



**Universidad Autónoma de Baja California**  
**Facultad de Ingeniería, Arquitectura y Diseño**



Cálculo del coeficiente de transmisión electrónica a través  
de moléculas orgánicas.

Tesis profesional para obtener el título de

**Licenciado en Ingeniería en Nanotecnología**

Presenta:

**Adriana Denise Gutiérrez Hernández**

Director:

**Dr. Rubén César Villarreal Sánchez**

Facultad de Ingeniería, Arquitectura y Diseño, Programa de Bioingeniería,  
Universidad Autónoma de Baja California

Codirector:

**Dr. Hugo Alejandro Borbón Núñez**

Facultad de Ingeniería, Arquitectura y Diseño, Programa de Nanotecnología,  
Universidad Autónoma de Baja California



FACULTAD DE INGENIERÍA, ARQUITECTURA Y DISEÑO



**CÁLCULO DEL COEFICIENTE DE TRANSMISIÓN ELECTRÓNICA A TRAVÉS DE  
MOLECULAS ORGÁNICAS**

TESIS

PARA CUBRIR LOS REQUISITOS NECESARIOS PARA OBTENER EL TÍTULO DE  
**INGENIERO EN NANOTECNOLOGÍA**

PRESENTA

**ADRIANA DENISE GUTIÉRREZ HERNÁNDEZ**  
**362408**

A quien el Comité de Tesis autoriza el trabajo terminal, después de haber efectuado una revisión minuciosa del mismo y de acuerdo con el Art. 19 del R.G.E.P.E.P, las y los señores profesores emiten los siguientes votos aprobatorios mediante rubrica:

Dr. Rubén César Villarreal  
Sánchez  
**DIRECTOR**

Dr. Hugo Alejandro Borbón  
Núñez  
**CODIRECTOR**

Dr. Elmer Cruz Mendoza  
**SINODAL**

Dr. Priscy Alfredo Luque Morales  
**SINODAL**

Dr. Jorge Octavio Mata  
Ramírez  
**SINODAL**

**“Por la Realización Plena del Ser”**

## “Por la realización Plena del Ser”

Resumen de la tesis de Adriana Denise Gutiérrez Hernández como requisito parcial para obtención del título de Ingeniero en Nanotecnología.

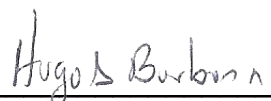
### Cálculo del coeficiente de transmisión electrónico a través de moléculas orgánicas

Resumen aprobado por:



---

Dr. Rubén César Villarreal Sánchez  
**Director**



---

Dr. Hugo Alejandro Borbón Nuñez  
**Codirector**

En este trabajo se analiza el transporte electrónico en una molécula de benceno unida a dos electrodos conectados en configuración *para*. El estudio se centra en comprender cómo las modificaciones locales en la energía del sitio, que presentan pozos o barreras de potencial, afectan la transmisión electrónica a través del anillo molecular mediante simulación de variaciones en uno o dos sitios atómicos, se evaluó el comportamiento de coeficiente de transmisión.

Los resultados mostraron que la introducción de perturbaciones positivas o negativas rompen la simetría molecular, generando efectos de interferencia cuántica que se manifiestan como resonancias y anti resonancias en los espectros de transmisión. Cuando la energía del sitio aumenta ( $\alpha > 0$ ), el átomo se comporta como una barrera de potencial, mientras que los valores negativos ( $\alpha < 0$ ), corresponden a pozos de potencial. En ambos casos, la onda electrónica experimenta desplazamientos de fase que modifican su propagación a través del sistema. El signo y la magnitud de la perturbación determinan la posición y el ancho de la anti resonancia.

**Palabras Clave:** Transporte electrónico, coeficiente de transmisión, moléculas orgánicas, interferencia cuántica, electrodos

Abstract of the thesis by Adriana Denise Gutiérrez Hernández as a partial requirement for obtaining the degree of Engineer in Nanotechnology.

## Calculation of the electronic transmission coefficient through organic molecules

Abstract approved by:



---

Dr. Rubén César Villarreal Sánchez  
**Director**



---

Dr. Hugo Alejandro Borbón Nuñez  
**Codirector**

This work analyzes electron transport in a benzene molecule bonded to two electrodes connected in a *para* configuration. The study focuses on understanding how local modifications in site energy, which present potential wells or barriers, affect electron transmission through the molecular ring. By simulating variations in one or two atomic sites, the transmission coefficient behavior was evaluated.

The results showed that the introduction of positive or negative perturbations breaks molecular symmetry, generating quantum interference effects that manifest as resonances and antiresonances in the transmission spectra. When the site energy increases to ( $\alpha > 0$ ), the atom behaves as a potential barrier, while negative values ( $\alpha < 0$ ) correspond to potential wells. In both cases, the electron wave experiences phase shifts that modify its propagation through the system. The sign and magnitude of the perturbation determine the position and width of the antiresonance.

**Keywords:** Electron transport, transmission coefficient, organic molecules, quantum interference, electrodes

## **Agradecimientos y Dedicatorias**

Dedico esta tesis a mis padres José Gutiérrez y Adriana Hernández, quiero expresar mi más profundo agradecimiento a ellos, por su amor incondicional, su apoyo constante y por enseñarme el valor del esfuerzo, la perseverancia y la honestidad. Gracias por creer siempre en mí y acompañarme en cada paso de este camino, incluso en los momentos más difíciles.

Quiero agradecer a mi director, él Dr. Ruben Villarreal y al codirector, él Dr. Hugo Borbón por su guía, paciencia y dedicación. Su orientación académica y personal, su confianza y compañía fueron pilares esenciales para el desarrollo de este trabajo. A mi comité, él Dr. Jorge Mata, él Dr. Elmer Cruz y él Dr. Priscy Luque, por su tiempo, guía y aportaciones que enriquecieron el contenido y la calidad de este trabajo.

Extiendo mi sincero agradecimiento a mis amigos, Keren Hapuc, Andrea Velasco, Valeria Sepulveda, zurisaday Retamoza, Julian Bolaños, Humberto Perez y sobre todo a mi tía Nayeli Gutierrez, por su compañía, palabras de aliento y por recordarme a cada instante de lo que soy capaz. Su presencia fue fundamental para mantener el equilibrio entre el trabajo y la vida, y por eso les estaré siempre agradecida.

A mis compañeros de carrera y personas que formaron parte de este proceso, por compartir momentos, alentarme todo el tiempo a poder concluir este trabajo. Hicieron de esta etapa más significativa durante mi formación profesional Finalmente a Ramse Huizar por su compañía durante todo este proceso, por impulsarme e inspirarme para poder concluir este trabajo. Gracias por celebrar conmigo cada pequeño logro y por recordarme que todo esfuerzo vale la pena.

A todos ustedes, gracias por ser parte de este logro.

# Índice

<b>Resumen</b>	<b>3</b>
<b>Capítulo 1: Introducción</b>	<b>5</b>
1.1. Hipótesis	6
1.2. Objetivos	6
<b>Capítulo 2: Marco Teórico</b>	<b>7</b>
2.1. Contexto experimental	7
2.3. Función de Green	10
2.4. Ecuación de Lippmann-Schwinger	12
2.5. Molécula de Benceno	13
<b>Capítulo 3: Metodología</b>	<b>16</b>
3.1. Estructura del benceno	16
3.2. Renormalización de la molécula	17
3.2.1. Caso simétrico	17
3.2.2. Caso asimétrico en un átomo	22
3.2.3. Caso asimétrico en dos átomos	24
3.3. Coeficiente de transmisión	26
3.4. Corriente eléctrica	28
<b>Capítulo 4: Resultados y discusión</b>	<b>30</b>
4.1. Sistema simétrico	30
4.2. Sistema asimétrico en un átomo	32
4.2.1. Energía de sitio positiva	32
4.2.2. Energía de sitio negativa	37
4.3. Sistema asimétrico en dos átomos	42
4.3.1. Energías de sitio positivas	42
4.3.2. Energías de sitio negativas	47
<b>Capítulo 5: Conclusión</b>	<b>52</b>
<b>Anexo 1</b>	<b>54</b>
<b>Anexo 2</b>	<b>68</b>
<b>Anexo 3</b>	<b>82</b>
<b>Anexo 4</b>	<b>96</b>
<b>Bibliografía</b>	<b>107</b>

# Capítulo 1: Introducción

A lo largo de la historia, la evolución de la tecnología ha buscado miniaturizar los dispositivos sin perder su funcionalidad y al mismo tiempo, hacerlos más eficientes. Desde la invención del transistor en 1947, se dio el inicio de la era de la microelectrónica, hasta la actualidad con los circuitos integrados a nanoescala. Esta búsqueda constante de la miniaturización ha sido un motor clave para el desarrollo de nuevas tecnologías. Sin embargo, esta tendencia ha llegado a un límite en la electrónica tradicional basada en semiconductores, lo que ha dado paso a la exploración de nuevos enfoques alternativos, como la electrónica molecular [1]. Este campo emergente propone el uso de moléculas como componentes activos en dispositivos electrónicos, lo que representa una nueva frontera entre la computación y la nanotecnología [2].

En los últimos años, la nanotecnología ha sido un motor en diversos campos científicos y tecnológicos, impulsando el desarrollo de nuevos dispositivos con aplicaciones innovadoras. Dentro de este contexto, la electrónica molecular ha emergido como un área de gran interés, pues permite la extrema miniaturización de dispositivos electrónicos mediante el uso de moléculas como componentes activos. [3]. Esta nueva área busca la comprensión y el control del transporte electrónico a nivel molecular, abriéndole paso a nuevas posibilidades en el diseño de circuitos y materiales con propiedades únicas [4].

Uno de los problemas más estudiados dentro de la electrónica molecular es el transporte electrónico a través de moléculas orgánicas, específicamente las que cuentan con una estructura conjugada, como el benceno. Esto, debido a su estabilidad química, estructura simétrica y sus orbitales  $\pi$  deslocalizados. El benceno es un candidato ideal para el estudio del transporte electrónico a escala molecular [5]. Sin embargo, la conductancia de estas moléculas depende fuertemente de la geometría de conexión con los electrodos, lo que introduce efectos cuánticos como la interferencia electrónica y el efecto túnel cuántico [6].

## 1.1. Hipótesis

La perturbación de la energía de sitio de un átomo en la molécula de benceno, conectada a electrodos en posición *para*, permitirá controlar la interferencia cuántica en el anillo bencénico.

## 1.2. Objetivos

### Objetivo general:

Calcular el coeficiente de transmisión a través de una molécula de benceno, conectada a electrodos moleculares en posición *para*, considerando la posibilidad de modificar la energía de sitio de un átomo particular.

### Objetivos específicos:

- Calcular el coeficiente de transmisión electrónica a través de una molécula de benceno con electrodos moleculares en posición *para*.
- Calcular el coeficiente de transmisión electrónica a través de una molécula de benceno con electrodos moleculares en posición *para*, con la modificación de la energía de sitio de un átomo del anillo.
- Calcular el coeficiente de transmisión electrónica a través de una molécula de benceno con electrodos moleculares en posición *para*, con la modificación de la energía de sitio de dos átomos en la misma rama del anillo.

Este estudio no solo contribuirá a la comprensión fundamental del transporte electrónico a través de moléculas individuales, sino que también puede tener implicaciones en el diseño de dispositivos electrónicos a nanoescala, tales como interruptores moleculares, sensores y componentes lógicos basados en principios cuánticos

## Capítulo 2: Marco Teórico

### 2.1. Contexto experimental

Para el estudio del transporte electrónico a través de una molécula de benceno, se propuso un arreglo experimental simplificado que representa la unión de una molécula conectada a dos electrodos metálicos en un medio de vacío. Estas condiciones eliminan toda interacción con el entorno, como solventes o impurezas, lo que permite centrarse en los efectos cuánticos intrínsecos del sistema electrodo-molécula-electrodo [10].

Los arreglos experimentales típicos para este tipo de sistemas consisten en dos electrodos metálicos, específicamente de oro (Au) debido a su estabilidad química y buena conductividad del material, entre los cuales se sitúa una molécula de benceno. Los electrodos actúan como un fuente de electrones y están separados por una distancia tal que la molécula queda suspendida en el vacío, sin soporte adicional ni medio dieléctrico [7] [10].

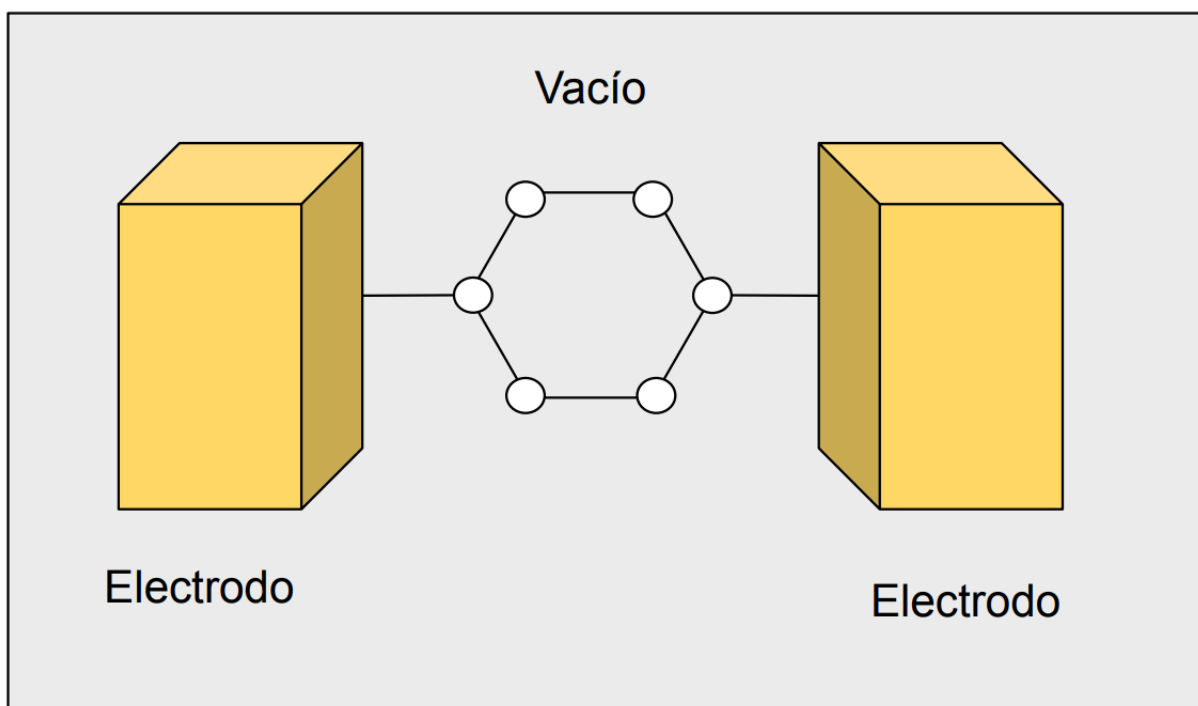


Figura 1. Arreglo experimental

La conexión entre la molécula y los electrodos se hace en una posición específica del anillo de benceno, siendo en este caso la configuración *-para-* la única considerada

para el estudio. Esta configuración influye directamente en la simetría de los orbitales  $\pi$  del benceno. La elección de esta geometría se debe a su simetría y a su gran relevancia en estudios previos de transporte molecular, lo cual permite enfocar el análisis en los efectos específicos de esta orientación sobre la transmisión electrónica.

Con el fin de desarrollar un modelo de la transmisión electrónica, la interacción entre la molécula y los electrodos se representan mediante parámetros de acoplamiento electrónico, los cuales determinan la eficiencia con la que los electrones pueden entrar y salir de la molécula [7].

El vacío como medio permite la dispersión inelástica y los efectos de polarización inducida por el entorno, lo cual favorece el análisis puro del transporte coherente. Esta condición ideal también permite considerar con mayor precisión que los electrones atraviesan la molécula sin pérdida de fase [4].

Durante el estudio, se aplica un potencial eléctrico entre los electrodos y se evalúa el coeficiente de transmisión resultante utilizando herramientas teóricas como la función de Green y la ecuación de Lippmann-Schwinger, con el objetivo de relacionarlo con la corriente eléctrica [4].

## 2.2. Formalismo de Landauer-Büttiker

En la electrónica convencional, el transporte de corriente eléctrica a través de un conductor se describe por la ley de Ohm, la cual establece que la corriente  $I$  es directamente proporcional a la diferencia de potencial  $V$  aplicada y está determinada por la resistencia  $R$  del material [11].

$$I = \frac{V}{R} \quad (3.1)$$

En el caso de la transferencia electrónica en moléculas, el formalismo de Landauer-Büttiker permite analizar cómo la conductancia varía según la posición de conexión de la molécula de benceno a los electrodos [4].

Los conceptos que se toman en cuenta en este formalismo es el coeficiente de transmisión  $T(E)$ , que representa la probabilidad de que un electrón con energía  $E$  atraviese el sistema desde un electrodo a otro. Este depende de la estructura electrónica de la molécula y del acoplamiento de los electrodos [4] [8].

La distribución de Fermi-Dirac  $f(E)$  describe la ocupación electrónica en los electrodos en función de la temperatura y el potencial aplicado. Para dos electrodos con una diferencia de potencial, las distribuciones de Fermi  $f(E)$  en cada uno determina el flujo neto de electrones [4] [12].

Para obtener la corriente eléctrica  $I$  se integra el coeficiente de transmisión ponderado por la diferencia en las distribuciones de Fermi-Dirac de los electrodos

$$I = \frac{2e}{h} \int_{-\infty}^{\infty} T(E) [f_L(E) - f_R(E)] dE \quad (3.2)$$

donde:

- $e$  es la carga del electrón,
- $h$  es la constante de Planck,
- $f_L(E)$  y  $f_R(E)$  es la distribución de Fermi en los electrodos izquierdo y derecho, respectivamente.

Factores como la interferencia cuántica y la alineación de los niveles energéticos afectan directamente el coeficiente de transmisión  $T(E)$ , influyendo en la corriente medida [9].

### 2.3 Modelo de amarre fuerte (tight binding)

El modelo de amarre fuerte es una aproximación teórica utilizada para describir el comportamiento en electrones en sólidos, moléculas y nanoestructuras [25]. Se basa en que los electrones están fuertemente localizados alrededor de los átomos y que su movimiento en el sistema ocurre principalmente debido al traslape de función de onda con los átomos vecinos [23].

Cada átomo aporta un conjunto de orbitales localizados. El electrón se encuentra confinado en los sitios atómicos, pero tiene una probabilidad de “saltar” (hopping) hacia un átomo vecino. Este salto está descrito por parámetros de transferencia ( $\beta$ ) [24]. Básicamente el modelo considera que el electrón “salta” de un sitio a otro en la molécula, conservando la coherencia cuántica de su función de onda [26].

En el caso de moléculas con enlaces  $\pi$  conjugados, este modelo es útil porque los saltos electrónicos ( $\beta$ ) describen el acoplamiento entre orbitales  $p_z$  de carbonos adyacentes [24]. El Hamiltoniano del sistema en el modelo de amarre fuerte se describe como:

$$H(j, i) = \alpha_i + 2\beta \quad \text{si } i = j \quad (3.3)$$

$$= -\beta \quad \text{si } i \text{ y } j \text{ son primeros vecinos}$$

$$= 0 \quad \text{en cualquier otro caso}$$

La estructura de benceno se traduce en un Hamiltoniano de 6 sitios (átomos) conectados en un anillo, lo que permite calcular los niveles de energía y la transmisión electrónica cuando se conectan electrodos[4][22].

### 2.3. Función de Green

Calcular el transporte eléctrico en sistemas complejos, como las moléculas orgánicas, a partir de la ecuación de Schrödinger no puede resolverse de manera analítica debido a la complejidad estructural y la cantidad de interacciones electrónicas involucradas. Por ello, es necesario recurrir a métodos numéricos que permiten aproximar las soluciones y modelar el comportamiento cuántico del sistema. Estos métodos proporcionan una forma práctica de estudiar el transporte electrónico, considerando las condiciones reales de acoplamiento, potenciales locales y efectos de interferencia cuántica.

La función de Green permite describir la respuesta de un sistema ante una excitación localizada, ya sea en su interior o en sus límites. Este enfoque es fundamental para el estudio del transporte electrónico, ya que proporciona una forma directa de obtener las amplitudes de transmisión y reflexión del sistema a partir de su estructura energética y los acoplamientos con los electrodos. En este trabajo, se emplea el formalismo de la función de Green para analizar la respuesta del sistema ante una onda incidente y evaluar el comportamiento del transporte electrónico a través de la molécula de benceno bajo diferentes condiciones energéticas [4] [12].

