de hidrógeno, correspondientes a las posiciones $m = 0$ y $m = N+1$. Por tanto imponemos que en los hidrógenos la función de onda se anule, esto es,

$$\psi_{0A} = \psi_{0B} = \psi_{(N+1)A} = \psi_{(N+1)B} = 0 \quad (\text{B.8})$$

Proponemos una solución de la forma

$$\begin{aligned}\psi_{mA} &= Ae^{ipm} + Be^{-ipm} = A(e^{ipm} - e^{-ipm}) \\ \psi_{mB} &= Ce^{ipm} + De^{-ipm} = C(e^{ipm} - e^{-ipm})\end{aligned}\tag{B.9}$$

donde hemos usado las condiciones de contorno en $m = 0$ para relacionar $A = -B$ y $C = -D$, y donde p corresponde con el vector de ondas en la dirección trasversal (que estará discretizado por la anchura finita) y k el vector de ondas en la dirección longitudinal (que será continuo entre $-\pi/2 < ka_T < \pi/2$). Sustituyendo en las ecuaciones anteriores tenemos

$$\begin{pmatrix} E & \epsilon_p + e^{-ika_T/2} \\ \epsilon_p + e^{ika_T/2} & E \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A \\ C \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}\tag{B.10}$$

donde definimos $\epsilon_p = 2\cos(p)$, de tal forma que tendremos una solución no trivial cuando el determinante de la matriz sea nulo. Esta condición nos da finalmente la relación de dispersión de la figura (9a,b).

$$E(k, p) = \pm \sqrt{1 + 2\epsilon_p \cos \frac{ka_T}{2} + \epsilon_p^2}\tag{B.11}$$

Adicionalmente, podemos emplear las condiciones de contorno en $m = N + 1$ que no hemos usado antes para obtener la discretización de p :

$$\psi_{(N+1)A} = A(e^{ip(N+1)} - e^{-ip(N+1)}) = 0 \implies \sin(p(N+1)) = 0\tag{B.12}$$

luego tenemos N valores de p correspondientes a diferentes subbandas de energía, dados por

$$p = \frac{r}{N+1}\pi \quad r = 1, \dots, N\tag{B.13}$$

Como último comentario acerca de la relación de dispersión, puede verse que existen valores de N para los que la nanocinta es metálica y otros para los que presenta un *gap* de energía en $E = 0$. Tomando $k = 0$ y $E = 0$ en (B.11), la condición que debe cumplirse para que el sistema sea metálico es

$$N = 3r - 1\tag{B.14}$$

Podemos también obtener las funciones de onda en la nanocinta. Tomando el sistema de ecuaciones (B.10) podemos relacionar los coeficientes A y C como

$$A = \mp \frac{\sqrt{\epsilon_p + e^{-ika_T/2}}}{\sqrt{\epsilon_p + e^{ika_T/2}}} C\tag{B.15}$$

de forma que la función de onda es, normalizándola debidamente,

$$\begin{pmatrix} \psi_{mA} \\ \psi_{mB} \end{pmatrix} = N \begin{pmatrix} \mp \sqrt{\epsilon_p + e^{-ika_T/2}} \\ \sqrt{\epsilon_p + e^{ika_T/2}} \end{pmatrix} \sin(mp) \quad (\text{B.16})$$

o equivalentemente, en el espacio de posiciones,

$$\begin{pmatrix} \psi_{mA}(y_{l,mA}) \\ \psi_{mB}(y_{l,mB}) \end{pmatrix} = \frac{N}{\sqrt{L_y}} \sum_k \begin{pmatrix} \mp \sqrt{\epsilon_p + e^{-ika_T/2}} e^{iky_{l,mA}} \\ \sqrt{\epsilon_p + e^{ika_T/2}} e^{iky_{l,mB}} \end{pmatrix} \sin(mp) \quad (\text{B.17})$$

Vemos, por tanto, que la función de onda está extendida por toda la red y que toma el mismo valor, salvo por una diferencia de fases, en los dos tipos de átomos A y B.