Si una respuesta  $R$  está relacionada con una excitación  $S$  mediante un operador diferencial  $D$  en la forma [4]:

$$D_{op} R = S \quad (3.4)$$

entonces es posible introducir una función de Green  $G$ , con la cual la respuesta se puede expresar como:

$$R = D_{op}^{-1} S = GS \quad (3.5)$$

donde:  $G = D_{op}^{-1}$ . En el contexto de transporte cuántico, esto se traduce en la ecuación:

$$[E - H_{op}]\Psi = S \quad (3.6)$$

donde  $\Psi$  es la función de onda y  $S$  es una fuente de excitación debido a una onda incidente en uno de los electrodos del sistema. Así, la función de Green toma la forma:

$$G = [E - H_{op}]^{-1} \quad (3.7)$$

donde  $H_{op}$  es el operador Hamiltoniano dado por:

$$H_{op} = \frac{(i\hbar\nabla + eA)^2}{2m} + V(r) \quad (3.8)$$

Para simplificar el análisis, se considera un sistema unidimensional con potencial constante  $V_0$  y sin campo magnético ( $A = 0$ ). La función de Green entonces se reescribe como:

$$G = \left[ E - V_0 + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \right]^{-1} \quad (3.9)$$

y satisface la ecuación:

$$\left[ E - V_0 + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \right] G(x, x_0) = \delta(x - x_0) \quad (3.10)$$

La cual es similar a la ecuación de Schrödinger:

$$\left[ E - V_0 + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \right] \Psi(x) = 0 \quad (3.11)$$

con la diferencia de que en la ecuación de Green aparece un término fuente. En este contexto,  $G(x, x_0)$  representa la función de onda resultante en el punto  $x$  ante una excitación puntual en  $x_0$ .

Este sistema se puede discretizar espacialmente, lo que permite obtener una forma matricial:

$$(E - H)G(i, j) = \delta(i, j) \quad (3.12)$$

Esta discretización, conocida como la aproximación de amarre fuerte (*tight binding*), aporta simplicidad y flexibilidad en el estudio de propiedades electrónicas en sistemas complejos como las moléculas [4] [13].

## 2.4. Ecuación de Lippmann-Schwinger

La ecuación de Lippmann-Schwinger describe la dispersión de partículas en mecánica cuántica y se deriva a partir de la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo para una partícula sin espín en un potencial unidimensional  $V(x)$ , es decir,

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\Psi(x)}{dx^2} + V(x)\Psi(x) = E\Psi(x), \quad (3.13)$$

donde  $V(x)$  se considera positivo para evitar la existencia de estados ligados.

En regiones donde  $V(x) = 0$ , la solución general  $\Psi(x)$  Es una combinación lineal de ondas planas.

Una elección conveniente de la onda incidente es

$$\phi_s(E; x) = \frac{e^{iskx}}{\sqrt{2\pi\hbar \frac{k}{m}}} \quad (3.14)$$

donde  $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ ,  $k > 0$  es el número de onda, y  $s = \pm 1$  indica la dirección de propagación (izquierda o derecha).

Esta función de onda satisface la ecuación sin perturbar

$$(E - \hat{H}_0)\phi_s(E; x) = 0 \quad (3.15)$$

siendo el operador de energía cinética:

$$\hat{H}_0 = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \quad (3.16)$$

La ecuación de Schrödinger completa se puede reescribir como:

$$(E - \hat{H}_0)\Psi(x) = V(x)\Psi(x) \quad (3.17)$$

permitiendo tratar el lado derecho como una fuente inhomogénea.

A partir de esto, se define la función de Green sin perturbar  $G_0^\pm(x, x')$  la cual satisface:

$$(E - \hat{H}_0 \pm i\epsilon)G_0^\pm(x, x') = \delta(x, x') \quad (3.18)$$

el término  $\pm i\epsilon$ , donde  $\epsilon$  representa un numero positivo infinitesimal cuya función es selecciona las condiciones de frontera adecuadas del sistema. El termino  $\pm i\epsilon$  en conjunto define en función de Green (ondas salientes o entrantes). Así, la función de

onda total  $\Psi_s^{(\pm)}(x)$ , que representa una onda incidente más la onda dispersada por el potencial, puede escribirse mediante la ecuación integral de Lippmann-Schwinger:

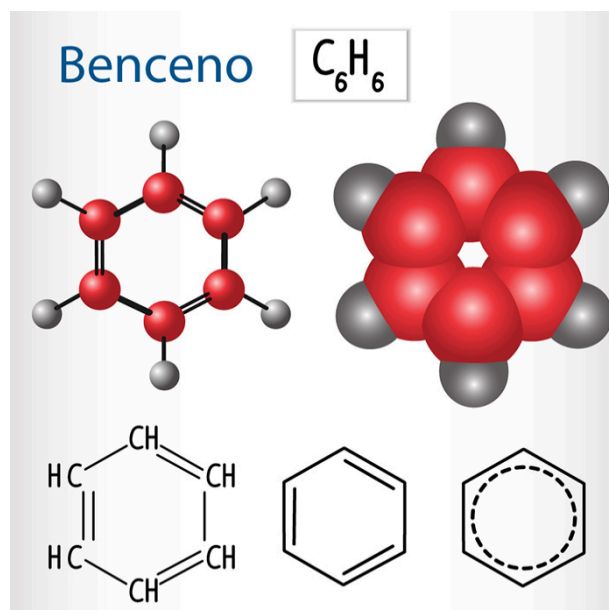
$$\Psi_s^{(\pm)}(x) = \phi_s(E; x) + \int_{-\infty}^{+\infty} G_0^\pm(x, x')V(x')\Psi_s^{(\pm)}(x')dx' \quad (3.19)$$

Esta formulación es esencial para describir fenómenos de dispersión en sistemas unidimensionales, como los que se encuentran en dispositivos nanométricos, donde el potencial  $V(x)$  representa la presencia de moléculas, nanopartículas o regiones confinadas que alteran la propagación de una partícula cuántica incidente [4] [14]

## 2.5. Molécula de Benceno

La molécula de benceno está constituida por un anillo hexagonal con seis átomos de carbono, cada uno está unido a un átomo de hidrógeno, con enlaces entre carbonos que muestran enlaces simples y dobles alternados. O

El benceno tiene una estructura plana y altamente simétrica. Todos los ángulos que se forman entre los átomos de carbono son de  $120^\circ$  y la longitud de enlace carbono-carbono es idéntica, contrastando con las longitudes típicas de enlaces simples y dobles. Estas equivalencias en las longitudes de enlace se explica por la deslocalización de los electrones  $\pi$  a lo largo del anillo [15].



**Figura 2:** Molécula de benceno

Doljanin, G. (s/f). Elbibliote.com. Elbibliote.com. Recuperado el 10 de junio de 2025, de

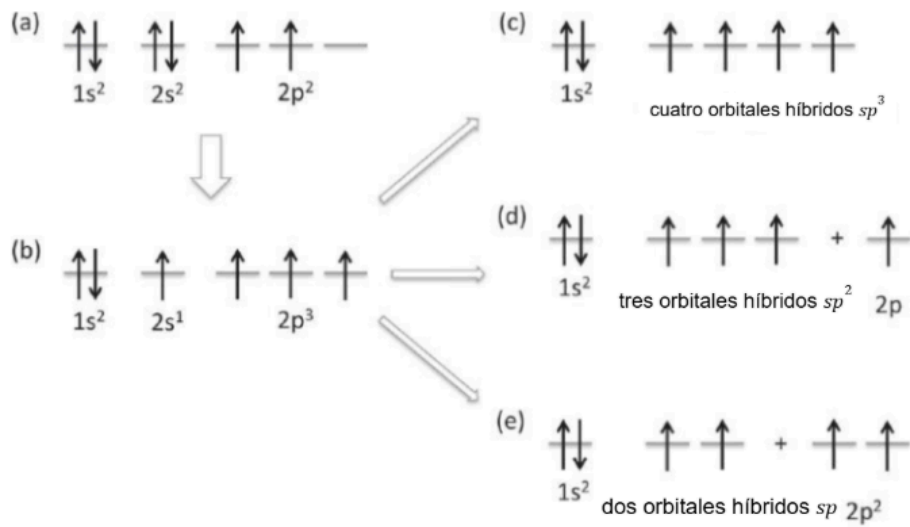
<https://elbibliote.com/>

Con número atómico 6, el carbono posee seis electrones distribuidos en su estado fundamental  $1s^2 2s^2 2p^2$ . Esto nos dice que dos electrones ocupan el orbital  $1s$ , dos están apareados en el orbital  $2s$  y los dos restantes se ubican desapareados en el orbital  $2p$ , siguiendo la regla de Hund [16]. Esta configuración, en principio, solo permite la formación de dos enlaces covalentes, ya que únicamente hay dos electrones desapareados.

Sin embargo, experimentalmente se observa que el carbono es tetravalente, es decir, que puede formar cuatro enlaces covalentes, como ocurre en el metano ( $CH_4$ ). Esta propiedad se explica mediante el concepto de estado excitado, donde los electrones del orbital  $2s$  se promueve a un orbital  $2p$  vacío, resultando en cuatro electrones desapareados disponibles para formar enlaces [18].

Para justificar la equivalencia geométrica y energética de estos enlaces, se recurre al concepto de hibridación de orbitales atómicos, mediante el cual los orbitales  $s$  y  $p$  se combinan para formar orbitales híbridos como se muestra en la figura 3.

En la hibridación  $sp^3$  se forman cuatro orbitales híbridos equivalentes con geometría tetraédrica y ángulo de enlace de  $109.5^\circ$ , cada uno participando en un enlace sigma ( $\sigma$ ). En la hibridación  $sp^2$  tres orbitales híbridos se disponen en un plano con geometría trigonal plana, mientras que un orbital  $p$  no híbrido forma un enlace  $\pi$  lateral con otro carbono, formando un doble enlace. En la hibridación  $sp$  se forman dos orbitales híbridos lineales y dos orbitales  $p$  perpendiculares que se solapan para generar dos enlaces  $\pi$ , resultando en triple enlace [17].



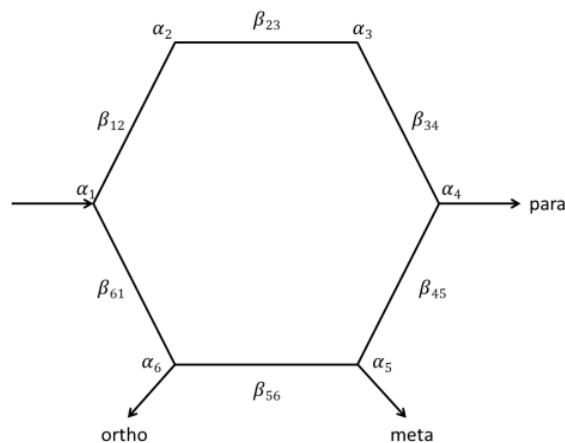
**Figura 3. Configuraciones electrónicas del carbono: (a) estado fundamental; (b) estado excitado; (c) hibridación  $sp^3$ ; (d) hibridación  $sp^2$ ; y (e) hibridación  $sp$  [17].**

La estructura electrónica del benceno lo convierte en un sistema modelo ideal para estudiar el transporte electrónico a escala molecular. Debido a sus orbitales  $\pi$  deslocalizados permite una propagación eficiente de carga cuando este se encuentra conectado a electrodos externos [19].

# Capítulo 3: Metodología

## 3.1. Estructura del benceno

La figura 4 representa el modelo simplificado de una molécula de benceno usando el enfoque de amarre fuerte (tight-binding), en el que solo se consideran los orbitales  $\pi$  de los seis átomos de carbono que forman el anillo. En el modelo cada vértice del hexágono representa un sitio atómico, con energía ( $\alpha_i$ ) correspondiente al orbital ( $p_z$ ) de un carbono, y cada línea que los une, representa el acoplamiento entre los sitios vecinos, con un parámetro de interacción  $\beta$  [17].



**Figura 4.** Diagrama de la molécula de benceno con sus diferentes conexiones de terminales [19].

Con cada sitio se asocia una energía atómica, mientras que los enlaces representan la energía de transferencia electrónica entre cada sitio adyacente. Este modelo facilita comprender cómo es que se propagan los electrones deslocalizados en la estructura de benceno [2].

Este sistema se comprende de tres posibles configuraciones de conexión a los electrodos externos.

- Orto: los electrodos se conectan en sitios adyacentes. Esta conexión es un acoplamiento directo pero asimétrico.

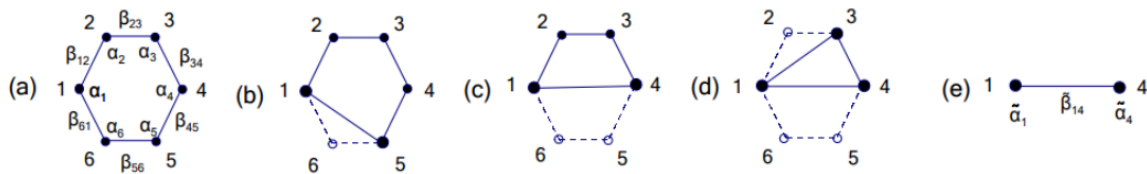
- Meta: la conexión es a través de dos enlaces intermedios. Por la misma configuración presenta interacción destructiva por lo que reduce la conductancia.
- Para: esta conexión es diametralmente opuesta, simétrica respecto al centro por lo que tiende a favorecer la interferencia constructiva, siendo la más efectiva para la conductancia [13] [19].

### 3.2. Renormalización de la molécula

#### 3.2.1. Caso simétrico

Los sistemas moleculares suelen ser complejos al momento de intentar resolverlos de manera analítica, es por ello que se opta por renormalizar el sistema del anillo bencénico a un dímero efectivo por el cual se puede obtener una ecuación para el coeficiente de transmisión  $T(E)$ , el cual puede relacionarse con el cálculo de corriente eléctrica [13][20] [21].

De forma esquemática, en la figura 4 se muestra el proceso de renormalización, donde una molécula de benceno se renormaliza a un dímero efectivo, en el cuál es posible calcular el coeficiente de transmisión.



**Figura 4.** Esquema de la renormalización de una molécula de benceno con terminales en posición *para*, a un dímero efectivo. Las líneas punteadas con círculo abierto representan los átomos ya eliminados en la renormalización, donde  $\alpha$  representa las energías de sitio y  $\beta$  representa las energías de enlace [13].

El método de renormalización del anillo bencénico se basa en utilizar la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo, en términos de la función de Green de forma matricial [13]:

$$(E - \alpha_m)G_{mn} = \delta_{mn} + \sum_k \beta_{mk} G_{kn} \quad (4.1)$$

donde  $\alpha_m$  representa la energía atómica en el sitio  $m$  y  $\beta_{mk}$  la energía de enlace (hopping) entre los sitios  $m$  y  $k$ .

Para ilustrar este método, se expande la ecuación (4.1) para todos los sitios que representan los 6 átomos de carbono en la molécula de benceno, con lo cual se obtiene:

$$(E - \alpha_1)G_{11} = 1 + \beta_{12}G_{21} + \beta_{16}G_{61} \quad m = n = 1 \quad (4.2)$$

$$(E - \alpha_6)G_{66} = 1 + \beta_{16}G_{61} + \beta_{56}G_{65} \quad m = n = 6 \quad (4.3)$$

$$(E - \alpha_5)G_{55} = 1 + \beta_{54}G_{45} + \beta_{56}G_{65} \quad m = n = 5 \quad (4.4)$$

$$(E - \alpha_1)G_{16} = \beta_{12}G_{21} + \beta_{15}G_{56} \quad m = 1, n = 6 \quad (4.5)$$

$$(E - \alpha_1)G_{15} = \beta_{12}G_{25} + \beta_{16}G_{65} \quad m = 1, n = 5 \quad (4.6)$$

$$(E - \alpha_6)G_{61} = \beta_{61}G_{11} + \beta_{65}G_{51} \quad m = 6, n = 1 \quad (4.7)$$

$$(E - \alpha_6)G_{65} = \beta_{61}G_{15} + \beta_{65}G_{55} \quad m = 6, n = 5 \quad (4.8)$$

$$(E - \alpha_5)G_{51} = \beta_{54}G_{41} + \beta_{56}G_{61} \quad m = 5, n = 1 \quad (4.9)$$

$$(E - \alpha_5)G_{56} = \beta_{54}G_{46} + \beta_{56}G_{66} \quad m = 5, n = 6 \quad (4.10)$$

En el desarrollo anterior se utilizó la condición de transporte electrónico a primeros vecinos, de modo que, por ejemplo  $\beta_{13} = \beta_{31} = 0$ , y de la misma forma para sitios que no sean adyacentes.

De esta forma es posible obtener  $G_{61}$  de (4.7) :

$$G_{61} = (E - \alpha_6)^{-1} \left\{ \beta_{61}G_{11} + \beta_{65}G_{51} \right\} \quad (4.11)$$

y sustituirla en (4.2), de modo que se obtiene:

$$\left[ E - \alpha_1 - \frac{\beta_{16}\beta_{61}}{(E-\alpha_6)} \right] G_{11} = 1 + \beta_{12}G_{21} + \frac{\beta_{16}\beta_{65}}{(E-\alpha_6)} G_{51} \quad (4.12)$$

$$\text{si se define: } \alpha_1^I = \alpha_1 + \frac{\beta_{12}^2}{(E-\alpha_6)} \quad (4.13)$$

$$\beta_{15}^I = \frac{\beta_{16}\beta_{65}}{(E-\alpha_6)} \quad (4.14)$$

la ecuación 4.12 se puede reescribir como:

$$(E - \alpha_1^I)G_{11} = 1 + \beta_{12}G_{21} + \beta_{15}^I G_{11} \quad (4.15)$$

Si ahora se despeja  $G_{65}$  de (4.8) se obtiene:

$$G_{65} = (E - \alpha_6)^{-1} \{ \beta_{61}G_{15} + \beta_{65}G_{55} \} \quad (4.16)$$

la cual puede ser sustituida en (4.4) para después obtener:

$$\left[ E - \alpha_5 - \frac{\beta_{56}\beta_{65}}{(E-\alpha_6)} \right] G_{55} = 1 + \beta_{54}G_{45} + \frac{\beta_{56}\beta_{61}}{(E-\alpha_6)} G_{15} \quad (4.17)$$

Si se define:  $\alpha_5^I = \alpha_5 + \frac{\beta_{56}^2}{(E-\alpha_6)}$  (4.18)

$$\beta_{51}^I = \frac{\beta_{56}\beta_{61}}{(E-\alpha_6)} \quad (4.19)$$

se obtiene:  $(E - \alpha_5^I)G_{55} = 1 + \beta_{54}G_{45} + \beta_{51}^I G_{15}$  (4.20)

De (4.10) se despeja para  $G_{66}$  obteniendo  $G_{66} = \frac{1}{\beta_{56}} \{ (E - \alpha_5)G_{56} - \beta_{54}G_{46} \}$ , la cual se sustituye en (4.3) y al mismo tiempo se usa la ecuación (4.16) para definir  $G_{65}$  en términos de  $G_{15}$  y  $G_{55}$ . También se aplicó el conjugado (\*) y el adjunto (†).

Finalmente se obtiene:

$$(E - \alpha_5) \frac{\beta_{61}}{\beta_{51}} (G_{51}^\dagger)^* + (E - \alpha_5)G_{55} - \frac{(E-\alpha_6)\beta_{54}}{\beta_{56}} G_{46} = 1 + \beta_{61} \left\{ (E - \alpha_6)^{-1} (\beta_{61}G_{11} + \beta_{65}G_{51}) \right\} + \beta_{56} \quad (4.21)$$

Si se despeja  $G_{66}$  de (4.3) y se sustituye la ecuación (4.21), se define  $x = \frac{E-\alpha}{\beta}$ , y se obtiene finalmente:

$$G_{66} = (E - \alpha_6)^{-1} + x^{-2}G_{11} + x^{-2}G_{55} + x^{-2}(G_{51}^\dagger)^* + x^{-2}(G_{55}^\dagger)^* \quad (4.22)$$

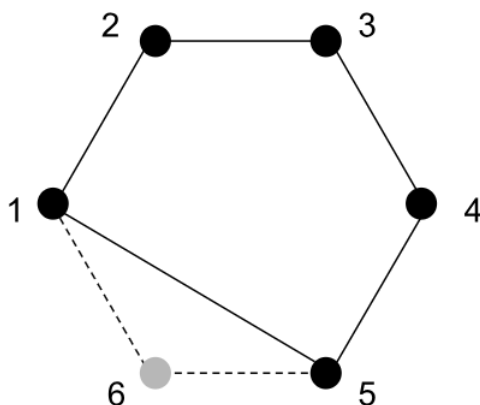
Las ecuaciones renormalizadas obtenidas en este primer paso son:

$$\bullet \alpha_1^I = \alpha_1 + \frac{\beta_{16}^2}{(E - \alpha_6)} \quad (4.23)$$

$$\bullet \alpha_5^I = \alpha_5 + \frac{\beta_{56}^2}{(E - \alpha_6)} \quad (4.24)$$

$$\bullet \beta_{15}^I = \frac{\beta_{16}\beta_{56}}{(E - \alpha_6)} \quad (4.25)$$

Con lo que se ha eliminado el átomo 6 de la molécula de benceno, y su información se ha transferido de forma efectiva a la nueva energía de sitio ( $\alpha_1^I, \alpha_5^I$ ) que adquieren los átomos adyacentes (1 y 5), y a la energía de traslape (hopping) entre ellos ( $\beta_{15}^I$ ).



**Figura 5:** Eliminación del átomo 6 en la primera normalización

En las siguientes renormalizaciones de la molécula se aplicó la misma metodología. A continuación se presentan las ecuaciones para la energía de sitio y la energía de traslape en cada renormalización hasta llegar a las ecuaciones del dímero efectivo.

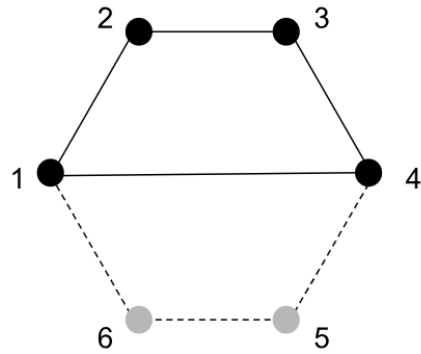
De esta forma, en la segunda renormalización de parámetros efectivos para eliminar el tomo 5, se expandió (4.1) para los sitios 1, 4 y 5, con lo cual se obtienen las ecuaciones:

$$\bullet \alpha_1^{\text{II}} = \alpha_4^{\text{II}} = \alpha + \beta x(x^2 - 1)^{-1} \quad (4.26)$$

$$\bullet \beta_{41}^{\text{II}} = \beta_{14}^{\text{II}} = \beta(x^2 - 1)^{-1} \quad (4.27)$$

$$\text{donde } x = \frac{E - \alpha}{\beta}$$

En las ecuaciones anteriores, el superíndice en la energía de sitio ( $\alpha$ ) y en la energía de traslape ( $\beta$ ) representa la etapa de renormalización.



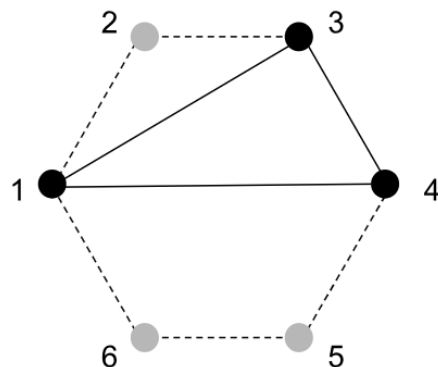
**Figura 6:** Eliminación del átomo 5 en la segunda normalización

En la tercera renormalización de parámetros efectivos para eliminar el átomo 2, se expandió(4.1) para los sitios 1, 2 y 3, obteniendo las ecuaciones:

- $\alpha_1^{\text{III}} = \alpha + \beta x \left( \frac{2x^2 - 1}{x^2(x^2 - 1)} \right)$  (4.28)

- $\alpha_3^{\text{III}} = \alpha + \beta x^{-1}$  (4.29)

- $\beta_{13}^{\text{III}} = \beta x^{-1}$  (4.30)



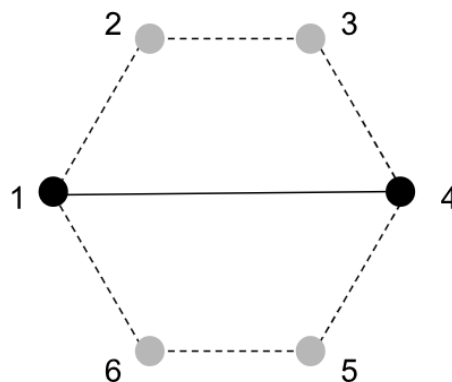
**Figura 7:** Eliminación del átomo 2 en la tercera normalización

En la cuarta renormalización de parámetros efectivos para eliminar el átomo 3, se expandió (4.1) para los sitios 1, 3 y 4, obteniendo las ecuaciones:

- $\alpha_1^{IV} = \alpha_4^{IV} = \alpha + \beta_{14}^{IV}x$

$$(4.31) \beta_{14}^{IV} = \beta_{41}^{IV} = 2\beta(x^2 - 1) - 1$$

$$(4.32)$$



**Figura 8:** Eliminación del átomo 3 en la cuarta normalización

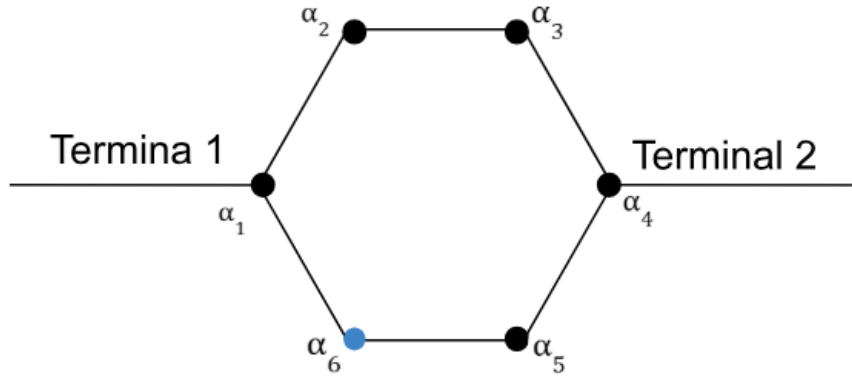
Durante todo el procedimiento se consideró que todas las  $\alpha$  tienen el mismo valor y todas las  $\beta$  también son equivalentes, como en la molécula de benceno.

### 3.2.2. Caso asimétrico en un átomo

Si la energía de sitio de un átomo particular de la molécula de benceno es diferente al resto de los átomos, por ejemplo, debido al efecto de un campo eléctrico localizado generado por la proximidad de una punta de un microscopio de efecto túnel (STM, Scanning Tunneling Microscope), se debe distinguir la energía de sitio de ese átomo del resto de la molécula.

El STM es un instrumento que permite obtener imágenes de la superficie de los materiales con resolución atómica, utilizando una punta conductora extremadamente fina que se aproxima a distancias del orden de los angstroms. Cuando la punta se coloca muy cerca de la superficie, los electrones pueden “tunelizar” a través del vacío entre la muestra y la punta, generando una corriente sensible a la densidad local de estados electrónicos. Esta interacción puede modificar ligeramente el potencial local del átomo más cercano, alterando su energía de sitio.

En este trabajo, dicha situación se modela considerando que la energía de sitio del átomo 6 ( $\alpha_6$ ) es diferente al resto de los átomos del anillo de benceno ( $\alpha$ ), representando el efecto de la perturbación localizada inducida por la punta del STM.



Realizando el mismo procedimiento de renormalización que en el caso simétrico discutido en la sección anterior, la eliminación efectiva del átomo 6 lleva a las siguientes ecuaciones para las energías de sitio efectivas ( $\alpha_1^I$ ,  $\alpha_5^I$ ) y la energía de traslape ( $\beta_{15}^I$ ) de los átomos contiguos al átomo 6 (átomos 1 y 5). Las ecuaciones obtenidas son:

- $$\alpha_1^I = \alpha_1 + \frac{\beta_{16}^2}{(E - \alpha_6)} \quad (4.33)$$

- $$\alpha_5^I = \alpha_5 + \frac{\beta_{56}^2}{(E - \alpha_6)} \quad (4.34)$$

- $$\beta_{15}^I = \frac{\beta_{16}\beta_{56}}{(E - \alpha_6)} \quad (4.35)$$

si definimos:

$$\alpha_1^{\text{II}} = \alpha_1^I + \frac{\beta_{15}^I \beta_{51}^I}{(E - \alpha_5^I)} \quad (4.35)$$

$$\beta_{14}^{\text{II}} = \frac{\beta_{15}^I \beta_{54}^I}{(E - \alpha_5^I)} \quad (4.37)$$

En esta renormalización se obtuvieron las ecuaciones:

$$\bullet \alpha_1^{\text{II}} = \alpha + \beta x (xx_6 - 1)^{-1} \quad (4.38)$$

$$\bullet \alpha_4^{\text{II}} = \alpha + \beta x_6 (xx_6 - 1)^{-1} \quad (4.39)$$

$$\bullet \beta_{41}^{\text{II}} = \beta_{14}^{\text{II}} = \beta (xx_6 - 1)^{-1} \quad (4.40)$$

$$\text{donde } x_6 = \frac{E - \alpha_6}{\beta}, \quad x = \frac{E - \alpha}{\beta}$$

Para la renormalización de parámetros efectivos para eliminar el átomo 2, se expandió (4.1) para los sitios 1, 2 y 3 y se obtuvieron:

$$\bullet \alpha_1^{\text{III}} = \alpha + \beta x \left( \frac{x^2 + (xx_6 - 1)}{x^2 (xx_6 - 1)} \right) \quad (4.41)$$

$$\bullet \beta_{13}^{\text{III}} = \beta x^{-1} \quad (4.42)$$

Para la renormalización de parámetros efectivos para eliminar el átomo 3, se expandió (4.1) para los sitios 1, 3 y 4, obteniendo:

$$\bullet \alpha_1^{\text{IV}} = \alpha + \beta x \left( \frac{x^2 + (xx_6 - 1)}{x^2 (xx_6 - 1)} \right) + \frac{\beta x^2}{x - x^{-1}} \quad (4.43)$$

$$\bullet \alpha_4^{\text{IV}} = \alpha + \beta x_6 (xx_6 - 1) + \frac{\beta}{x - x^{-1}} \quad (4.44)$$

$$\bullet \beta_{41}^{\text{IV}} = \beta_{14}^{\text{IV}} = \beta (xx_6 - 1)^{-1} + \frac{\beta x^{-1}}{x - x^{-1}} \quad (4.45)$$

$$\text{donde: } x_6 = \frac{E - \alpha_6}{\beta}, \quad x = \frac{E - \alpha}{\beta}$$

### 3.2.3. Caso asimétrico en dos átomos

Si la energía de sitio de dos átomo particulares de la molécula de benceno es diferente del resto de los átomos, por ejemplo por efecto de un campo eléctrico localizado generado por la proximidad de una punta de STM, se debe distinguir la energía de sitio de esos dos átomo particulares del resto de los átomos. En este caso

la energía de sitio de los átomos 5 y 6 ( $\alpha_5, \alpha_6$ ) se consideró diferente al resto de los átomos de la molécula ( $\alpha$ ). Estos átomos se encuentran sobre la misma sección de la molécula de benceno, lo que eventualmente permitirá estudiar el efecto de dos barreras (pozos) de potencial en serie sobre las propiedades de transporte electrónico a través del sistema.

Realizando el mismo procedimiento de renormalización que en el caso simétrico discutido anteriormente, la eliminación efectiva del átomo 6 lleva a las siguientes ecuaciones para las energías de sitio efectivas ( $\alpha_1^I, \alpha_5^I$ ) y la energía de traslape ( $\beta_{15}^I$ ) de los átomos contiguos al átomo 6 (átomos 1 y 5). Las ecuaciones obtenidas son (Anexo 3):

$$\bullet \alpha_1^I = \alpha_1 + \frac{\beta_{16}^2}{(E - \alpha_6)} \quad (4.46)$$

$$\bullet \alpha_5^I = \alpha_5 + \frac{\beta_{56}^2}{(E - \alpha_6)} \quad (4.47)$$

$$\bullet \beta_{15}^I = \frac{\beta_{16}\beta_{56}}{(E - \alpha_6)} \quad (4.48)$$

$$\text{donde } x_6 = \frac{E - \alpha_6}{\beta}, \quad x_5 = \frac{E - \alpha_5}{\beta}, \quad x = \frac{E - \alpha}{\beta}$$

En la segunda renormalización se obtuvieron las ecuaciones:

$$\bullet \alpha_1^{II} = \alpha_1 + \beta x_6^{-1} + \beta x_6^{-2} (x_5 x_6 - 1)^{-1} \quad (4.49)$$

$$\bullet \alpha_4^{II} = \alpha + \beta x_6 (x_5 x_6 - 1)^{-1} \quad (4.50)$$

$$\bullet \beta_{41}^{II} = \beta (x_5 x_6 - 1)^{-1} \quad (4.51)$$

En la tercera renormalización de parámetros efectivos para eliminar el átomo 2, conservando la energía de  $\alpha_6$  y  $\alpha_5$ . Expandiendo (4.1) para los sitios 1, 2 y 3 se obtuvieron las ecuaciones:

$$\bullet \alpha_1^{III} = \alpha + \beta x_6^{-1} + \beta x_6^{-1} (x_5 x_6 - 1)^{-1} + \beta x^{-1} \quad (4.52)$$

$$\bullet \alpha_4^{III} = \alpha + \beta x_6 (x_5 x_6 - 1)^{-1} \quad (4.53)$$

- $\beta_{13}^{III} = \beta x^{-1}$  (4.54)

En la renormalización de parámetros efectivos para eliminar el átomo 3, conservando la energía de  $\alpha_6$  y  $\alpha_5$ . Expandiendo (4.1) para los sitios 1, 3 y 4 se obtuvieron las ecuaciones:

- $\alpha_1^{IV} = \alpha + \beta x_6^{-1} \left(1(x_6 x_5 - 1)^{-1}\right) + \beta x^{-1} \left(1 + (x^2 - 1)^{-1}\right)$  (4.55)

- $\alpha_4^{IV} = \alpha + \beta x_6 (x_5 x_6 - 1) + \frac{\beta}{x - x^{-1}}$  (4.56)

- $\beta_{41}^{IV} = \beta_{14}^{IV} = \beta (x_6 x_5 - 1)^{-1} + \frac{\beta}{x - x^{-1}}$  (4.57)

### 3.3. Coeficiente de transmisión

El coeficiente de transmisión describe la probabilidad de que un electrón atraviese un sistema de potencial o átomo perturbado en una red discreta, sin ser reflejada [4] [14].

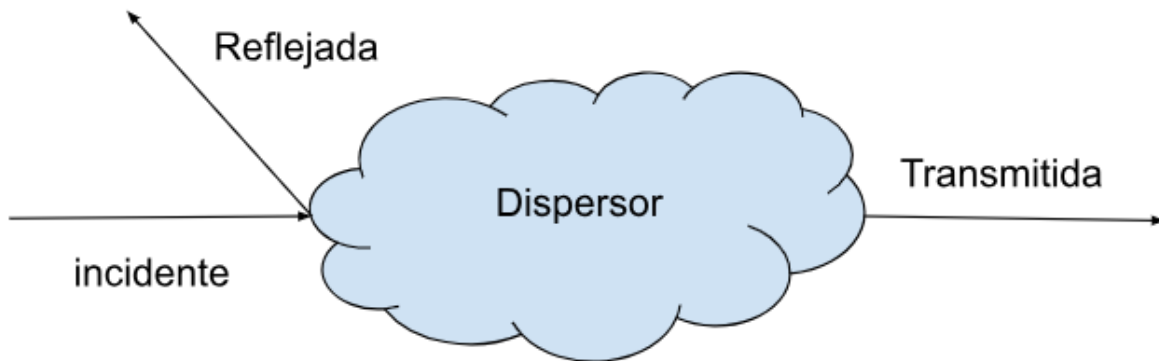


Figura 9. Esquema representativo de la reflexión y transmisión a través de un dispersor

Para determinarlo, se parte de la ecuación de Lippmann-Schwinger, la cual establece la forma general del estado de dispersión  $\psi_n(k)$  como la superposición de una onda incidente y una perturbación incluida por el potencial  $V$ :

$$\psi_n(k) = \psi_n^0(k) + \sum_{l,m} G_{n,l}^0(k) V_{l,m} C_m(k) \quad (4.58)$$

donde  $G_{n,l}^0(k)$  es la función de Green no perturbada, que para el modelo de amarre fuerte en una dimensión se expresa como:

$$G_{n,l}^0(k) = \frac{ie^{i(n-l)\theta_k}}{2\beta \sin\theta_k} \quad (4.59)$$

$\beta$  representa el parámetro de salto o de acoplamiento entre los sitios vecinos, y  $\theta_k = ka$  es la fase asociada al número de onda  $k$  y la constante de red  $a$ .

La ecuación (104) se reescribe considerando las condiciones de frontera para la onda incidente y transmitida:

$$\begin{aligned} \psi_n(k) &= e^{in\theta_k} + re^{-in\theta_k} && \text{si } n \rightarrow -\infty \text{ (incidente + reflejada)} \\ &= \tau e^{in\theta_k} && \text{si } n \rightarrow \infty \text{ (transmitida)} \end{aligned} \quad (4.60)$$

donde  $\tau$  es la amplitud de transmisión, de la cual se obtiene el coeficiente de transmisión  $T = |\tau|^2$ . El potencial efectivo del sistema con dos átomos con energía diferente, se modela mediante:

$$V = 2\beta[z_0|0\rangle\langle 0| + z_j|1\rangle\langle 1| + \gamma(|0\rangle\langle 1| + |1\rangle\langle 0|)] \quad (4.61)$$

donde:

- $z_j = \frac{\alpha_j - \alpha}{2\beta}$  representa el desajuste energético de sitio entre los átomos del dímero efectivo con relación a la molécula. ( $j=0,1$ )
- $\gamma = \frac{\beta_{01} - \beta}{2\beta}$  es el acoplamiento entre los átomos con diferente energía, tomando en cuenta la diferencia entre los parámetros de salto en el enlace perturbado ( $\beta_{01}$ ) y el sistema molecular ( $\beta$ )
- $W = 2i \sin\theta_k$  y  $t = e^{i\theta_k}$  Son factores que permiten expresar las ecuaciones de manera más compacta, asociadas al acoplamiento ondulatorio de los electrones.

El sistema de ecuaciones acopladas obtenidas para los coeficientes  $C_0$  y  $C_1$  (átomos con diferente energía) se resuelve simultáneamente, dando lugar a la expresión para  $\tau$  en términos de los parámetros definidos:

$$\tau = \frac{1+2\gamma}{\Delta} \quad (4.62)$$

donde  $\Delta$  contiene las contribuciones combinadas de los átomos con diferente energía y sus interacciones:

$$\Delta = 1 - 2w^{-1}(P - 1Qt) \quad (4.63)$$

siendo:

- $P = Z_0 + Z_1$  es el término de energía promedio de los átomos con energía diferente
- $Q = Z_0 Z_1 - \gamma^2$  es el término de acoplamiento efectivo entre ellos.

Finalmente, el coeficiente de transmisión se obtiene como el módulo cuadrado de  $\tau$ :

$$T = |\tau|^2 = \frac{(1+2\gamma)^2(4-x^2)}{(1-2Q)^2(4-x^2)+4(P-Qx)^2} \quad (4.64)$$

### 3.4. Corriente eléctrica

En términos generales, la corriente eléctrica es el flujo total de carga por unidad de tiempo. En sistemas cuánticos, la corriente se describe de forma diferente a los sistemas clásicos. En estos tipos de sistemas, los electrones no “fluyen” como partículas contiguas, sino que se comportan como una onda [4] [14]. La corriente se origina debido a un diferencial de potencial entre dos regiones; en este caso entre dos electrodos, lo cual induce a una diferencia en la ocupación electrónica y permite el flujo de electrones [1] [2].

La corriente eléctrica puede ser calculada con el formalismo de Landauer-Büttiker, en el cual, la corriente eléctrica está determinada por la probabilidad de que un electrón se transmita a través del sistema [4] [8]. Generalmente se expresa como:

$$I = \frac{2e}{h} \int_{-\infty}^{\infty} T(E) [f_L(E) - f_R(E)] dE \quad (4.65)$$

donde:

- $I$ : corriente eléctrica
- $e$ : carga del electrón
- $h$ : constante de Planck

- $T(E)$ : coeficiente de transmisión (la probabilidad de que un electrón con energía  $E$  cruce el sistema)
- $f_L(E), f_R(E)$ : función de Fermi de los electrodos, que describe la distribución de electrones según su energía.

El hecho de que estos dos últimos se resten, representa la diferencia de ocupación debido al voltaje aplicado [4] [12].

Esto deja ver que solo las diferencias en ocupación y la capacidad de transmisión determina cuánta corriente fluye [2] [8] [12]. Permite predecir propiedades de conductancia, identificar resonancias electrónicas y analizar efectos de interferencia cuántica, como ocurre en los sistemas geométricos del benceno en sus diferentes configuraciones[6] [21].

## Capítulo 4: Resultados y discusión

En este capítulo se muestran los resultados del cálculo del coeficiente de transmisión a través de una molécula de benceno conectada a terminales en posición *-para-*. Para analizar el comportamiento, se graficó el coeficiente de transmisión  $T(E)$ , que representa la probabilidad de que un electrón atraviese la molécula de benceno de un electrodo a otro con un valor de energía  $E$ .

Las gráficas se obtuvieron a partir del formalismo teórico explicado en el capítulo 2 y 3. Se analizó la configuración *-para-* (los electrodos se consideraron conectados en el átomo 1 y 4), al mismo tiempo se agregó la influencia de modificar la energía de sitio de un(os) átomo(s) particular(es), sobre el coeficiente de transmisión, donde la energía de sitio puede ser positiva o negativa para modelar un pozo o una barrera de potencial localizado en el (los) átomo (s) del anillo.