Nanocinta tipo zigzag

Tratemos ahora el caso de una nanocinta tipo zigzag (figura (14b)). En este caso, la anchura se define como el número de cadenas en zigzag en la dirección trasversal. El hamiltoniano *tight-binding* que empleamos en este caso es

$$\begin{aligned} H = & -t \sum_l \left\{ \sum_{m \text{ par}} b_l^\dagger(m) a_{l-1}(m) + \sum_{m \text{ impar}} a_l^\dagger(m) b_{l-1}(m) \right\} + h.c. \\ & -t \sum_l \sum_{m=1}^N b_l^\dagger(m) a_l(m) + h.c. \\ & -t \sum_l \sum_{m=1}^{N-1} a_l^\dagger(m+1) b_l(m) \end{aligned} \quad (\text{B.18})$$

donde la primera línea representa un movimiento longitudinal entre celdas unidad, la segunda línea representa un movimiento longitudinal dentro de una misma celda y la tercera línea representa un movimiento en la dirección trasversal.

Análogamente al caso armchair se emplean los operadores creación y destrucción en el espacio de momentos y se resuelve la ecuación de autovalores $H |\psi(k)\rangle = E(k) |\psi(k)\rangle$, con $|\psi(k)\rangle$ definido en (B.5). El sistema de ecuaciones al que se llega en este caso es

$$\begin{aligned} E\psi_{mA} &= -g_k \psi_{mB} - \psi_{(m-1)B} \\ E\psi_{mB} &= -g_k \psi_{mA} - \psi_{(m-1)A} \end{aligned} \quad (\text{B.19})$$

donde $g_k = 2 \cos(ka_T/2)$, y donde en este caso debemos resolverlo con las condiciones de contorno impuestas por la existencia de átomos de hidrógeno en los bordes:

$$\psi_{0B} = \psi_{(m+1)A} = 0 \quad (\text{B.20})$$

Si proponemos una solución de la forma

$$\begin{aligned}\psi_{mA} &= Ae^{ipm} + Be^{-ipm} = A(e^{ipm} - z^2 e^{-ipm}) \\ \psi_{mB} &= Ce^{ipm} + De^{-ipm} = C(e^{ipm} - e^{-ipm})\end{aligned}\tag{B.21}$$

donde hemos utilizado las condiciones de contorno y definido $z = \exp(ip(N+1))$, al sustituir en las ecuaciones queda

$$\begin{pmatrix} E(e^{ipm} - z^2 e^{-ipm}) & (g_k + e^{-ip})e^{ipm} - (g_k + e^{ip})e^{-ipm} \\ (g_k + e^{ip})e^{ipm} - z^2(g_k + e^{-ip})e^{-ipm} & E(e^{ipm} - e^{-ipm}) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A \\ C \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}\tag{B.22}$$

Nuevamente, la solución no trivial viene determinada por $\det(M) = 0$. Esto es posible para $p \neq 0, \pi$, valores para los cuales la matriz se anula idénticamente. Anulando el determinante tenemos:

$$\begin{aligned} & \underbrace{[E^2 - (g_k + e^{-ip})(g_k + e^{ip})]}_v e^{2ipm} + \underbrace{[E^2 z^2 - z^2(g_k + e^{-ip})(g_k + e^{ip})]}_w e^{-2ipm} + \\ & \quad + \underbrace{[-E^2 - E^2 z^2 + z^2(g_k + e^{-ip})^2 + (g_k + e^{ip})^2]}_x = 0 \\ \implies & ve^{2ipm} + we^{-2ipm} + x = 0 \end{aligned}\tag{B.23}$$

Debemos, por tanto, anular los coeficientes v, w, x por separado:

- Anulando v o w se obtiene la relación de dispersión,

$$E = \pm \sqrt{g_k^2 + 2 \cos(p)g_k + 1}\tag{B.24}$$

- Anulando x se obtiene la discretización del vector de ondas trasversal, p ,

$$F(p, N) = \sin(pN) + g_k \sin[p(N+1)] = 0\tag{B.25}$$

Aunque (B.25) puede resolverse numéricamente, vale la pena analizarla gráficamente. Esta función se muestra en la figura (15). Puede verse que existe un valor de g_k crítico por debajo del cual desaparece una de las soluciones, indicando la degeneración de dos bandas en una sola ($E = 0$). Este valor crítico se da cuando la pendiente de la función en $p = \pi$ se anula, es decir,

$$\left. \frac{\partial}{\partial p} F(p, N) \right|_{p=\pi} = 0 \iff g_k^c = \pm \frac{1}{1 + 1/N}\tag{B.26}$$