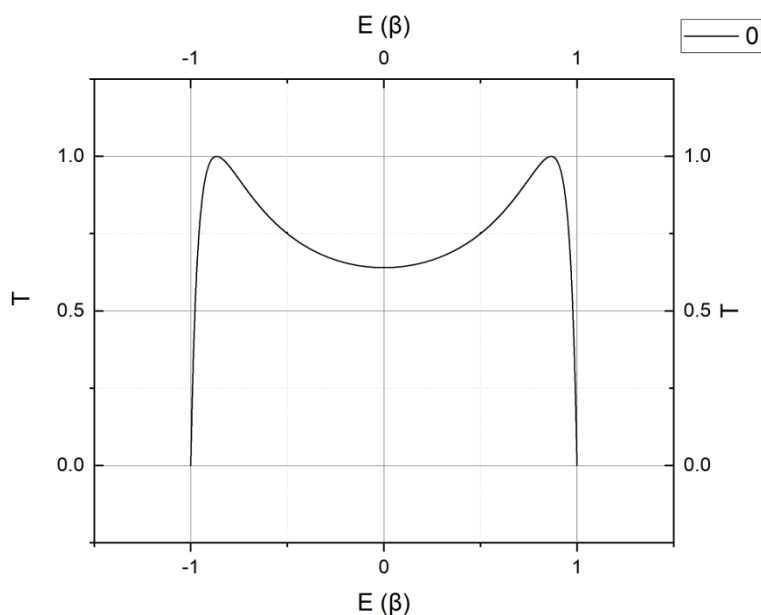
Se utilizaron los parámetros de Sulston y Davison (2015) para calcular el coeficiente de transmisión a través de la molécula de benceno, configuración que se nombrará como *sistema simétrico*. Los parámetros considerados fueron la energía de enlace  $\beta = -0.5$ , la energía de sitio en cada átomo  $\alpha = 0$  y un rango de energía  $E = [-1, 1]$ , todos estos valores son expresados en unidades del parámetro de traslape (hopping) de la molécula.

También se realizó el cálculo del coeficiente de transmisión modificando la energía de sitio del átomo 6 ( $\alpha_6$ ), configuración que será llamada *sistema asimétrico de un átomo*.

Adicionalmente se exploró el caso en donde la energía de sitio de dos átomos es modificada, tomando en cuenta la energía de sitio del átomo 5 ( $\alpha_5$ ) y 6 ( $\alpha_6$ ), a esta configuración se le llamará *sistema asimétrico de dos átomos*.

### 4.1. Sistema simétrico

El sistema simétrico consiste de una molécula de benceno conectada a terminales en configuración simétrica *para*, como se observa en la figura 5.1. De manera que se forma un anillo molecular que puede comportarse como un interferómetro, cuando son inyectados electrones en el sistema.



**Figura 5.1: Coeficiente de transmisión vs energía. (la energía está dada en unidades del parámetro de traslape (hopping) de la molécula) del sistema simétrico en el que todas las energías de sitio son iguales ( $\alpha$ ).**

En la figura 5.1 se observa la gráfica del coeficiente de transmisión, calculado con la ecuación (4.110) descrita en la metodología.

En la gráfica se puede observar una resonancia en el coeficiente de transmisión ( $T=1$ ), debido a que a energías específicas, cercanas al valor de  $\beta$ , los estados electrónicos de la molécula permiten una propagación coherente, es decir, presentan una transmisión casi perfecta en la que los electrones pasan por la molécula sin ningún problema.

En la figura 5.2 se muestra un esquema en donde se explica el proceso de interferencia que experimenta un electrón a través de la molécula, y cuyo coeficiente de transmisión se muestra en la figura 5.1. El comportamiento observado en la figura 5.1 puede ser explicado en términos de interferencia cuántica. Ya que por la estructura hexagonal de la molécula, se establece una geometría anular, y por la conexión *paralela* el electrón tiene dos caminos, que hace posible una interferencia constructiva en ciertas energías específicas y en otras energías presenta una interferencia destructiva.

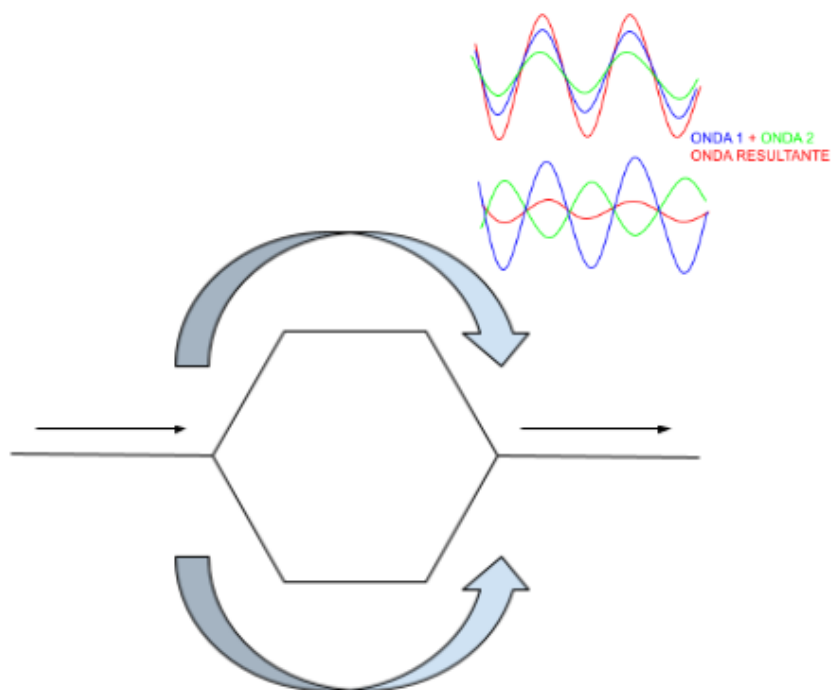


Figura 5.2: esquema de los caminos que pueden tomar los electrones a través de la molécula, así como la interferencia constructiva y destructiva que presenta

## 4.2. Sistema asimétrico en un átomo

### 4.2.1. Energía de sitio positiva

A continuación se describe el comportamiento del coeficiente de transmisión en un sistema en donde el anillo efectivo creado por la molécula pierde la simetría debido a la modificación de la energía de sitio de un átomo particular, simulando la influencia de un potencial eléctrico, por ejemplo. El valor de la energía de sitio estudiado en esta sección es positivo, modelando el hecho de tener una barrera de potencial al transporte de los electrones por una rama de anillo bencénico.

En la gráfica A) de la figura 5.3 se muestra la comparación entre la gráfica original del coeficiente de transmisión del sistema simétrico, cuando todas las  $\alpha$  son iguales y la gráfica que corresponde al caso asimétrico cuando  $\alpha_6 = 0.05$ . Se puede observar que ambas tienen dos resonancias en el coeficiente de transmisión ( $T=1$ ), que se observan, cuando a ciertas energías, los electrones pasan sin ningún problema, ya

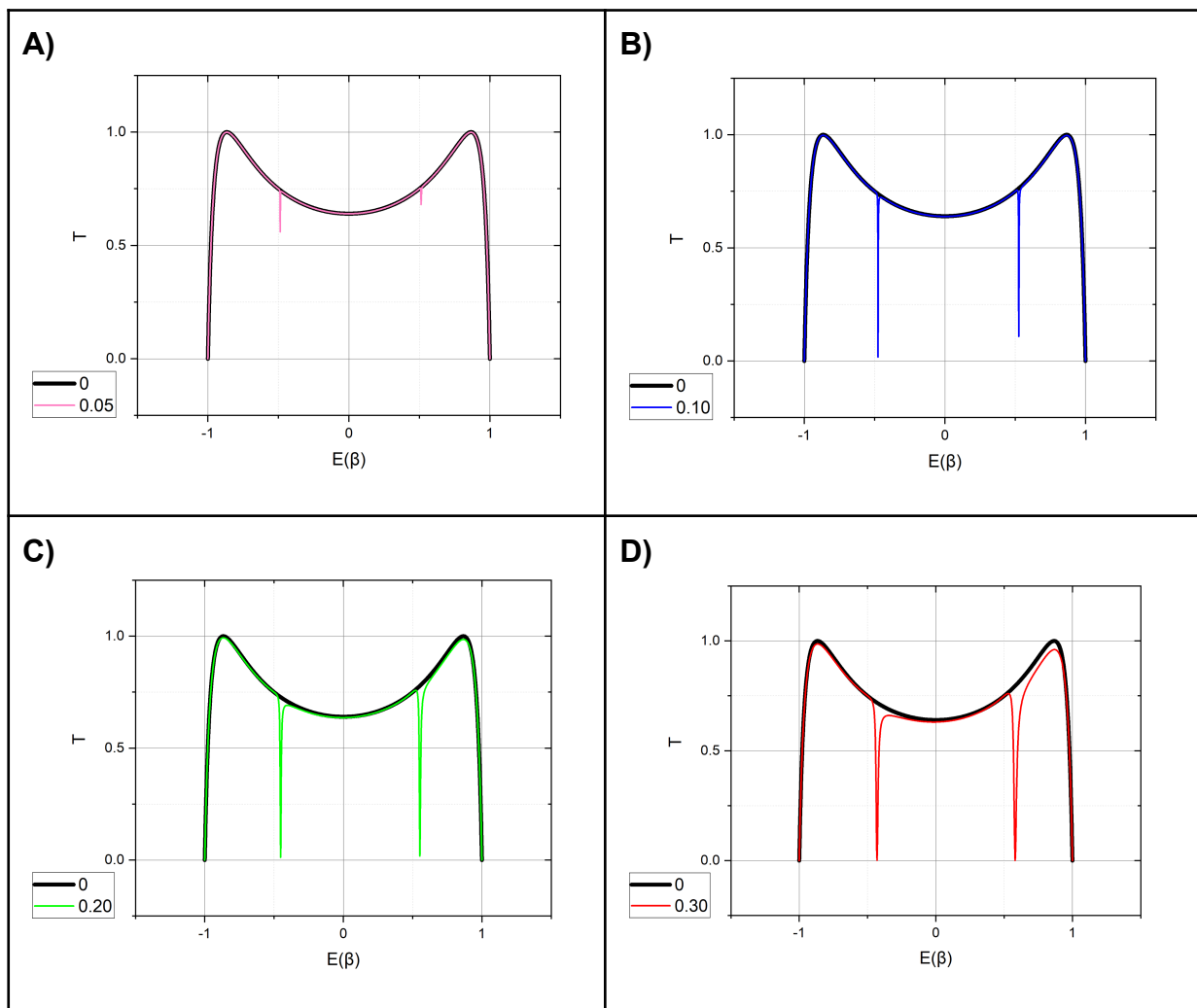
que se crea una interferencia constructiva. También se observa que aparece una caída en el valor del coeficiente de transmisión en los casos asimétricos, a una energía del orden de  $\beta$ , lo cual representa una interferencia destructiva, debida a una pérdida parcial de las fases, provocando que en esta región las amplitudes que llegan por ambas ramas de la molécula no se sumen perfectamente. En estas curvas se ha utilizado el valor de  $\alpha_6 = 0.05$  de manera que  $\alpha_6 \neq \alpha$ , lo que introduce una barrera de sitio en una de las ramas del anillo. Esto provoca una ruptura de simetría entre los caminos que toman los electrones. Los electrones que se transportan por el camino que pasa por el sitio 6 cambian su fase, y como consecuencia la amplitud de transmisión se reduce al combinarse en el contacto de salida, creando una disminución en el coeficiente de transmisión.

En el caso de la gráfica B) donde  $\alpha_6 = 0.10$ , los picos de resonancia no cambian, pero las caídas del coeficiente de transmisión, anti resonancias, estas se vuelven más pronunciadas, como un nivel electrónico aislado que interfiere destructivamente con los caminos de transmisión, y como resultado se forma esta anti resonancia, donde la onda que atraviesa la rama del anillo en que se ubica un átomo con una energía de sitio diferente al resto de la molécula, interfiere con la onda que toma la otra rama del anillo, creando interferencia destructiva.

En el caso de la gráfica C), donde  $\alpha = 0.2$ , los picos de resonancia se mantienen, y las anti resonancia se desplaza hacia el centro en comparación del caso anterior, y además, la caída del coeficiente de transmisión abarca un rango energético mayor, lo que indica que el coeficiente de transmisión no solo se está anulando sino que en una región energética un poco más extendida. El incremento de la energía de sitio del átomo 6 refuerza el efecto de la barrera de potencial en la red molecular, produciendo desajustes energéticos más fuertes y más notables con respecto al resto de los átomos, lo que intensifica la interferencia destructiva. Como consecuencia la posición de la anti resonancia se mueve a zonas más cercanas al centro, la cancelación del coeficiente de transmisión es más pronunciada, y la onda que atraviesa la rama del anillo con el sitio perturbado, se desfasa aún más respecto a la que viaja por la rama del anillo sin perturbar.

En el caso de la gráfica D), cuando  $\alpha = 0.3$ , los picos del coeficiente de transmisión se mantienen, pero con un valor menor a  $T=1$ . En tanto que el valor del coeficiente de transmisión de las anti resonancias cae hasta cero, lo que indica una severa

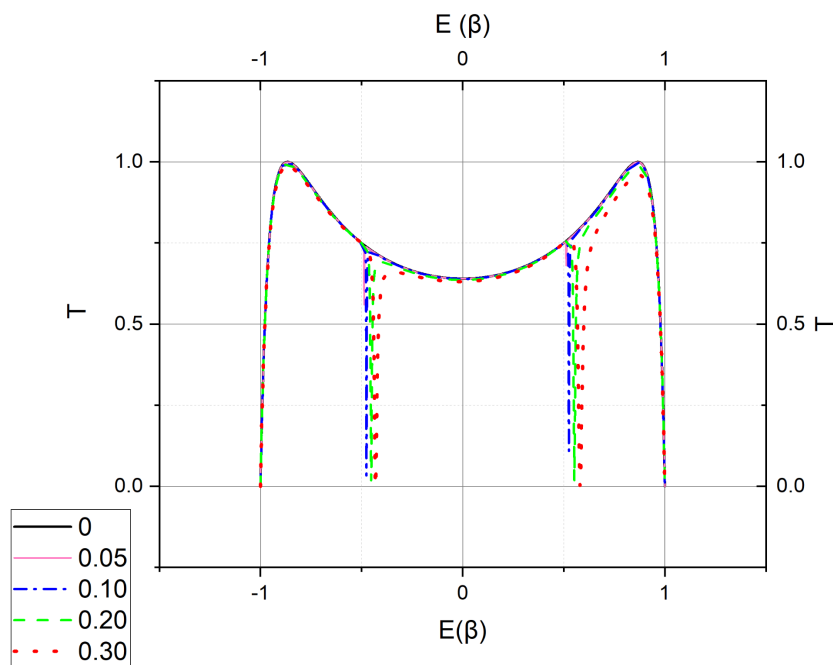
interferencia destructiva donde los electrones quedan completamente bloqueados. Al incrementar la energía de sitio del átomo 6 a  $\alpha_6=0.3(\beta)$ , el sitio 6 se comporta como una barrera energética fuerte dentro del anillo. Esta barrera introduce un gran desfase en la trayectoria de los electrones. En ciertas energías las trayectorias que pueden tomar los electrones, interfieren de manera destructiva, lo que genera la anulación casi total del coeficiente de transmisión. En este caso, básicamente, la barrera es tan grande que dificulta mucho el paso de los electrones.



**Figura 5.3:** Comparación del caso simétrico con el caso asimétrico donde se modifica la energía de sitio de un átomo. Las curvas de colores representan el coeficiente de transmisión cuando la energía de sitio en el átomo 6 ( $\alpha_6$ ) es positiva y diferente al resto de los átomos, mientras que la curva negra representa el coeficiente de transmisión cuando todos los átomos de la molécula tienen la misma energía de sitio ( $\alpha$ ). El valor de  $\alpha_6(\beta)$  en cada gráfica es A) 0.05, B) 0.1, C) 0.2 y D) 0.3

En la figura 5.4 se muestra la comparación de todas curvas anteriores. Se puede observar la existencia de un desplazamiento en energía de las anti resonancias, así como también un ensanchamiento energético en cada una de ellas conforme aumenta la energía de sitio del átomo perturbado.

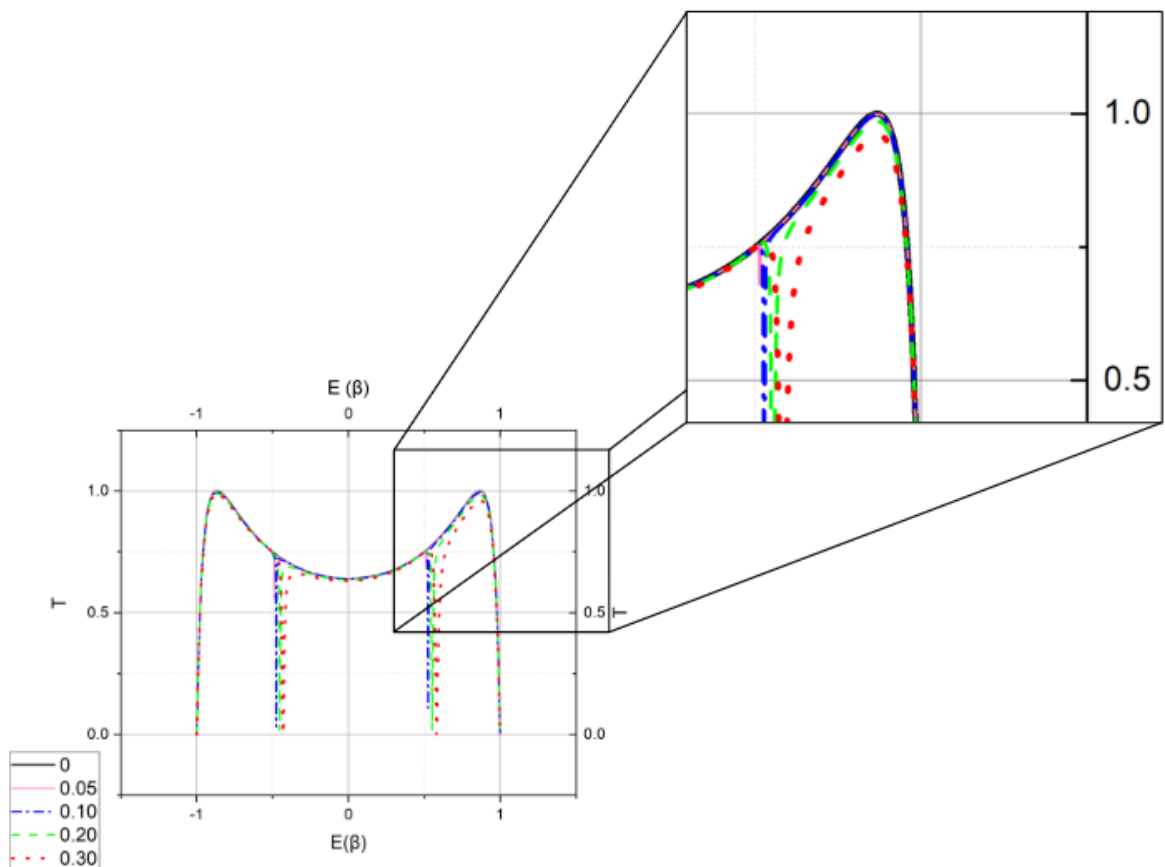
El desplazamiento ocurre por el cambio en la magnitud del valor de la energía de sitio del átomo perturbado, esto cambia el desfase entre trayectorias electrónicas. El valor de  $\alpha_6$  determina en qué energía ocurre el decremento en el coeficiente de transmisión, para valores grandes de la energía de sitio  $\alpha_6$ , la posición de la anti resonancia se mueve hacia los bordes de la banda.



**Figura 5.4:** Superposición de todas las curvas en donde la energía de sitio del átomo 6 ( $\alpha_6$ ) es positiva (barrera de potencial), mientras que el resto de los átomos de la molécula de benceno mantiene la misma energía de sitio.

Por otro lado, la existencia de un ensanchamiento energético en la anti resonancia, está relacionado con la fuerza de la interacción entre los estados localizados que se crean y el resto de la molécula [2][4]. Cuando la energía de sitio  $\alpha_6$  es pequeña, los electrones se transportan en el anillo con mayor facilidad, ya que sólo en una energía

específica el coeficiente de transmisión disminuye drásticamente, mientras que cuando la energía de sitio  $\alpha_6$  es grande, la barrera se incrementa y se vuelve un gran obstáculo para el transporte de los electrones, manifestándose en que ahora no solo hay una energía en la que se anula el transporte, sino en toda una “franja” de energías donde los electrones no se transportan. En la figura 5.5 se puede observar mejor el ensanchamiento energético de las anti resonancias.



**Figura 5.5:** Acercamiento al ensanchamiento energético de la anti resonancia en el sistema donde la energía de sitio del átomo 6 ( $\alpha_6$ ) es positiva (barrera de potencial) .

#### 4.2.2. Energía de sitio negativa

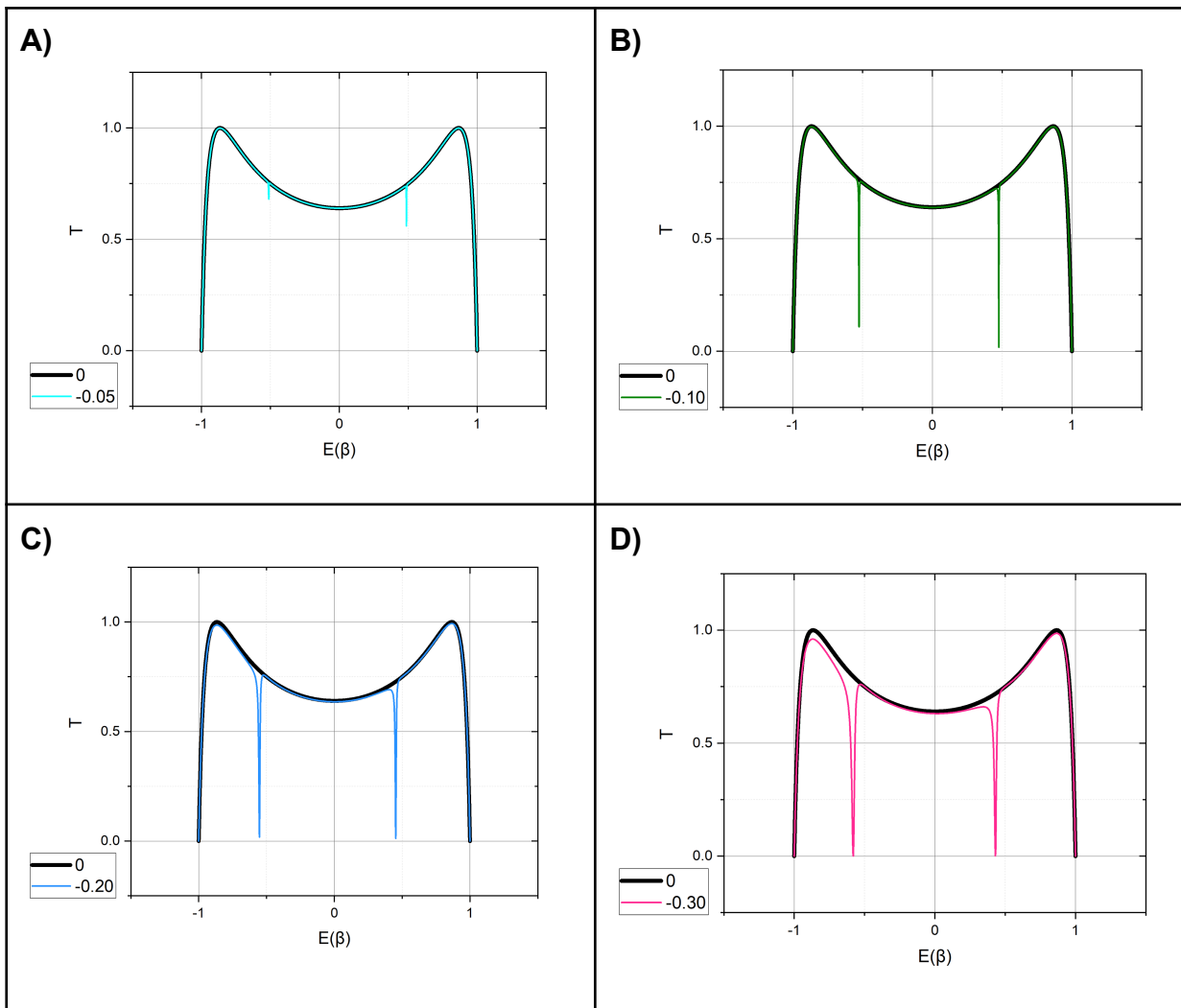
A continuación se describe el comportamiento del coeficiente de transmisión en un sistema en donde el anillo efectivo creado por la molécula pierde la simetría debido a la modificación de la energía de sitio de un átomo particular, simulando la influencia de un potencial eléctrico localizado, por ejemplo. El valor de la energía de sitio

estudiado en esta sección es negativo, modelando el hecho de tener un pozo de potencial efectivo al transporte de los electrones por una rama de anillo bencénico.

La figura 5.6 muestra el coeficiente de transmisión en donde la energía de sitio del átomo 6 tiene un valor negativo ( $\alpha_6 < 0$ ), simulando la presencia de un pozo de potencial. Este pozo crea un estado extra por uno de los caminos que tienen los electrones. Cuando estos viajan por ambos lados las ondas resultantes se cancelan y es por ello que aparece una anti resonancia.

En la gráfica A), la perturbación en la energía de sitio del átomo 6 es débil y apenas rompe la simetría. Se observan dos ligeras caídas en el coeficiente de transmisión, muy estrecha y cercanas al centro de la banda. Estas anti resonancias son consecuencias de una interferencia sutil entre los caminos posibles que puede seguir el electrón dentro del anillo. Cuando  $\alpha = -0.1$ , gráfica B), muestra el comportamiento al incrementar la magnitud negativa de la energía de sitio, en donde las anti resonancias se hacen más marcadas y se desplazan hacia energías más alejadas del centro. Esto refleja un mayor confinamiento local del electrón en el sitio perturbado.

La trampa de potencial de la gráfica C),  $\alpha = -0.2$ , se vuelve más profunda, aumenta la probabilidad de que el electrón quede parcialmente localizado. Las regiones de transmisión nula se ensanchan, indicando que el rango de energías donde ocurre interferencia destructiva es mayor. En el caso de  $\alpha = -0.3$ , la gráfica D), el átomo perturbado actúa como un pozo de potencial muy profundo. El electrón puede quedar atrapado, generando un estado localizado que interactúa fuertemente con los estados extendidos del sistema. Este acoplamiento causa que la anti resonancia se desplace más hacia los bordes de la banda y que el coeficiente de transmisión presente picos más anchos, debido al fuerte acoplamiento entre el estado localizado y los del resto de la molécula.

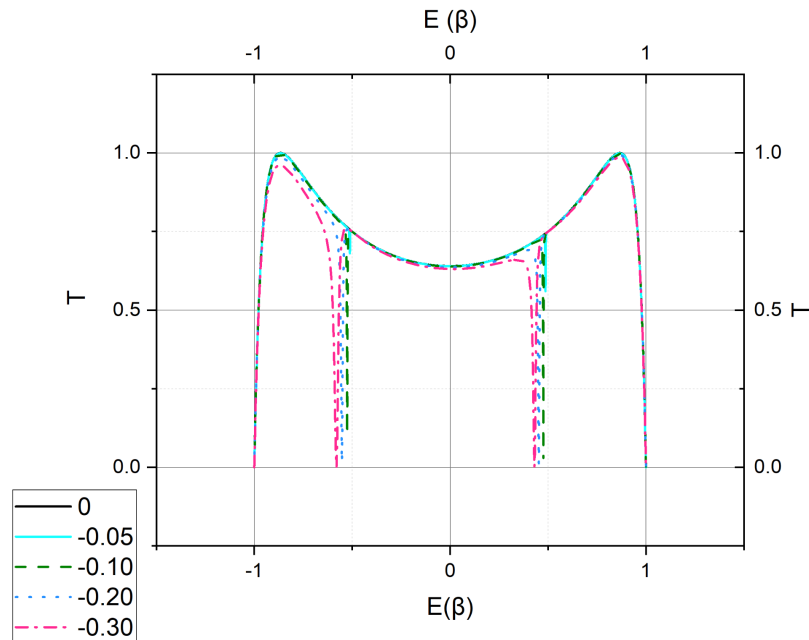


**Figura 5.6:** Comparación del caso simétrico con el caso asimétrico donde se modifica la energía de sitio de un átomo. Las curvas de colores representan el coeficiente de transmisión cuando la energía de sitio en el átomo 6 ( $\alpha_6$ ) es negativa y diferente al resto de los átomos, mientras que la curva negra representa el coeficiente de transmisión cuando todos los átomos de la molécula tienen la misma energía de sitio ( $\alpha$ ). El valor de  $\alpha_6(\beta)$  en cada gráfica es A) -0.05, B) -0.1, C) -0.2 y D) -0.3

La figura 5.7 se presenta la superposición de las curvas del coeficiente de transmisión  $T(E)$  para distintos valores negativos de la energía de sitio del átomo 6 ( $\alpha_6$ ), mientras que el resto de los átomos de la molécula de benceno mantienen una energía de sitio constante ( $\alpha = 0$ ). Los valores de  $\alpha_6 = -0.05, -0.10, -0.20$  y  $-0.30$  representan diferentes profundidades de un pozo de potencial inducido en el sitio atómico 6.

Un valor negativo de  $\alpha_6$  indica que dicho átomo actúa como una región de menor energía, es decir, un pozo de potencial que tiende a atraer los electrones hacia el.

Esta modificación local de potencial genera un estado electrónico localizado alrededor del átomo perturbado. No obstante, debido al acoplamiento cuántico entre los átomos del anillo, este estado extendido del sistema, afectando la probabilidad de transmisión electrónica a través de la molécula.



**Figura 5.7:** Superposición de todas las curvas en donde la energía de sitio del átomo 6 ( $\alpha_6$ ) es negativa (pozo de potencial), mientras que el resto de los átomos de la molécula de benceno mantiene la misma energía de sitio ( $\alpha$ ).

En la gráfica se observa que, a medida que el valor de  $\alpha_6$  se hace más negativo, las caídas de transmisión se desplazan ligeramente hacia el centro de la banda de conducción, y el ancho de dichas caídas aumenta. Esto indica que el estado localizado se vuelve más estable y su interacción con el resto de la molécula es más fuerte. En términos cuánticos, este efecto se interpreta como una interferencia destructiva entre las ondas eléctricas que viajan por las dos ramas del anillo de benceno. Cuando las dos ondas llegan al punto de salida con un desfase de  $\pi$ , se cancela entre sí, provocando una transmisión nula. Por el contrario, cuando el desfase acumulado es de  $2\pi$ , las ondas de interferencia de manera constructiva, y el electrón atraviesa el sistema sin ser reflejado.

En la figura 5.8 se observa el comportamiento típico del coeficiente de transmisión (o conductancia) para sistemas unidimensionales bajo diferentes condiciones de potencial. Cuando la energía de sitio es mayor que cero, el sistema se comporta como una barrera de potencial, ya que el sitio perturbado empuja el estado electrónico hacia energías más altas; en consecuencia, las caídas en la transmisión se desplazan hacia nuevas posiciones energéticas. Por lo contrario, cuando la energía de sitio es negativa, el sistema se somete a un pozo de potencial, atrayendo los estados hacia energías menores y desplazando las caídas en dirección opuesta.

En ambos casos, tanto positivo como negativo, aparecen una anti resonancia, como una anulación total de la transmisión debido a interferencia cuántica destructiva. Sin embargo, el signo del potencial determina hacia qué región del espectro energético se desplazan estas caídas y la anchura del rango energético que abarcan.

El sistema A) corresponde al límite en el que el electrón encuentra una barrera abrupta de gran altura. La función de onda no penetra la barrera, por lo que no hay transmisión ( $T \approx 0$ ). Representa un caso de reflexión total. El sistema B) representa una barrera de potencial. El electrón enfrenta una región repulsiva. Si su energía es menor que la altura de la barrera, la función de onda decrece exponencialmente dentro de ella, mostrando el efecto túnel cuántico. Si su energía coincide con un nivel resonante de la barrera, se produce transmisión perfecta ( $T \approx 1$ ). El sistema C) representa un pozo de potencial. El electrón se ve atraído por la región de potencial negativo, donde se generan niveles cuánticos discretos. Cuando la energía del electrón coincide con uno de estos niveles, ocurren resonancias cuánticas, lo que permite el paso del electrón sin dispersión. Si no coincide, se produce interferencia destructiva y la transmisión disminuye. El caso del sistema D) representa un sistema con múltiples trayectorias de propagación. El electrón puede recorrer distintos caminos de interferencia entre sí, dando lugar a picos (interferencia constructiva) y caídas (interferencia destructiva). El patrón resultante refleja la naturaleza cuántica y coherente del transporte natural.

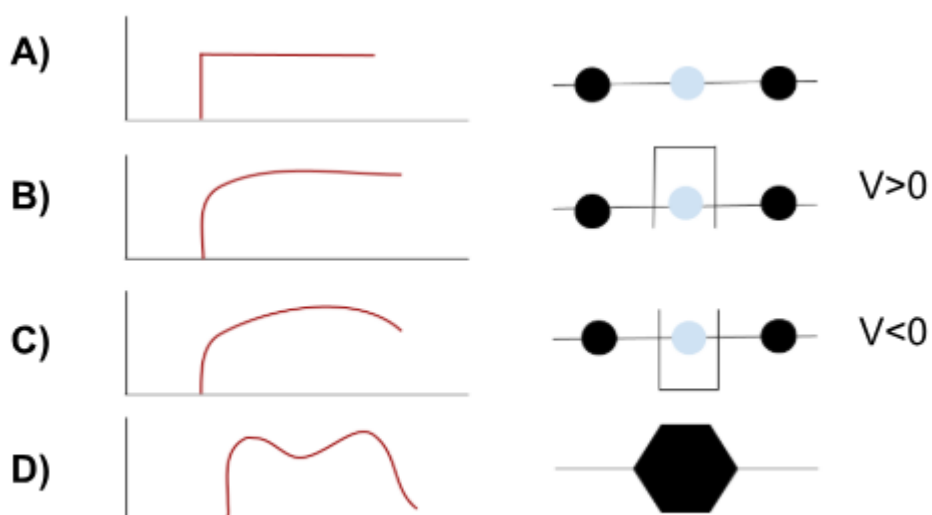


Figura 5.8: Esquema representativo de A) transporte electrónico en un nanoalambre 1D, B) transporte en un nanoalambre 1D con una impureza repulsiva (barrera de potencial), C) transporte en un nanoalambre 1D con una impureza atractiva (pozo de potencial), D) transporte en un anillo y sus firmas respectivamente [27].

### 4.3. Sistema asimétrico en dos átomos

#### 4.3.1. Energías de sitio positivas

A continuación se describe el comportamiento del coeficiente de transmisión en un sistema en donde el anillo efectivo creado por la molécula pierde la simetría debido a la modificación de la energía de sitio de dos átomos contiguos particulares, simulando, por ejemplo, la influencia de un potencial eléctrico localizado. El valor de la energía de sitio estudiado en esta sección es positivo, modelando el hecho de tener dos barreras de potencial en serie que modifican el transporte de los electrones por una rama de anillo bencénico.

La figura 5.9 muestra la curva del coeficiente de transmisión cuando la energía de sitio de dos átomos contiguos es diferente a la energía del resto de los átomos de la molécula ( $\alpha$ ), en este caso el átomo 5 y 6, donde  $\alpha_5 = \alpha_6$ .

En la gráfica A) se compara la curva del coeficiente de transmisión para el caso simétrico, molécula sin perturbar, y el caso en donde se modifica la energía de sitio de

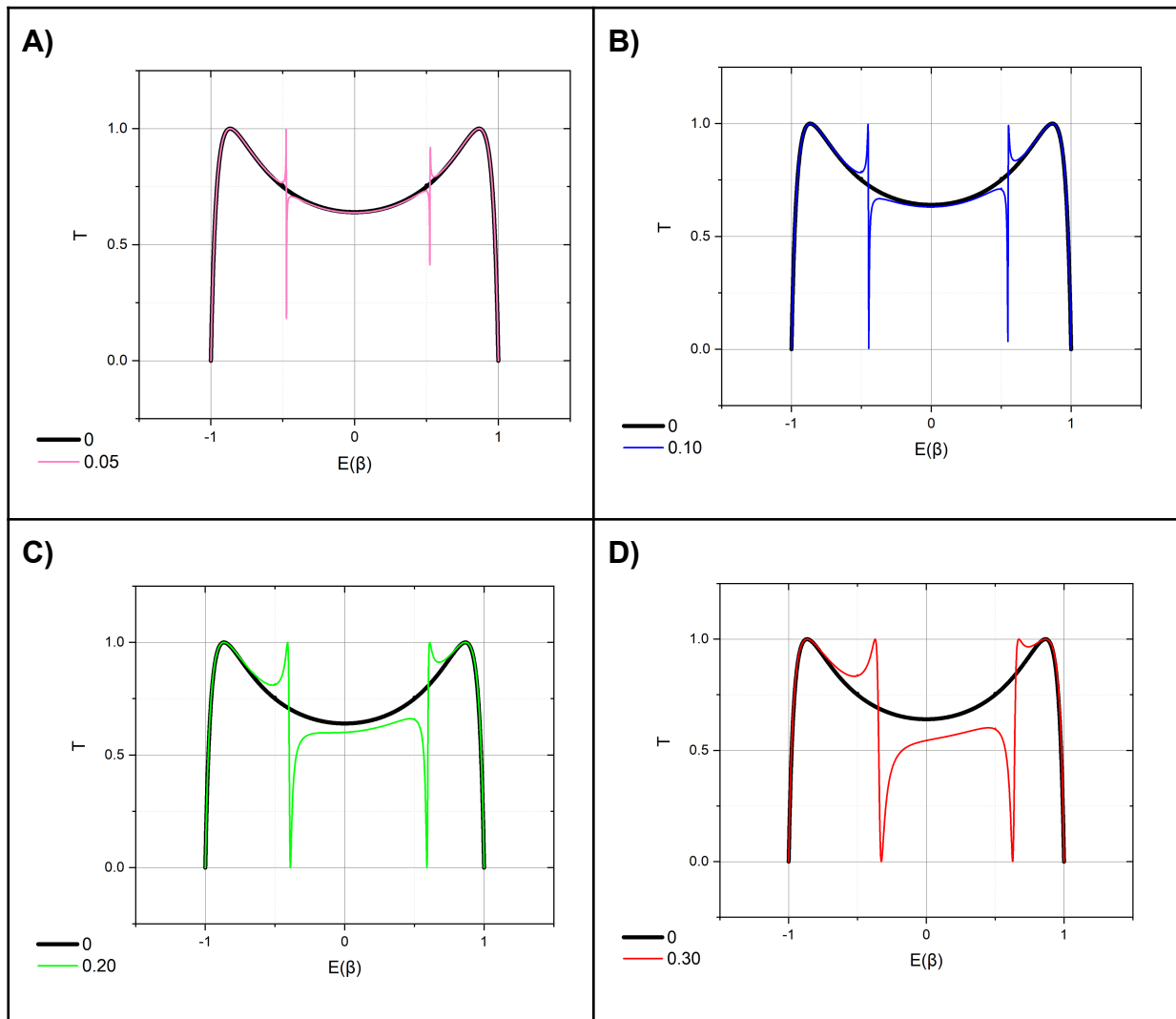
los átomos 5 y 6 a un valor de  $\alpha_5 = \alpha_6 = 0.05(\beta)$ . Se puede observar que ambas curvas coinciden con excepción en que aparece una resonancia y una anti resonancia en una energía muy próxima entre ellas. En este caso la perturbación es muy débil, por lo que los electrones viajan de manera coherente por el anillo. La antiresonancia indica la existencia de interferencia destructiva en una energía muy específica, como se había observado en el caso asimétrico de un átomo. Sin embargo, ahora existe también la presencia de una resonancia, que indica la existencia de tunelamiento a través de estados discretos creados entre las barreras, es decir tunelamiento resonante.

En la gráfica B) se observa que el defecto se intensifica por lo que las anti resonancias se hacen más pronunciadas y abarcan más rango de energías en comparación con el caso asimétrico de un solo átomo. Esto pone de manifiesto que los estados localizados en los átomos modificados interactúan de manera más evidente con los estados extendidos de la molécula, reduciendo la transmisión en regiones específicas del espectro energético. Debido a la ruptura parcial de la simetría, los electrones experimentan una dispersión más marcada. Sin embargo, la presencia de las resonancias se acentúa, poniendo de manifiesto el tunelamiento resonante entre las barreras.

En la gráfica C) se observa una perturbación de la energía de sitio mayor que los casos anteriores,  $\alpha_5 = \alpha_6 = 0.2(\beta)$ . La anti resonancia se sitúa más hacia el centro de la banda de conducción y abarca un rango energético considerable, por lo que los estados localizados de los átomos 5 y 6 empiezan a obstaculizar considerablemente el transporte en esta región, al generar interferencia destructiva considerable y reduciendo la probabilidad de transmisión de los electrones. Como consecuencia, el sistema ya no permite una transmisión coherente en un gran rango energético. Sin embargo, existe un mayor rango energético en donde el coeficiente de transmisión es cercano a 1, debido al incremento en el número de estados discretos entre las barreras, con lo cual el transporte electrónico por tunelamiento se incrementa.

La gráfica D) muestra una perturbación fuerte, se observa que cuando  $\alpha_5 = \alpha_6 = 0.3(\beta)$  (curva roja), asimétrica, se separa considerablemente de la curva negra, simétrica, presentando caídas profundas y amplias del coeficiente de transmisión, llegando a valores cercanos a cero. Esto se debe a la existencia de una anti resonancia bien definida, derivada de una interferencia destructiva muy intensa. El transporte queda

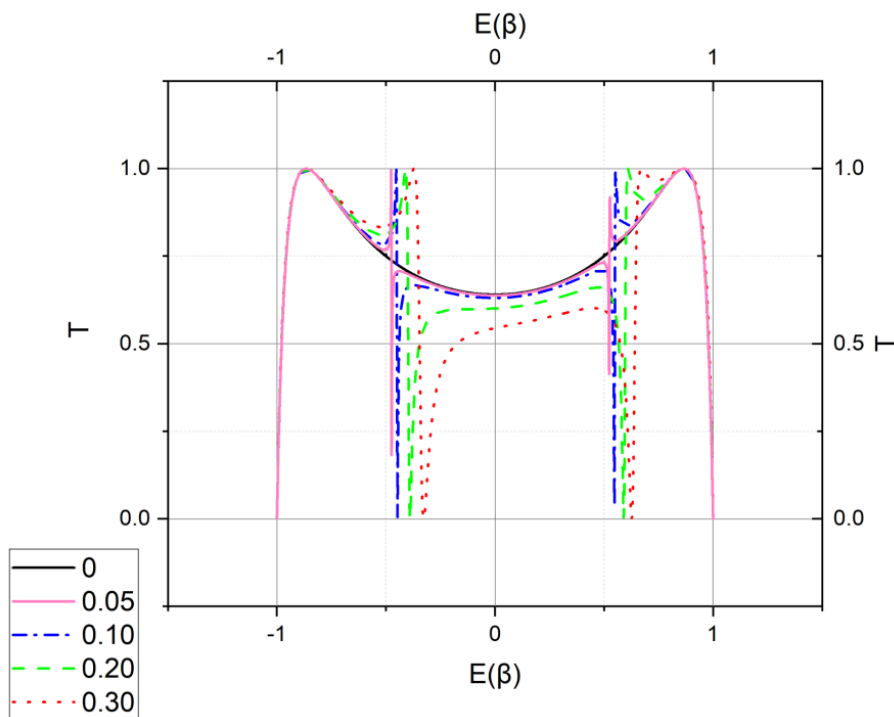
condicionado por los estados localizados de los defectos, que actúan como centro de dispersión dominando y bloqueando casi por completo el flujo de electrones en bastantes regiones energéticas. Sin embargo, la presencia de resonancias manifiesta tunelamiento resonante entre las barreras.