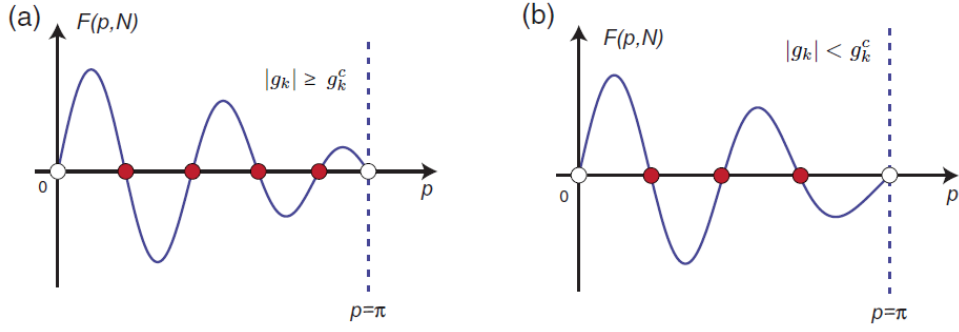


Figura 15: Representación de la función $F(p, N = 4)$ de (B.25). (a) Caso $|g_k| \geq g_k^c$, para el cual existen N soluciones. (b) Caso $|g_k| < g_k^c$, para el cual existen $N - 1$ soluciones. Imágenes tomadas de [17]

luego el valor de k crítico es, recordando la definición $g_k = 2 \cos(ka_T/2)$,

$$k^c = \pm \frac{2}{a_T} \cos^{-1} \left(\frac{1/2}{1 + 1/N} \right) \xrightarrow{N \rightarrow \infty} \pm \frac{2\pi}{3a} \quad (\text{B.27})$$

que en el límite de grafeno 2D, $N \rightarrow \infty$, coincide con los puntos de Dirac.

Tras este análisis distinguimos dos tipos de estados:

- Primero tenemos los estados extendidos, que son aquellos solución de (B.25) y cuya relación de dispersión es (B.24). Las funciones de onda de estos estados son

$$\begin{pmatrix} \psi_{mA} \\ \psi_{mB} \end{pmatrix} = N \begin{pmatrix} \sin[p(N + 1 - m)] \\ \sin(pm) \end{pmatrix} \quad (\text{B.28})$$

- Por otro lado tenemos los estados localizados, que son los estados que 'desaparecen' para $|g_k| < g_k^c$. Estos podemos obtenerlos extendiendo los anteriores analíticamente, es decir, tomando una parte compleja en $p = 0, \pi$. Así, definimos $p_0 = 0 \pm i\eta$ y $p_\pi = \pi \pm i\eta$, y donde η es único para cada valor de p y puede obtenerse de (B.25).

La relación de dispersión de estos estados se obtiene tomando (B.24) y tomando

$$\begin{aligned} \cos(\pi \pm i\eta) &= \frac{1}{2}(e^{i\pi \mp \eta} + e^{-i\pi \pm \eta}) = -\frac{1}{2}(e^{\mp \eta} + e^{\pm \eta}) = -\cosh(\eta) \\ \cos(0 \pm i\eta) &= \frac{1}{2}(e^{i0 \mp \eta} + e^{-i0 \pm \eta}) = \frac{1}{2}(e^{\mp \eta} + e^{\pm \eta}) = \cosh(\eta) \end{aligned} \quad (\text{B.29})$$

obteniendo así la relación de dispersión

$$E = \begin{cases} \pm \sqrt{1 + g_k^2 - 2g_k \cosh(\eta)} , & \text{para } p_\pi \\ \pm \sqrt{1 + g_k^2 + 2g_k \cosh(\eta)} , & \text{para } p_0 \end{cases} \quad (\text{B.30})$$

En cuanto a sus funciones de onda, se pueden obtener de las anteriores y son funciones localizadas exponencialmente en los bordes de la nanocinta:

$$\begin{pmatrix} \psi_{mA} \\ \psi_{mB} \end{pmatrix} = \begin{cases} N e^{i\pi m} \begin{pmatrix} \mp e^{i\pi(N+1)} \sinh[\eta(N+1-m)] \\ \sinh(\eta m) \end{pmatrix}, & \text{para } p_\pi \\ N \begin{pmatrix} \mp \sinh[\eta(N+1-m)] \\ \sinh(\eta m) \end{pmatrix}, & \text{para } p_0 \end{cases} \quad (\text{B.31})$$