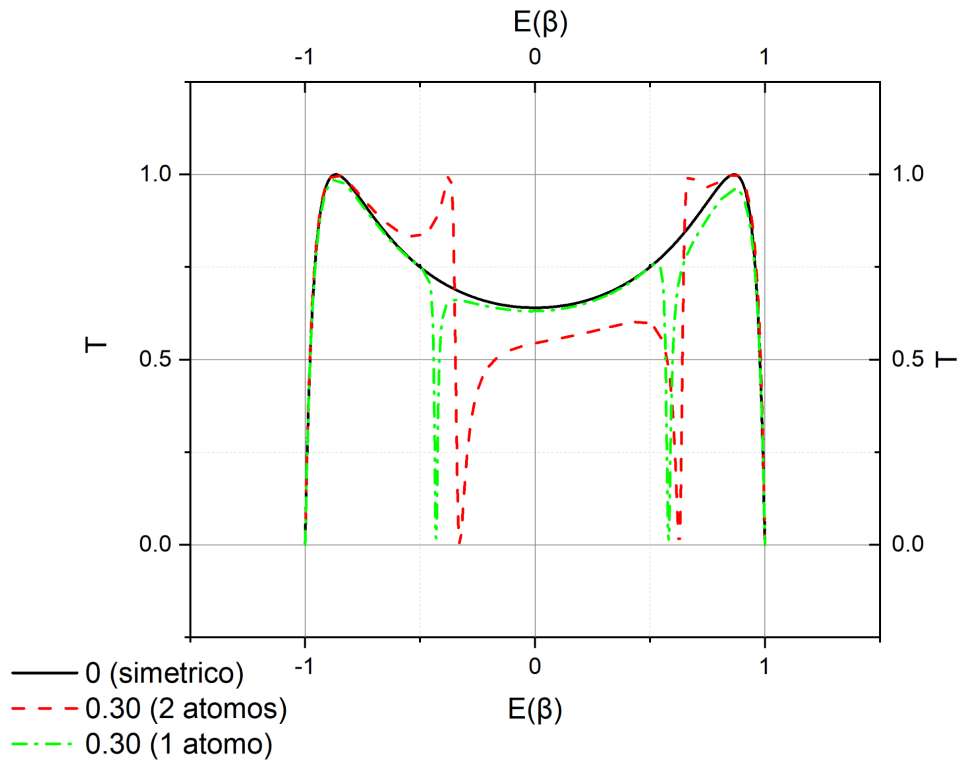
**Figura 5.9:** Comparación del caso simétrico con el caso asimétrico donde se modifica la energía de sitio de dos átomos. Las curvas de colores representan el coeficiente de transmisión cuando la energía de sitio en los átomos 5 y 6 ( $\alpha_5 = \alpha_6$ ) es positiva y diferente al resto de los átomos, mientras que la curva negra representa el coeficiente de transmisión cuando todos los átomos de la molécula tienen la misma energía de sitio ( $\alpha$ ). El valor de  $\alpha_5(\beta) = \alpha_6(\beta)$  en cada gráfica es A) 0.05, B) 0.1, C) 0.2 y D) 0.3

La figura 5.10 muestra la comparación de todas las gráficas anteriores, y se puede observar la evolución del rango energético que abarca la caída del coeficiente de

transmisión. Esto se debe a que al tener dos defectos en una misma rama del anillo, se convierte en una barrera extendida que bloquea los electrones, haciendo que la interferencia destructiva no sea puntual sino que se extienda en un rango de energías en comparación con el caso de una perturbación en un solo átomo. La figura 5.11 ayuda a visualizar este último punto, ya que es posible ver la comparación del caso simétrico y asimétrico de un átomo o dos átomos. Puede observarse la presencia de resonancias en el caso de dos átomos perturbados (efecto de tunelamiento resonante), y de anti resonancias y su rango energético en ambos sistemas perturbados.



**Figura 5.10: Superposición de todas las curvas en donde la energía de sitio del átomo 5 y 6 ( $\alpha_5 = \alpha_6$ ) es positiva (barrera de potencial), mientras que el resto de los átomos de la molécula de benceno mantiene la misma energía de sitio ( $\alpha$ ).**



**Figura 5.11: Comparación del coeficiente de transmisión del caso simétrico con el caso asimétrico en un átomo en  $0.30(\beta)$  y el caso asimétrico en dos átomos en  $0.30(\beta)$ .**

La figura 5.12 ilustra el comportamiento de un electrón al encontrarse con una perturbación localizada en la molécula, la cual puede representarse como una barrera de potencial cuando  $\alpha > 0$  o un pozo de potencial cuando  $\alpha < 0$ . En ambos casos la función de onda del electrón interactúa con la perturbación y se modifica.

Lo relevante a interpretar en las gráficas del sistema asimétrico con dos átomos perturbados es que, a ciertas energías específicas, los electrones resuenan con la perturbación. En este caso, las barreras o los pozos se vuelven “invisibles” para el electrón. El sistema permite que la función de onda se propague sin perturbarse significativamente, como si la perturbación no existiera. Básicamente la energía del electrón coincide con la energía adecuada para atravesar el defecto, lo que produce un coeficiente de transmisión  $T \approx 1$ .

Por otro lado, cuando la energía no cumple con la condición de resonancia, el defecto actúa como una barrera o un pozo efectivo, dispersando al electrón.

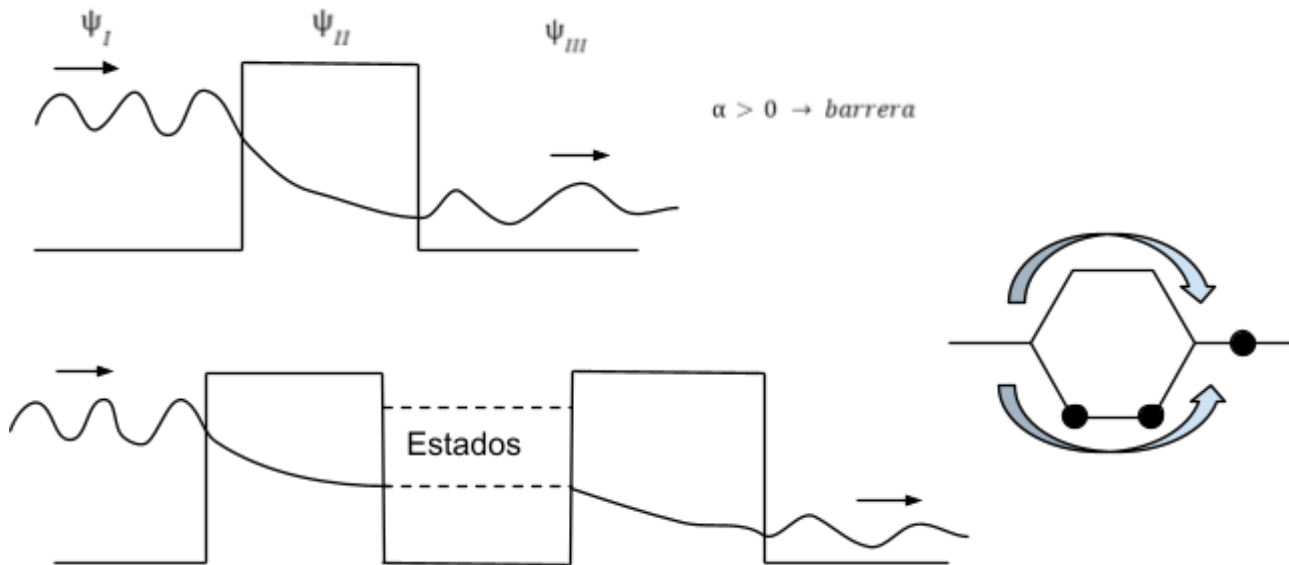


Figura 5.12: Representación esquemática de la interacción de un electrón con una barrera de potencial, y una doble barrera de potencial. Se puede observar que si el electrón tiene una energía que coincide con la energía del estado discreto creado entre las dos barreras, se establece un tunelamiento resonante.

#### 4.3.2. Energías de sitio negativas

En la figura 5.13 se describe el comportamiento del coeficiente de transmisión en un sistema en donde el anillo efectivo creado por la molécula pierde la simetría debido a la modificación de la energía de sitio de dos átomos contiguos particulares, simulando la influencia de un potencial eléctrico. El valor de la energía de sitio estudiado en esta sección es negativa, modelando el hecho de tener dos pozos de potencial en serie que modifican el transporte de los electrones por una rama de anillo bencénico.

En la gráfica A), cuando  $\alpha_5 = \alpha_6 = -0.05$  la perturbación es débil. Los pozos de potencial apenas modifican el transporte, y las curvas muestran una ligera disminución de la transmisión en la región cercana a  $E \approx \pm 0.6$ . Las anti resonancias comienzan a aparecer, pero son estrechas y poco profundas. Esto indica que los estados localizados apenas interactúan con los estados extendidos del sistema.

En la gráfica B) cuando  $\alpha_5 = \alpha_6 = -0.10$  aumenta la magnitud del pozo, los efectos de interferencia se hacen más notorios. Las anti resonancias se desplazan hacia el centro de la banda, alrededor de  $E \approx \pm 0.5$ , y su anchura aumenta. Este

ensanchamiento sugiere un acoplamiento más fuerte entre los estados localizados y los del resto de la molécula, incrementando la interacción cuántica.

En el caso de la gráfica C) cuando  $\alpha_5 = \alpha_6 = -0.20$  la influencia del potencial negativo se acentúa. Se observan anti resonancias más amplias y definidas, y la transmisión entre los dos picos ( $E \approx \pm 1$ ) disminuye de manera general. Esto refleja un mayor distorsión de la simetría electrónica del anillo, con la formación de estados ligados que atrapan parcialmente a los electrones. En la gráfica D), cuando  $\alpha_5 = \alpha_6 = -0.30$ , para este valor, los efectos de los pozos de potencial son muy fuertes. Las anti resonancias se hacen dominantes en la región cercana de  $E \approx \pm 0.4$ . La transmisión se reduce notablemente en la región central, indicando que la mayor parte de los electrones incidentes se reflejan debido a la fuerte localización de los estados electrónicos en los sitios 5 y 6. Este comportamiento representa un régimen de confinamiento cuántico destructivo.

La introducción de defectos energéticos negativos en dos sitios de la molécula genera un comportamiento diferente en comparación con la perturbación de la energía de sitio positiva. Un valor positivo de  $\alpha$  corresponde a un aumento de energía local (una barrera de potencial), mientras que un valor negativo representa una disminución de energía en los sitios (pozo de potencial). A pesar de que en ambos casos se forman estados localizados en torno al átomo perturbado, la interacción de esos estados con la banda de conducción se comporta de distinta manera. Cuando los átomos perturbados tienen valores negativos, las anti resonancias introducidas para la interferencia cuántica destructiva tiende a desplazarse hacia la región central de la banda de energía.

Esto contrasta con las perturbaciones positivas, donde las caídas en la transmisión se mueven hacia los bordes de las bandas, como se demuestra en la figura 5.14. De este modo, el signo de la perturbación actúa como un parámetro de control que define la posición energética donde se cancela la transmisión.

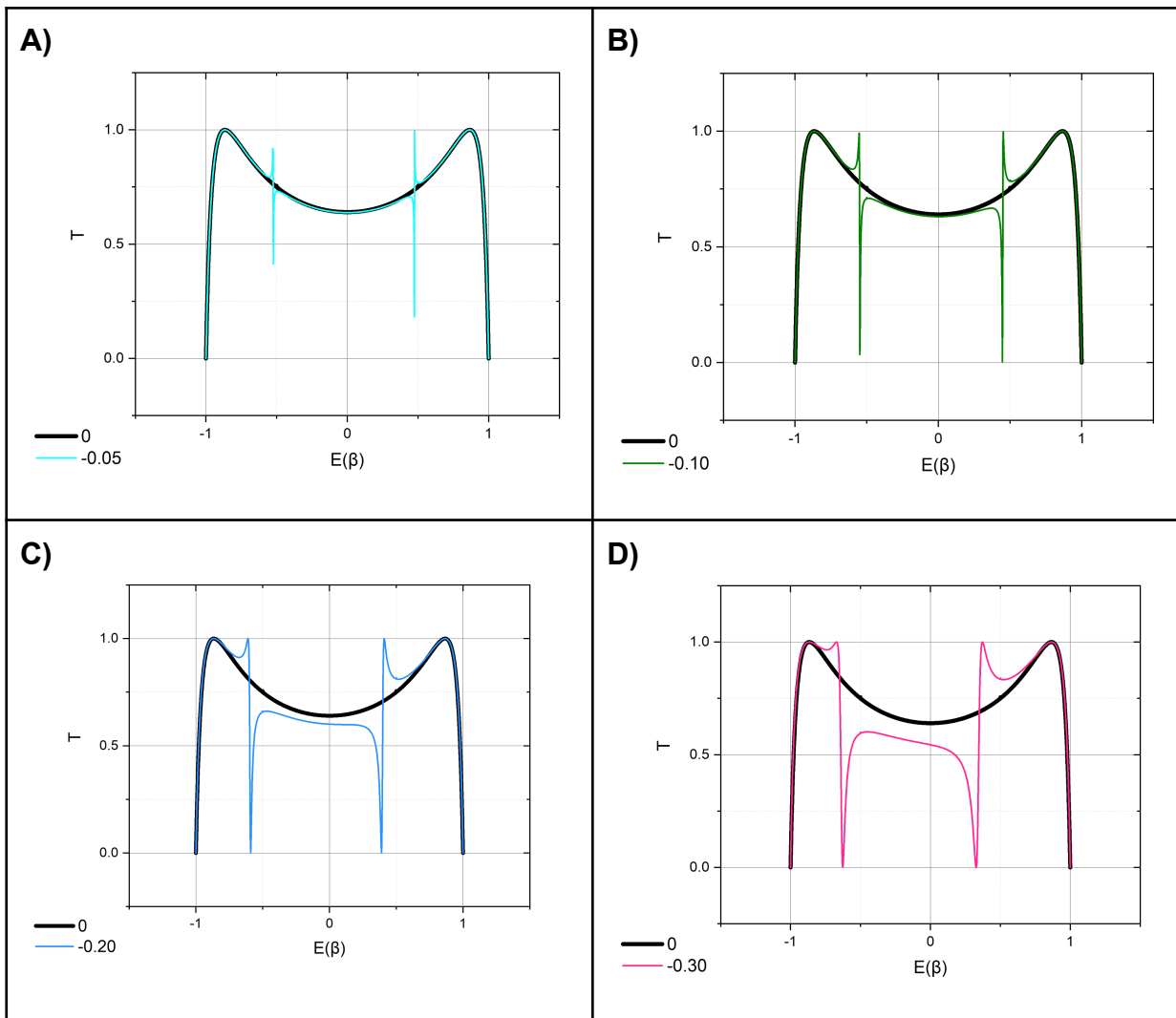
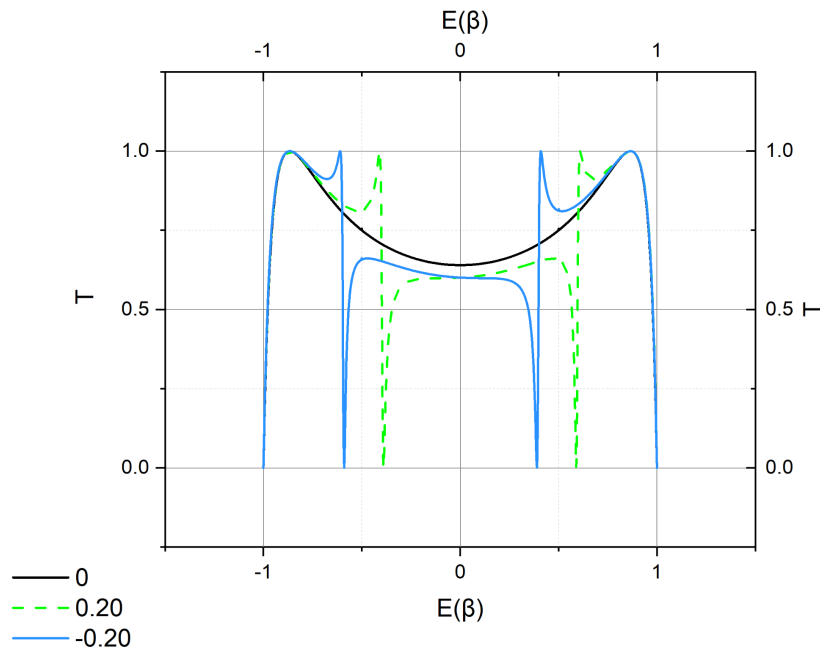
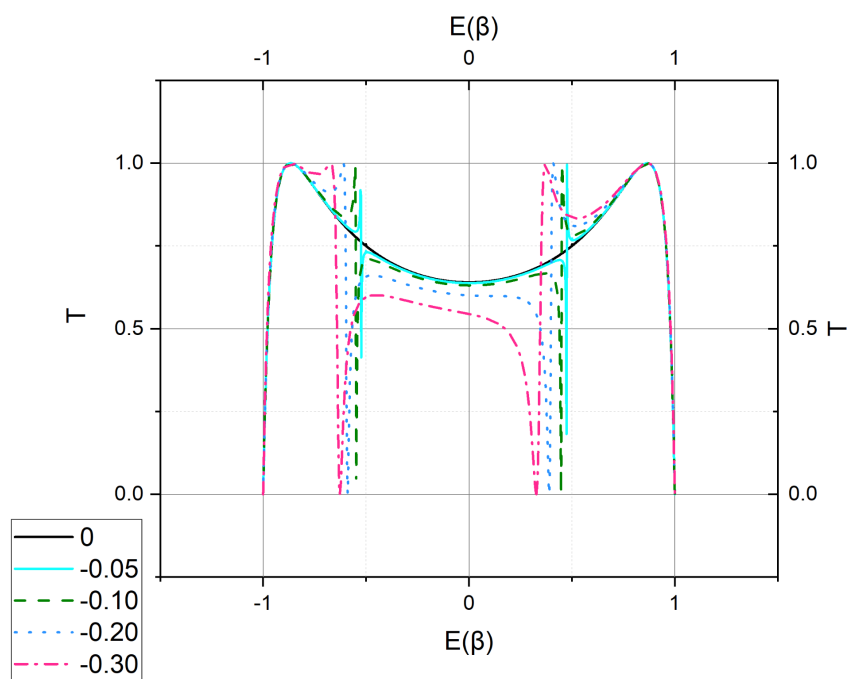


Figura 5.13: Comparación del caso simétrico con el caso asimétrico donde se modifica la energía de sitio de dos átomos. Las curvas de colores representan el coeficiente de transmisión cuando la energía de sitio en los átomos 5 y 6 ( $\alpha_5 = \alpha_6$ ) es negativa y diferente al resto de los átomos, mientras que la curva negra representa el coeficiente de transmisión cuando todos los átomos de la molécula tienen la misma energía de sitio ( $\alpha$ ). El valor de  $\alpha_5(\beta) = \alpha_6(\beta)$  en cada gráfica es A) -0.05, B) -0.1, C) -0.2 y D) -0.3



**Figura 5.14: desplazamiento de del coeficiente de transmisión según del signo**

En la figura 5.15 se muestra la comparación del coeficiente de transmisión del sistema con doble barrera y doble pozo de potencial, para un valor particular en la energía de sitio de los átomos 5 y 6 ( $\alpha_5 = \alpha_6 = \pm 0.2(\beta)$ ). En esta gráfica se puede observar el corrimiento de las resonancias y anti resonancias dependiendo de la naturaleza de los dispersores. Muestra también, en el caso negativo, el control de la magnitud del defecto sobre el ancho y la profundidad de la anti resonancia. En valores pequeños las caídas del coeficiente de transmisión son muy localizadas y estrechas, lo que indica un acoplamiento débil entre el estado localizado y el resto de la molécula. Entre más aumenta el valor de  $\alpha_5$  y  $\alpha_6$ , el estado interactúa de manera más intensa con los canales de transporte, ensanchando la región de anulación del transporte electrónico. El hecho de que los defectos se encuentren en la misma rama del anillo permite la coexistencia de resonancias y anti resonancias abruptas.