C Ecuación de Mel'nikov

Para obtener la ecuación de Mel'nikov (2.19) vamos a considerar un conductor unidimensional de longitud L en el que existe desorden. La matriz de transferencia en forma polar es

$$M = \begin{bmatrix} e^{i\mu} & 0 \\ 0 & e^{-i\mu} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \sqrt{1+\lambda}e^{i\theta} & \sqrt{\lambda}e^{-i\theta} \\ \sqrt{\lambda}e^{i\theta} & \sqrt{1+\lambda}e^{-i\theta} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} e^{-i\mu} & 0 \\ 0 & e^{-i\mu} \end{bmatrix} \quad (C.1)$$

donde los distintos parámetros seguirán una cierta distribución de probabilidad. Dado un ensemble de conductores, definimos la probabilidad diferencial de una matriz M como

$$d\tilde{P}_L(M) = p_L(M)d\mu(M) \quad (C.2)$$

donde $p_L(M)$ es la densidad de probabilidad de M y $d\mu(M)$ una medida invariante, de tal forma que el valor esperado de una función de M es

$$\langle f(M) \rangle = \int f(M)p_L(M)d\mu(M) \quad (C.3)$$

Supongamos que tenemos dos secciones de conductor de longitudes L'' y L' , con matrices de transferencia M'' y M' . Por la propiedad multiplicativa de la matriz de transferencia, para el sistema completo se cumple $M = M'M''$. Primero debemos hallar, conocidas las densidades $p_{L'}(M')$ y $p_{L''}(M'')$, la densidad de probabilidad $p_{L'+L''}(M)$. Para ello, suponiendo que las dos secciones son estadísticamente independientes, escribimos el valor esperado de una función de M :

$$\begin{aligned} \langle f(M) \rangle &= \iint f(M'M'')p_{L'}(M')d\mu(M')p_{L''}(M'')d\mu(M'') = \\ &= \int d\mu(M)f(M) \int d\mu(M')p_{L''}(M'^{-1}M)p_{L'}(M') \end{aligned} \quad (C.4)$$

donde en la segunda igualdad se ha hecho el cambio de variable $M'' = M'^{-1}M$. Comparando esta expresión con (C.3) podemos identificar la densidad de probabilidad total como la convolución

$$p_{L'+L''}(M) = p_{L''} \otimes p_{L'} = \int d\mu(M')p_{L''}(M'^{-1}M)p_{L'}(M') \quad (C.5)$$

Esta expresión la vamos a emplear tomando $L'' = L$ y $L' = \delta L$ de forma que, partiendo de un conductor de longitud L , podemos añadir una sección infinitesimal δL de forma recursiva para lograr conductores de cualquier longitud. Para hacer esto necesitamos conocer la densidad de probabilidad de la matriz de transferencia asociada al bloque δL . Esto lo logramos con un modelo de máxima entropía. Definimos la entropía asociada a la densidad de probabilidad

$p_{\delta L}(M')$ como

$$\begin{aligned} S[p_{\delta L}] &= - \int p_{\delta L}(M') \ln(p_{\delta L}(M')) d\mu(M') \\ &= - \int p_{\delta L}(\lambda', \theta', \mu') \ln(p_{\delta L}(\lambda', \theta', \mu')) d\mu(\lambda', \theta', \mu') \end{aligned} \quad (C.6)$$

Obtenemos la densidad $p_{\delta L}$ maximizando esta entropía bajo las siguientes restricciones:

1. Normalización: $\int p_{\delta L}(\lambda', \theta', \mu') d\lambda' d\theta' d\mu' = 1$
2. Primer momento: $\langle \lambda' \rangle = \delta L/l$, donde l es el *mean free path* elástico.

El resultado de maximizar la entropía es la densidad de probabilidad

$$p_{\delta L}(M') = \frac{1}{\delta L/l} e^{-\lambda' / (\delta L/l)} p_{\delta L}(\theta') = p_{\delta L}(\lambda', \theta') \quad (C.7)$$

La densidad de probabilidad de λ la obtenemos por medio de la transformada de Fourier de la función generadora de momentos

$$\begin{aligned} P_{L+\delta L}(\lambda) &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-it\lambda} \tilde{p}_{L+\delta L}(t) dt \quad \text{donde} \\ \tilde{p}_{L+\delta L}(t) &= \left\langle e^{it\lambda(M', M'')} \right\rangle = \iiint e^{it\lambda} p_L(\lambda'', \theta'') p_{\delta L}(\lambda', \theta') d\lambda' d\lambda'' \frac{d\theta'}{2\pi} \frac{d\theta''}{2\pi} \frac{d\mu'}{2\pi} \frac{d\mu''}{2\pi} \end{aligned} \quad (C.8)$$

y donde $\lambda(M', M'')$ lo obtenemos a partir del producto $M = M' M''$, quedando

$$\lambda = \lambda'' + \lambda' + 2\lambda''\lambda' + 2\sqrt{\lambda''(1+\lambda'')\lambda'(1+\lambda')} \cos[2(\mu'' + \theta' - \mu')] \quad (C.9)$$