**Figura 5.15:** Superposición de todas las curvas en donde la energía de sitio del átomo 5 y 6 ( $\alpha_5 = \alpha_6$ ) es negativa (pozo de potencial), mientras que el resto de los átomos de la molécula de benceno mantiene la misma energía de sitio ( $\alpha$ ).

## Capítulo 5: Conclusión

El presente trabajo permitió analizar el transporte electrónico en una molécula de benceno, enfocándose en cómo es que la introducción de pozos y barreras de potencial en sitios específicos alteran el coeficiente de transmisión. Los resultados obtenidos muestran que un sistema simétrico, en donde todos los átomos tienen la misma energía de sitio, favorece la transmisión casi perfecta cerca de los bordes de la banda de conducción. Sin embargo, al modificar la energía local de uno o más átomos, se generan estados localizados que inducen fenómenos de interferencia destructiva, mostrándose como anti resonancias en la curva del coeficiente de transmisión.

Se observó que la posición y el ancho de las anti resonancias dependen de la magnitud y el signo de la perturbación. Para valores pequeños de energía de sitio del átomo perturbado, la interferencia genera anti resonancias a una energía específica, mientras que a una energía de sitio de mayor magnitud en el átomo perturbado (6), la anti resonancia abarca un rango energético, más que un valor particular de energía, disminuyendo en general el coeficiente de transmisión. Por otro lado, cuando dos átomos se ven perturbados simultáneamente, la interacción entre los átomos perturbados introduce una mayor complejidad en el patrón de transmisión, con la aparición de picos y valles simultáneamente, asociados a una resonancia y una anti resonancia.

Desde un punto de vista físico, estos resultados evidencian un papel fundamental de la interferencia cuántica en sistemas moleculares y cómo es que puede modificar drásticamente la conductancia del sistema con pequeñas modificaciones locales. Estos comportamientos no solo validan la sensibilidad del transporte electrónico a la estructura local, sino que también abren la puerta a controlar la transmisión de electrones mediante átomos perturbados diseñados.

Este trabajo está relacionado directamente con el diseño de dispositivos electrónicos moleculares, donde moléculas orgánicas pueden actuar como interruptores cuánticos, diodos o transistores a escala nanométrica. Al mismo tiempo, el control de la interferencia cuántica mediante defectos energéticos encuentra aplicaciones potenciales en sensores moleculares, capaces de detectar la presencia de impurezas por los cambios del coeficiente de transmisión, y en la aplicación de celdas orgánicas o moléculas, basadas en moléculas conjugadas que permiten dispositivos flexibles y

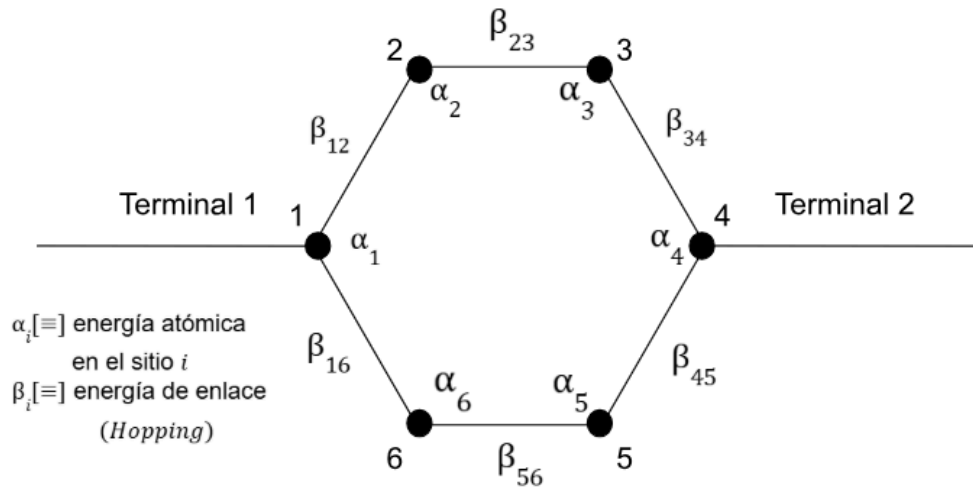
ligeros. Este tipo de análisis, también contribuye a la investigación en computación cuántica y nanoelectrónica, en la cual el manejo de coherencia y la interferencia de electrones es un requisito esencial.

Como trabajo futuro, se puede explorar las configuraciones *orto* y *meta* para analizar cómo la proximidad de las conexiones a los electrodos afecta la interferencia y la transmisión cuántica. Así mismo, con esta metodología se puede extender el estudio a otras moléculas orgánicas con diferente geometría y grupos funcionales, para comprender la relación entre la estructura molecular y las propiedades de transporte electrónico.

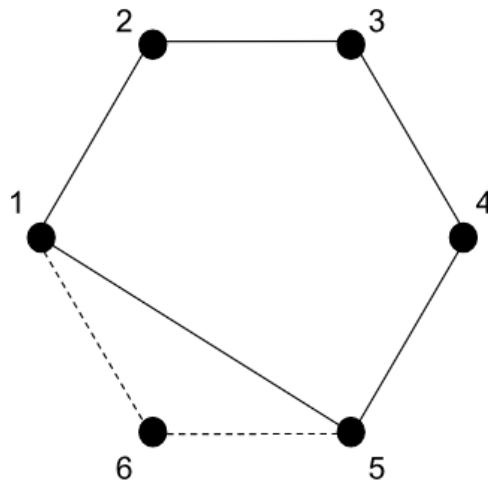
Es posible también hacer un análisis de asimetría más complejas, modelar un sistema con más de dos perturbaciones con diferentes valores energéticos. Esto permitiría investigar cómo la interacción entre distintos pozos y/o barreras de potencial afectan la respuesta colectiva del sistema, lo que generaría espectros de transmisión más complejos y nuevos patrones de interferencia. Estudios futuros podrían incorporar condiciones experimentales más complejas, como los efectos de un solvente, temperatura o variaciones en la fuerza del acoplamiento molecular-electrodo. Esto proporciona una comprensión más completa de cómo el entorno influye en las propiedades de transporte cuántico.

# Anexo 1

## Ecuaciones del sistema simétrico



1. Renormalización de parámetros efectivos para eliminar el átomo 6



$$(E - \alpha_m)G_{mn} = \delta_{mn} + \sum_k \beta_{mk} G_{kn} \quad (1)$$

Expandiendo (1) para los sitios 1, 5 y 6

$$(E - \alpha_1)G_{11} = 1 + \beta_{12}G_{21} + \beta_{16}G_{61} \quad m = n = 1 \quad (2)$$

$$(E - \alpha_6)G_{66} = 1 + \beta_{16}G_{61} + \beta_{56}G_{65} \quad m = n = 6 \quad (3)$$

$$(E - \alpha_5)G_{55} = 1 + \beta_{54}G_{45} + \beta_{56}G_{65} \quad m = n = 5 \quad (4)$$

$$(E - \alpha_1)G_{16} = \beta_{12}G_{21} + \beta_{15}G_{56} \quad m = 1, n = 6 \quad (5)$$

$$(E - \alpha_1)G_{15} = \beta_{12}G_{25} + \beta_{16}G_{65} \quad m = 1, n = 5 \quad (6)$$

$$(E - \alpha_6)G_{61} = \beta_{61}G_{11} + \beta_{65}G_{51} \quad m = 6, n = 1 \quad (7)$$

$$(E - \alpha_6)G_{65} = \beta_{61}G_{15} + \beta_{65}G_{55} \quad m = 6, n = 5 \quad (8)$$

$$(E - \alpha_5)G_{51} = \beta_{54}G_{41} + \beta_{56}G_{61} \quad m = 5, n = 1 \quad (9)$$

$$(E - \alpha_5)G_{56} = \beta_{54}G_{46} + \beta_{56}G_{66} \quad m = 5, n = 6 \quad (10)$$

$$\text{de (7): } G_{61} = (E - \alpha_6)^{-1} \{ \beta_{61}G_{11} + \beta_{65}G_{51} \} \quad (11)$$

sustituyendo (11) en (2)

$$(E - \alpha_1)G_{11} = 1 + \beta_{12}G_{21} + \beta_{16} \left[ (E - \alpha_6)^{-1} \{ \beta_{61}G_{11} + \beta_{65}G_{51} \} \right] \quad (12)$$

$$(E - \alpha_1)G_{11} = 1 + \beta_{12}G_{21} + \beta_{16} \beta_{61} (E - \alpha_6)^{-1} G_{11} + \beta_{16} \beta_{65} (E - \alpha_6)^{-1} G_{51} \quad (13)$$

$$(E - \alpha_1)G_{11} - \beta_{16} \beta_{61} (E - \alpha_6)^{-1} G_{11} = 1 + \beta_{12}G_{21} + \beta_{16} \beta_{65} (E - \alpha_6)^{-1} G_{51} \quad (14)$$

$$\left[ E - \alpha_1 - \frac{\beta_{16} \beta_{61}}{(E - \alpha_6)} \right] G_{11} = 1 + \beta_{12}G_{21} + \frac{\beta_{16} \beta_{65}}{(E - \alpha_6)} G_{51} \quad (15)$$

$$\text{si se define } \alpha_1^I = \alpha_1 + \frac{\beta_{12}^2}{(E - \alpha_6)} \quad (16) \quad \text{y} \quad \beta_{15}^I = \frac{\beta_{16} \beta_{65}}{(E - \alpha_6)} \quad (17)$$

$$\therefore (E - \alpha_1^I)G_{11} = 1 + \beta_{12}G_{21} + \beta_{15}^I G_{51} \quad (18)$$

$$\text{de (8): } G_{65} = (E - \alpha_6)^{-1} \left\{ \beta_{61}G_{15} + \beta_{65}G_{55} \right\} \quad (19)$$

sustituyendo (19) en (4)

$$(E - \alpha_5)G_{55} = 1 + \beta_{54}G_{45} + \beta_{56} \left[ (E - \alpha_6)^{-1} \left\{ \beta_{61}G_{15} + \beta_{65}G_{55} \right\} \right] \quad (20)$$

$$(E - \alpha_5)G_{55} = 1 + \beta_{54}G_{45} + \beta_{56}\beta_{61}(E - \alpha_6)^{-1}G_{15} + \beta_{56}\beta_{65}(E - \alpha_6)^{-1}G_{55} \quad (21)$$

$$\left[ E - \alpha_5 - \frac{\beta_{56}\beta_{65}}{(E - \alpha_6)} \right] G_{55} = 1 + \beta_{54}G_{45} + \frac{\beta_{56}\beta_{61}}{(E - \alpha_6)}G_{15} \quad (22)$$

$$\text{si } \alpha_5^I = \alpha_5 + \frac{\beta_{56}^2}{(E - \alpha_6)} \quad (22) \quad \text{y} \quad \beta_{51}^I = \frac{\beta_{56}\beta_{61}}{(E - \alpha_6)} \quad (23)$$

$$\therefore (E - \alpha_5^I)G_{55} = 1 + \beta_{54}G_{45} + \beta_{51}^I G_{15} \quad (24)$$

$$\text{de (10): } G_{66} = \frac{1}{\beta_{56}} \left\{ (E - \alpha_5)G_{56} - \beta_{54}G_{46} \right\} \quad (25)$$

sustituyendo en (3)

$$(E - \alpha_6) \left[ \frac{1}{\beta_{56}} \left\{ (E - \alpha_5)G_{56} - \beta_{54}G_{46} \right\} \right] = 1 + \beta_{16}G_{61} + \beta_{56}G_{65} \quad (26)$$

$$\frac{(E - \alpha_6)(E - \alpha_5)}{\beta_{56}}G_{56} - \frac{(E - \alpha_6)\beta_{54}}{\beta_{56}}G_{46} = 1 + \beta_{61} \left[ (E - \alpha_6)^{-1} \left\{ \beta_{61}G_{11} + \beta_{65}G_{51} \right\} \right] \quad (27)$$

$$\text{si de (19): } G_{56} = \langle 6|G|5 \rangle = (E - \alpha_6)^{-1} \left\{ \beta_{61}G_{11} + \beta_{65}G_{51} \right\} \quad (28)$$

$$G_{65} = \langle 6|G|5 \rangle = \langle 5|G|6 \rangle^* = \langle 5|G^\dagger|6 \rangle^* = (G_{56}^\dagger)^* \quad (29)$$

$$\therefore G_{56} = (G_{56}^\dagger)^* = (E - \alpha_6)^{-1} \left\{ \beta_{61}(G_{51}^\dagger)^* + \beta_{65}(G_{55}^\dagger)^* \right\}, \quad G_{55} = (G_{55}^\dagger)^* \quad (30)$$

$$\frac{(E - \alpha_5)(E - \alpha_6)(E - \alpha_6)^{-1}}{\beta_{56}} \left[ \beta_{61}(G_{51}^\dagger)^* + \beta_{65}G_{55} \right] - \frac{(E - \alpha_6)\beta_{54}}{\beta_{56}}G_{45} = 1 + \beta_{61} \left[ (E - \alpha_6)^{-1} \left\{ \beta_{61}G_{11} + \beta_{65}G_{51} \right\} \right] \quad (31)$$

$$(E - \alpha_5) \frac{\beta_{61}}{\beta_{51}} (G_{51}^\dagger)^* + (E - \alpha_5)G_{55} - \frac{(E - \alpha_6)\beta_{54}}{\beta_{56}}G_{45} = 1 + \beta_{61} \left[ (E - \alpha_6)^{-1} \left\{ \beta_{61}G_{11} + \beta_{65}G_{51} \right\} \right] + \beta_{65} \quad (32)$$

$$\text{de (3): } G_{66} = (E - \alpha_6)^{-1} \left\{ 1 + \beta_{16}G_{61} + \beta_{56}G_{65} \right\} \quad (33)$$

$$G_{66} = (E - \alpha_6)^{-1} \left[ 1 + \beta_{16} \left[ (E - \alpha_6)^{-1} \left\{ \beta_{61}G_{11} + \beta_{65}G_{51} \right\} \right] + \beta_{56} (E - \alpha_6)^{-1} \left\{ \beta_{61}(G_{51}^\dagger)^* + \beta_{65}(G_{55}^\dagger)^* \right\} \right]$$

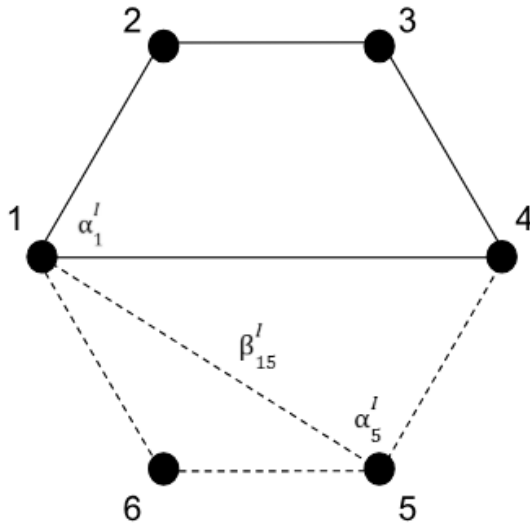
(34)

si se define  $x = \frac{E - \alpha_i}{\beta}$

$$G_{66} = (E - \alpha_6)^{-1} \left[ 1 + \beta_{16} x^{-1} (\beta_{61} G_{11} + \beta_{65} G_{51}) + x^{-1} \left( \beta_{56} (G_{51}^\dagger)^* \beta_{65} (G_{55}^\dagger)^* \right) \right] \quad (35)$$

$$G_{66} = (E - \alpha_6)^{-1} + x^{-2} G_{55} + x^{-2} (G_{51}^\dagger)^* x^{-2} (G_{55}^\dagger)^* \quad (36)$$

2. Renormalización de parámetros efectivos para eliminar el átomo 5.



$$\alpha_1^I = \alpha_1 + \frac{\beta_{12}^2}{(E - \alpha_6)}$$

$$\alpha_5^I = \alpha_5 + \frac{\beta_{56}^2}{(E - \alpha_6)}$$

$$\beta_{15}^I = \frac{\beta_{16} \beta_{65}}{(E - \alpha_6)}$$

Expandiendo (1) para los sitios 1, 4 y 5

$$(E - \alpha_1^I) G_{11} = 1 + \beta_{12} G_{21} + \beta_{15}^I G_{51} \quad m = n = 1 \quad (37)$$

$$(E - \alpha_5^I) G_{55} = 1 + \beta_{51}^I G_{51} + \beta_{54} G_{45} \quad m = n = 5 \quad (28)$$

$$(E - \alpha_4) G_{44} = 1 + \beta_{43} G_{34} + \beta_{45} G_{54} \quad m = n = 4 \quad (29)$$

$$(E - \alpha_1^I) G_{15} = \beta_{12} G_{25} + \beta_{15}^I G_{55} \quad m = 1, n = 5 \quad (30)$$

$$(E - \alpha_1^I) G_{14} = \beta_{12} G_{24} + \beta_{15}^I G_{54} \quad m = 1, n = 4 \quad (40)$$

$$(E - \alpha_5^I) G_{51} = \beta_{51}^I G_{11} + \beta_{54} G_{41} \quad m = 5, n = 1 \quad (41)$$

$$(E - \alpha_5^I)G_{54} = \beta_{51}^I G_{14} + \beta_{54} G_{44} \quad m = 5, n = 4 \quad (42)$$

$$(E - \alpha_4)G_{41} = \beta_{43} G_{31} + \beta_{45} G_{51} \quad m = 4, n = 1 \quad (43)$$

$$(E - \alpha_4)G_{45} = \beta_{43} G_{35} + \beta_{45} G_{55} \quad m = 4, n = 5 \quad (44)$$

$$\text{de (41): } G_{51} = (E - \alpha_5^I)^{-1} \{ \beta_{51}^I G_{11} + \beta_{54} G_{41} \} \quad (45)$$

sustituyendo en (37)

$$(E - \alpha_1^I)G_{11} = 1 + \beta_{12} G_{21} + \beta_{15}^I \left[ (E - \alpha_5^I)^{-1} \{ \beta_{51}^I G_{11} + \beta_{54} G_{41} \} \right] \quad (46)$$

$$(E - \alpha_1^I)G_{11} = 1 + \beta_{12} G_{21} + \beta_{15}^I \beta_{51}^I (E - \alpha_5^I)^{-1} G_{11} + \beta_{15}^I \beta_{54} (E - \alpha_5^I)^{-1} G_{41} \quad (47)$$

$$(E - \alpha_1^I)G_{11} - \beta_{15}^I \beta_{51}^I (E - \alpha_5^I)^{-1} G_{11} = 1 + \beta_{12} G_{21} + \beta_{15}^I \beta_{54} (E - \alpha_5^I)^{-1} G_{41} \quad (48)$$

$$\left[ E - \alpha_1^I - \frac{\beta_{15}^I \beta_{51}^I}{(E - \alpha_5^I)} \right] G_{11} = 1 + \beta_{12} G_{21} + \frac{\beta_{15}^I \beta_{54}}{(E - \alpha_5^I)} G_{41} \quad (49)$$

$$\text{si } \alpha_1^{II} = \alpha_1^I + \frac{\beta_{15}^I \beta_{51}^I}{(E - \alpha_5^I)} \quad (50) \quad , \quad \beta_{14}^{II} = \frac{\beta_{15}^I \beta_{54}}{(E - \alpha_5^I)} \quad (51)$$

$$\therefore (E - \alpha_1^{II})G_{11} = 1 + \beta_{12} G_{21} + \beta_{14}^{II} G_{41} \quad (52)$$

de (50)

$$\alpha_1^{II} = \alpha_1^I + \frac{\beta_{16}^2}{(E - \alpha_6)} + \left( \frac{\beta_{16} \beta_{65}}{(E - \alpha_6)} \right) \left( \frac{\beta_{56} \beta_{61}}{(E - \alpha_6)} \right) \left( \frac{1}{E - \alpha_5 - \frac{\beta_{56}^2}{(E - \alpha_6)}} \right) \quad (53)$$

$$\text{si } \beta_{16} = \beta_{65} = \beta_{61} = \beta_{56} = \beta$$

$$\alpha_1^{II} = \alpha_1^I + \frac{\beta^2}{(E - \alpha_6)} + \left( \frac{\beta^4}{(E - \alpha_6)^2} \right) \left( \frac{1}{E - \alpha_5 - \frac{\beta^2}{(E - \alpha_6)}} \right) \quad (54)$$

$$\text{si } \alpha_5 = \alpha_6 = \alpha \quad \therefore x = \frac{E - \alpha_i}{\beta}$$

$$\alpha_1^{II} = \alpha + \beta x^{-1} + \beta^2 x^{-2} \left( \frac{1}{x\beta - \beta x^{-1}} \right) \quad (55)$$

$$\alpha_1^{II} = \alpha + \beta x^{-1} + \beta^2 x^{-2} \left( \frac{1}{\beta(x - x^{-1})} \right) \quad (56)$$

$$\alpha_1^{II} = \alpha + \beta x^{-1} + \frac{\beta^2 x^{-2}}{\beta} \left( \frac{1}{(x - x^{-1})} \right) \quad (57)$$

$$\alpha_1^{II} = \alpha + \beta x^{-1} + \beta x^{-2} \left( \frac{1}{x - x^{-1}} \right) \quad (58)$$

$$\alpha_1^{II} = \alpha + \beta x^{-1} \left( 1 + \frac{x^{-1}}{x - x^{-1}} \right) \quad (59)$$