El objetivo es transformar $p_{L+\delta L}$ en una ecuación diferencial, para lo cual tomaremos el límite $\delta L \rightarrow 0$. En este límite la matriz de transferencia M' debe tender a la identidad, por lo que $\lambda' \rightarrow 0$. Por ello, expandimos las integrales anteriores en potencias de λ' , quedando

$$\begin{aligned} p_{L+\delta L}(\lambda) &= p_L(\lambda) + \frac{\partial^2}{\partial \lambda^2} [\lambda(1+\lambda)p_L(\lambda)] \langle \lambda'(1+\lambda') \rangle_{\delta L} - \frac{\partial}{\partial \lambda} [(1+2\lambda)p_L(\lambda)] \langle \lambda' \rangle_{\delta L} \\ &\quad + O(\langle \lambda' \rangle^2) \end{aligned} \quad (C.10)$$

Los momentos $\langle (\lambda')^n \rangle_{\delta L}$ los podemos obtener a partir de la distribución marginal de λ' , obtenida de (C.7)

$$p_{\delta L}(\lambda') = \int p_{\delta L} \frac{d\theta'}{2\pi} = \frac{1}{\delta L/l} e^{-\lambda' / (\delta L/l)} \implies \langle (\lambda')^n \rangle_{\delta L} = n! \left(\frac{\delta L}{l} \right)^n \quad (C.11)$$

Sustituyendo en (C.10) y tomando el límite

$$\lim_{\delta L \rightarrow 0} \frac{p_{L+\delta L}(\lambda) - p_L(\lambda)}{\delta L} = \frac{\partial p_L(\lambda)}{\partial L}$$

tenemos finalmente la ecuación de Mel'nikov:

$$\frac{\partial p_s(\lambda)}{\partial s} = \frac{\partial}{\partial \lambda} \left[\lambda(1 + \lambda) \frac{\partial p_s(\lambda)}{\partial \lambda} \right] \quad (\text{C.12})$$

donde definimos $s = L/l$.

D Combinación de matrices de *scattering*

Dado un problema de *scattering* en un conductor con un número elevado de conexiones es habitual dividirlo en problemas más pequeños, definiendo para cada uno de ellos una matriz de *scattering*, y combinarlas para obtener la del sistema completo:

$$S = S^{(1)} \star S^{(2)} \quad (\text{D.1})$$

Para ilustrar el mecanismo de combinar matrices S tomemos el problema de la figura (5), para el que buscamos la matriz S' tal que $\{b'\} = S'\{a'\}$ y donde separamos el problema en los dos puntos de contacto definiendo las matrices $S^{(1)}$ y $S^{(2)}$ tales que

$$\begin{pmatrix} b'_1 \\ b'_2 \\ b'_3 \\ b'_4 \end{pmatrix} = S' \begin{pmatrix} a'_1 \\ a'_2 \\ a'_3 \\ a'_4 \end{pmatrix} \quad \begin{pmatrix} b'_1 \\ a \\ b'_3 \end{pmatrix} = S^{(1)} \begin{pmatrix} a'_1 \\ b \\ a'_3 \end{pmatrix} \quad \begin{pmatrix} b'_2 \\ a' \\ b'_4 \end{pmatrix} = S^{(2)} \begin{pmatrix} a'_2 \\ b' \\ a'_4 \end{pmatrix} \quad (\text{D.2})$$

Además, por comodidad relacionamos las amplitudes (a, b, a', b') a través de otra matriz

$$\begin{pmatrix} b \\ b' \end{pmatrix} = \tilde{S}^{(12)} \begin{pmatrix} a \\ a' \end{pmatrix} = \begin{bmatrix} \tilde{r} & \tilde{t} \\ \tilde{t} & \tilde{r}' \end{bmatrix} \begin{pmatrix} a \\ a' \end{pmatrix} \quad (\text{D.3})$$

La idea es manipular estas relaciones matriciales para obtener una matriz que relacione directamente las amplitudes b'_i y a'_i . Para ello, podemos reescribir las relaciones (D.2) como

$$\begin{pmatrix} b'_1 \\ b'_2 \\ b'_3 \\ b'_4 \\ a \\ a' \end{pmatrix} = \begin{bmatrix} S_{11}^{(1)} & 0 & S_{13}^{(1)} & 0 & S_{12}^{(1)} & 0 \\ 0 & S_{11}^{(2)} & 0 & S_{13}^{(2)} & 0 & S_{12}^{(2)} \\ S_{31}^{(1)} & 0 & S_{33}^{(1)} & 0 & S_{32}^{(1)} & 0 \\ 0 & S_{31}^{(2)} & 0 & S_{33}^{(2)} & 0 & S_{32}^{(2)} \\ \hline S_{21}^{(1)} & 0 & S_{23}^{(1)} & 0 & S_{22}^{(1)} & 0 \\ 0 & S_{21}^{(2)} & 0 & S_{23}^{(2)} & 0 & S_{22}^{(2)} \end{bmatrix} \begin{pmatrix} a'_1 \\ a'_2 \\ a'_3 \\ a'_4 \\ b \\ b' \end{pmatrix} \longleftrightarrow \begin{pmatrix} \mathbf{b}' \\ \mathbf{A} \end{pmatrix} = \begin{bmatrix} \mathcal{S}_{PP} & \mathcal{S}_{PQ} \\ \mathcal{S}_{QP} & \mathcal{S}_{QQ} \end{bmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{a}' \\ \mathbf{B} \end{pmatrix} \quad (\text{D.4})$$

De esta forma nos queda el siguiente sistema:

$$\begin{aligned}
\{b'\} &= \mathcal{S}_{PP}\{a'\} + \mathcal{S}_{PQ}\{B\} \\
\{A\} &= \mathcal{S}_{QP}\{a'\} + \mathcal{S}_{QQ}\{B\} \\
\{B\} &= \tilde{S}^{(12)}\{A\}
\end{aligned} \tag{D.5}$$

Despejando $\{B\}$ de la segunda ecuación usando la tercera y la unitariedad de $\tilde{S}^{(12)}$, y sustituyéndolo en la primera ecuación, tenemos finalmente

$$\{b'\} = S'\{a'\} \quad \text{donde} \quad S' = \mathcal{S}_{PP} + \mathcal{S}_{PQ} \left[\tilde{S}^{(12)*} - \mathcal{S}_{QQ} \right]^{-1} \mathcal{S}_{QP} \tag{D.6}$$

o, de forma explícita,

$$\begin{aligned}
S' &= S_{PP} + \\
&\frac{1}{\Delta} \begin{bmatrix} S_{12}^{(1)}(\tilde{r}'^* - S_{22}^{(2)})S_{21}^{(1)} & -S_{12}^{(1)}\tilde{t}^*S_{31}^{(2)} & S_{12}^{(1)}(\tilde{r}'^* - S_{22}^{(2)})S_{23}^{(1)} & -S_{12}^{(1)}\tilde{t}^*S_{23}^{(2)} \\ -S_{12}^{(2)}\tilde{t}^*S_{21}^{(1)} & S_{12}^{(2)}(\tilde{r}^* - S_{22}^{(1)})S_{31}^{(2)} & -S_{12}^{(2)}\tilde{t}^*S_{23}^{(1)} & S_{12}^{(2)}(\tilde{r}^* - S_{22}^{(1)})S_{23}^{(2)} \\ S_{32}^{(1)}(\tilde{r}'^* - S_{22}^{(1)})S_{21}^{(1)} & -S_{32}^{(1)}\tilde{t}^*S_{31}^{(2)} & S_{23}^{(1)}(\tilde{r}'^* - S_{22}^{(2)})S_{32}^{(1)} & -S_{32}^{(1)}\tilde{t}^*S_{23}^{(2)} \\ -S_{32}^{(2)}\tilde{t}^*S_{21}^{(1)} & S_{32}^{(2)}(\tilde{r}^* - S_{22}^{(1)})S_{31}^{(2)} & -S_{32}^{(2)}\tilde{t}^*S_{23}^{(1)} & S_{32}^{(2)}(\tilde{r}^* - S_{22}^{(1)})S_{23}^{(2)} \end{bmatrix}
\end{aligned} \tag{D.7}$$

donde $\Delta = (\tilde{r}^* - S_{22}^{(1)})(\tilde{r}'^* - S_{22}^{(2)}) - (\tilde{t}^*)^2$

de donde obtenemos directamente las relaciones (4.4).