$$\alpha_1^{II} = \alpha + \beta x^{-1} \left( \frac{x - x^{-1} + x^{-1}}{x - x^{-1}} \right) \quad (60)$$

$$\alpha_1^{II} = \alpha + \beta x^{-1} \left( \frac{x}{x - x^{-1}} \right) \quad (61)$$

$$\alpha_1^{II} = \alpha + \frac{\beta}{x - \frac{1}{x}} \quad (62)$$

$$\alpha_1^{II} = \alpha + \frac{\beta}{\frac{x^2 - 1}{x}} \quad (63)$$

$$\alpha_1^{II} = \alpha + \beta x (x^2 - 1)^{-1} \quad (64)$$

$$\text{donde } x = \frac{E - \alpha}{\beta}$$

Trabajando con (51)

$$\beta_{14}^{II} = \frac{\beta_{16} \beta_{65}}{(E - \alpha_6)} \left( \frac{\beta_{45}}{E - \alpha_5 - \frac{\beta_{56}^2}{(E - \alpha_6)}} \right) \quad (65)$$

$$\text{si } \beta_{16} = \beta_{65} = \beta_{54} = \beta_{56} = \beta$$

$$\alpha_5 = \alpha_6 = \alpha$$

$$\beta_{14}^{II} = \frac{\beta^3}{(E - \alpha)^2 - \beta^2} = \frac{\beta^3}{x^2 \beta^2 - \beta^2} = \frac{\beta}{(x^2 - 1)} \quad (66)$$

$$\beta_{14}^{II} = \beta (x^2 - 1)^{-1} \quad (67)$$

$$\text{de (42): } G_{54} = (E - \alpha_5^I)^{-1} \left\{ \beta_{51}^I G_{14} + \beta_{54} G_{44} \right\} \quad (68)$$

sustituyendo en (29)

$$(E - \alpha_4) G_{44} = 1 + \beta_{43} G_{34} + \beta_{45} \left[ (E - \alpha_5^I)^{-1} \left\{ \beta_{51}^I G_{14} + \beta_{54} G_{44} \right\} \right] \quad (69)$$

$$\left[ E - \alpha_4 - \frac{\beta_{45}\beta_{54}}{E-\alpha_5'} \right] G_{44} = 1 + \beta_{43} G_{34} + \frac{\beta_{45}\beta_{51}'}{E-\alpha_5'} G_{14} \quad (70)$$

$$\text{si } \alpha_4^{II} = \alpha_4 + \frac{\beta_{45}\beta_{54}}{E-\alpha_5'} \quad (71)$$

$$\beta_{41}^{II} = \frac{\beta_{45}\beta_{51}'}{E-\alpha_5'} \quad (72)$$

$$\therefore (E - \alpha_4^{II}) G_{44} = 1 + \beta_{43} G_{34} + \beta_{41}^{II} G_{14} \quad (73)$$

de (71)

$$\alpha_4^{II} = \alpha_4 + \left( \frac{\beta_{45}\beta_{54}}{E-\alpha_5 - \frac{\beta_{56}^2}{(E-\alpha_6)}} \right) \quad (74)$$

$$\text{si } \beta_{45} = \beta_{54} = \beta_{56} = \beta$$

$$\alpha_4 = \alpha_6 = \alpha$$

$$\alpha_4^{II} = \alpha + \frac{\beta^2}{(E-\alpha_6)\left(\frac{\beta}{\beta}\right) - \beta x^{-1}} \quad (75)$$

$$\alpha_4^{II} = \alpha + \frac{\beta^2}{x\beta - \beta x^{-1}} \quad (76)$$

$$\alpha_4^{II} = \alpha + \frac{\beta^2}{\beta(x - x^{-1})} \quad (77)$$

$$\alpha_4^{II} = \alpha + \frac{\beta}{x - \frac{1}{x}} \quad (78)$$

$$\alpha_4^{II} = \alpha + \frac{\beta}{x^2 - 1} \quad (79)$$

$$\alpha_4^{II} = \alpha + \beta x (x^2 - 1)^{-1} \quad (80)$$

de (72)

$$\beta_{41}^{II} = \beta_{45} \left( \frac{\beta_{16}\beta_{65}}{(E-\alpha_6)} \right) \left( \frac{1}{E-\alpha_5 - \frac{\beta_{56}^2}{(E-\alpha_6)}} \right) \quad (81)$$

$$\text{si } \beta_{45} = \beta_{16} = \beta_{65} = \beta$$

$$\alpha_6 = \alpha$$

$$\beta_{41}^{II} = \frac{\beta^3}{(E-\alpha)^2 - \beta^2} \quad (82)$$

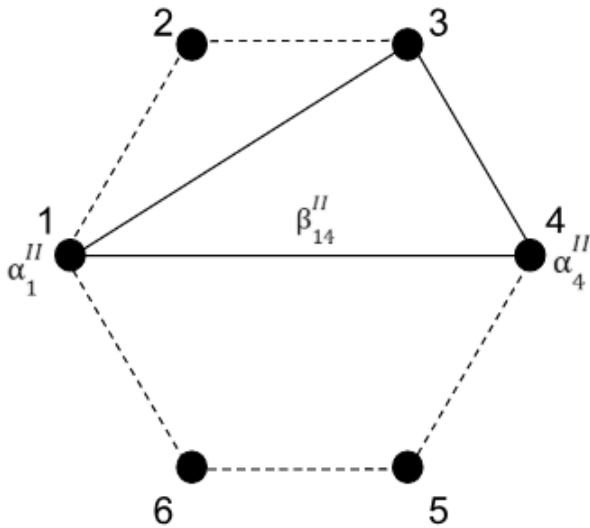
$$\beta_{41}^{II} = \frac{\beta^3}{(E-\alpha)^2 \left(\frac{\beta^2}{\beta^2}\right) - \beta^2} \quad (83)$$

$$\beta_{41}^{II} = \frac{\beta^3}{x^2 \beta^2 - \beta^2} \quad (84)$$

$$\beta_{41}^{II} = \frac{\beta}{x^2 - 1} \quad (85)$$

$$\beta_{41}^{II} = \beta \left( x^2 - 1 \right)^{-1} \quad (86)$$

### 3. Renormalización de parámetros efectivos para eliminar el átomo 2



donde

$$\alpha_1^{II} = \alpha_4^{II} = \alpha + \beta x \left( x^2 - 1 \right)^{-1}$$

$$\beta_{14}^{II} = \beta_{41}^{II} = \beta \left( x^2 - 1 \right)^{-1}$$

Expandiendo (1) para los sitios 1, 2 y 3

$$\left( E - \alpha_1^{II} \right) G_{11} = 1 + \beta_{12} G_{21} + \beta_{14}^{II} G_{51} \quad m = n = 1 \quad (87)$$

$$\left( E - \alpha_2 \right) G_{22} = 1 + \beta_{21} G_{22} + \beta_{23} G_{32} \quad m = n = 2 \quad (88)$$

$$\left( E - \alpha_3 \right) G_{33} = 1 + \beta_{32} G_{23} + \beta_{34} G_{43} \quad m = n = 3 \quad (89)$$

$$\left( E - \alpha_1^{II} \right) G_{12} = \beta_{12} G_{22} + \beta_{14} G_{42} \quad m = 1, n = 2 \quad (90)$$

$$\left( E - \alpha_1^{II} \right) G_{13} = \beta_{12} G_{23} + \beta_{14}^{II} G_{43} \quad m = 1, n = 3 \quad (91)$$

$$(E - \alpha_3)G_{21} = \beta_{21}G_{11} + \beta_{23}G_{31} \quad m = 2, n = 1 \quad (92)$$

$$(E - \alpha_3)G_{23} = \beta_{21}G_{13} + \beta_{23}G_{33} \quad m = 2, n = 3 \quad (93)$$

$$(E - \alpha_3)G_{31} = \beta_{32}G_{21} + \beta_{34}G_{41} \quad m = 3, n = 1 \quad (94)$$

$$(E - \alpha_3)G_{32} = \beta_{31}G_{12} + \beta_{34}G_{42} \quad m = 3, n = 2 \quad (95)$$

$$\text{de (92): } G_{21} = (E - \alpha_2)^{-1} \{ \beta_{21}G_{11} + \beta_{23}G_{31} \} \quad (96)$$

sustituyendo en (87)

$$(E - \alpha_1^II)G_{11} = 1 + \beta_{12} \left[ (E - \alpha_2)^{-1} \{ \beta_{21}G_{11} + \beta_{23}G_{31} \} \right] \quad (97)$$

$$(E - \alpha_1^II)G_{11} = 1 + \beta_{12}\beta_{21}(E - \alpha_2)^{-1}G_{11} + \beta_{12}\beta_{23}(E - \alpha_2)^{-1}G_{31} \quad (98)$$

$$\left[ E - \alpha_1^II - \frac{\beta_{12}\beta_{21}}{(E - \alpha_2)} \right] G_{11} = 1 + \beta_{14}^II G_{41} + \frac{\beta_{12}\beta_{23}}{(E - \alpha_2)} G_{31} \quad (99)$$

$$\text{Si } \alpha_1^{III} = \alpha_1^II + \frac{\beta_{12}\beta_{21}}{(E - \alpha_2)} \quad (100)$$

$$\beta_{13}^{III} = \frac{\beta_{12}\beta_{23}}{(E - \alpha_2)} \quad (101)$$

$$\therefore (E - \alpha_1^{III}) = 1 + \beta_{14}^II G_{21} + \beta_{13}^{III} G_{31} \quad (102)$$

de (100)

$$\alpha_1^{III} = \alpha + \beta x(x^2 - 1)^{-1} + \frac{\beta^2}{E - \alpha} \quad (103)$$

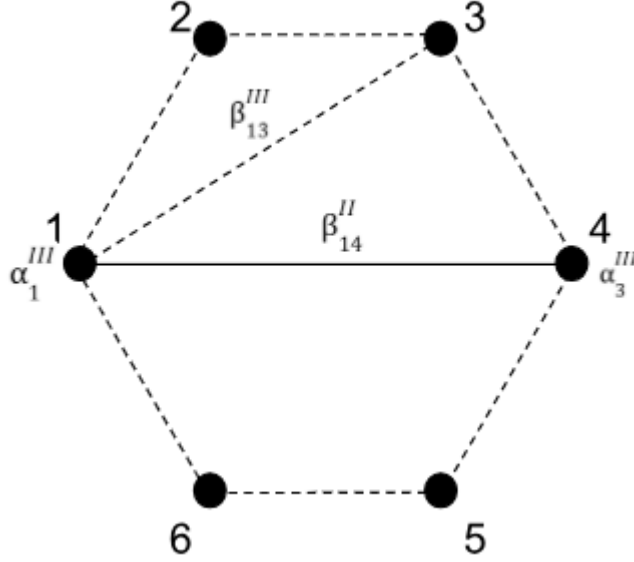
$$\alpha_1^{III} = \alpha + \beta x(x^2 - 1)^{-1} + \beta x^{-1} \left( \frac{x}{x} \right) \quad (104)$$

$$\alpha_1^{III} = \alpha + \beta x \left( \frac{1}{x^2 - 1} + \frac{1}{x^2} \right) \quad (105)$$

$$\alpha_1^{III} = \alpha + \beta x \left( \frac{x^2 + x^2 - 1}{x^2(x^2 - 1)} \right) \quad (106)$$

$$\alpha_1^{III} = \alpha + \beta x \left( \frac{2x^2 - 1}{x^2(x^2 - 1)} \right) \quad (107)$$

4. Renormalización de parámetros efectivos para eliminar el átomo 3.



donde

$$\alpha_1^{III} = \alpha + \beta x \left( \frac{2x^2 - 1}{x^2(x^2 - 1)} \right)$$

$$\alpha_3^{III} = \alpha + \beta x^{-1}$$

$$\beta_{13}^{III} = \beta x^{-1}$$

Expandiendo (1) para los sitios 1, 3 y 4

$$(E - \alpha_1^{III})G_{11} = 1 + \beta_{13}^{III}G_{31} + \beta_{14}^{II}G_{41} \quad m = n = 1 \quad (108)$$

$$(E - \alpha_3^{III})G_{33} = 1 + \beta_{31}G_{13} + \beta_{34}G_{43} \quad m = n = 3 \quad (109)$$

$$(E - \alpha_3^{III})G_{44} = 1 + \beta_{41}^{II}G_{14} + \beta_{43}G_{34} \quad m = n = 4 \quad (110)$$

$$(E - \alpha_1^{III})G_{13} = \beta_{13}^{III}G_{33} + \beta_{41}^{II}G_{43} \quad m = 1, n = 3 \quad (111)$$

$$(E - \alpha_1^{III})G_{14} = \beta_{31}^{III}G_{43} + \beta_{41}^{II}G_{44} \quad m = 1, n = 4 \quad (112)$$

$$(E - \alpha_3^{III})G_{31} = \beta_{31}^{III}G_{11} + \beta_{43}G_{41} \quad m = 3, n = 1 \quad (113)$$

$$(E - \alpha_3^{III})G_{34} = \beta_{31}^{III}G_{14} + \beta_{34}G_{44} \quad m = 3, n = 4 \quad (114)$$

$$(E - \alpha_4^I)G_{41} = \beta_{41}G_{11} + \beta_{43}G_{31} \quad m = 4, n = 1 \quad (115)$$

$$(E - \alpha_4^I)G_{43} = \beta_{41}G_{13} + \beta_{43}G_{33} \quad m = 4, n = 3 \quad (116)$$

$$\text{de (93): } G_{23} = (E - \alpha_2)^{-1} \{ \beta_{21}G_{13} + \beta_{23}G_{33} \} \quad (117)$$

sustituyendo (117) en (98)

$$(E - \alpha_3)G_{33} = 1 + \beta_{34}G_{43} + \beta_{32} \left[ (E - \alpha_2)^{-1} \{ \beta_{21}G_{13} + \beta_{23}G_{33} \} \right] \quad (118)$$

$$(E - \alpha_3)G_{33} = 1 + \beta_{34}G_{43} + \beta_{32}\beta_{21}(E - \alpha_2)^{-1}G_{13} + \beta_{32}\beta_{23}(E - \alpha_2)^{-1}G_{33} \quad (119)$$

$$\left[ E - \alpha_3 - \frac{\beta_{32}\beta_{23}}{(E - \alpha_2)} \right] G_{33} = 1 + \beta_{34}G_{43} + \frac{\beta_{32}\beta_{21}}{E - \alpha_2}G_{13} \quad (120)$$

$$\text{si } \alpha_3^{III} = \alpha_3 + \frac{\beta_{32}\beta_{23}}{(E - \alpha_2)} = \alpha + \beta x^{-1} \quad (121)$$

$$\beta_{31}^{III} = \frac{\beta_{32}\beta_{21}}{E - \alpha_2} = \beta x^{-1} \quad (122)$$

$$\therefore (E - \alpha_3^{III})G_{33} = 1 + \beta_{34}G_{43} + \beta_{31}^{III}G_{13} \quad (123)$$

$$\text{de (113): } G_{31} = (E - \alpha_3^{III})^{-1} \beta_{31}^{III}G_{11} + \beta_{43}G_{41} \quad (124)$$

sustituyendo en (108)

$$(E - \alpha_1^{III})G_{11} = 1 + \beta_{14}^I G_{41} + \beta_{13}^{III} \left[ (E - \alpha_3^{III})^{-1} \beta_{31}^{III}G_{11} + \beta_{43}G_{41} \right] \quad (125)$$

$$(E - \alpha_1^{III})G_{11} = 1 + \beta_{14}^I G_{41} + \beta_{13}^{III}\beta_{31}^{III}(E - \alpha_3^{III})^{-1}G_{11} + \beta_{13}^{III}\beta_{43}(E - \alpha_3^{III})^{-1}G_{41} \quad (126)$$

$$\left[ E - \alpha_1^{III} - \frac{\beta_{13}^{III}\beta_{31}^{III}}{E - \alpha_3^{III}} \right] G_{11} = 1 + \beta_{14}^I G_{41} + \frac{\beta_{13}^{III}\beta_{43}}{E - \alpha_3^{III}}G_{41} \quad (127)$$

si se define

$$\alpha_1^{IV} = \alpha_1^{III} + \frac{\beta_{13}^{III}\beta_{31}^{III}}{E-\alpha_3^{III}} \quad (128)$$

$$\beta_{14}^{IV} = \frac{\beta_{13}^{III}\beta_{43}^{III}}{E-\alpha_3^{III}} + \beta_{14}^{II} \quad (129)$$

de (128)

$$\alpha_1^{IV} = \alpha + \beta x \left( \frac{2x^2-1}{x^2(x^2-1)} \right) + \frac{(\beta x^{-1})^2}{E-(\alpha+\beta x^{-1})} \quad (130)$$

$$\alpha_1^{IV} = \alpha + \beta x \left( \frac{2x^2-1}{x^2(x^2-1)} \right) + \frac{\beta^2 x^{-1}}{E-\alpha-\beta x^{-1}} \quad (131)$$

$$\alpha_1^{IV} = \alpha + \beta x \left( \frac{2x^2-1}{x^2(x^2-1)} \right) + \frac{\beta^2 x^{-1}}{(E-\alpha)\left(\frac{\beta}{\beta}\right)-\beta x^{-1}} \quad (132)$$

$$\alpha_1^{IV} = \alpha + \beta x \left( \frac{2x^2-1}{x^2(x^2-1)} \right) + \frac{\beta^2 x^{-1}}{x^2-1} \left( \frac{x}{x} \right) \quad (133)$$

$$\alpha_1^{IV} = \alpha + \frac{\beta x}{x^2-1} \left( \frac{2x^2-1}{x^2} + \frac{x^{-1}}{x} \right) \quad (134)$$

$$\alpha_1^{IV} = \alpha + \frac{\beta x}{x^2-1} \left( \frac{2x^2-1}{x^2} + \frac{1}{x^2} \right) \quad (135)$$

$$\alpha_1^{IV} = \alpha + \frac{\beta x}{x^2-1} \left( \frac{2x^2-1+1}{x^2} \right) \quad (136)$$

$$\alpha_1^{IV} = \alpha + 2\beta x (x^2 - 1)^{-1} \quad (137)$$

de (129)

$$\beta_{14}^{IV} = \frac{\beta x^{-1} \cdot \beta}{E-(\alpha+\beta x^{-1})} + \beta_{14}^{II} \quad (138)$$

$$\beta_{14}^{IV} = \frac{\beta^2 x^{-1}}{(E-\alpha)\left(\frac{\beta}{\beta}\right)-\beta x^{-1}} + \beta_{14}^{II} \quad (139)$$

$$\beta_{14}^{IV} = \frac{\beta^2 x^{-1}}{x\beta-\beta x^{-1}} + \beta_{14}^{II} \quad (140)$$

$$\beta_{14}^{IV} = \frac{\beta x^{-1}}{x-x^{-1}} + \beta_{14}^{II} \quad (141)$$

$$\beta_{14}^{IV} = \frac{\beta x^{-1}}{x-\frac{1}{x}} + \beta_{14}^{II} \quad (142)$$

$$\beta_{14}^{IV} = \frac{\beta x^{-1}}{\frac{x^2-1}{x}} + \beta_{14}^{II} \quad (143)$$

$$\beta_{14}^{IV} = \frac{\beta}{x^2-1} + \beta(x^2-1)^{-1} \quad (144)$$

$$\beta_{14}^{IV} = 2\beta(x^2-1)^{-1} \quad (145)$$

$$\therefore (E - \alpha_1^{IV})G_{11} = 1 + \beta_{14}^{IV}G_{41} \quad (146)$$

de (114):  $G_{34} = (E - \alpha_3^{III})^{-1} \beta_{31}^{III}G_{14} + \beta_{34}G_{44}$  (147)

sustituyendo en (110)

$$(E - \alpha_3^{III})G_{44} = 1 + \beta_{41}^{II}G_{14} + \beta_{43} \left[ (E - \alpha_3^{III})^{-1} \beta_{31}^{III}G_{14} + \beta_{34}G_{44} \right] \quad (148)$$

$$(E - \alpha_3^{III})G_{44} = 1 + \beta_{41}^{II}G_{14} + \beta_{43}\beta_{31}^{III}(E - \alpha_3^{III})^{-1}G_{14} + \beta_{43}\beta_{34}(E - \alpha_3^{III})^{-1}G_{44} \quad (149)$$

$$\left[ E - \alpha_3^{III} - \frac{\beta_{43}\beta_{34}}{(E - \alpha_3^{III})} \right] G_{44} = 1 + \beta_{41}^{II} + \frac{\beta_{43}\beta_{31}^{III}}{E - \alpha_3^{III}}G_{14} \quad (150)$$

si se define

$$\alpha_4^{IV} = \alpha_4^{II} + \frac{\beta_{43}\beta_{34}}{(E - \alpha_3^{III})} \quad (151)$$

$$\beta_{41}^{IV} = \beta_{41}^{II} + \frac{\beta_{43}\beta_{31}^{III}}{E - \alpha_3^{III}} \quad (152)$$

$$\therefore (E - \alpha_4^{IV})G_{44} = 1 + \beta_{41}^{IV}G_{14} \quad (153)$$

de (151)

$$\alpha_4^{IV} = \alpha + \beta x(x^2 - 1)^{-1} + \frac{\beta^2}{E - (\alpha + \beta x^{-1})} \quad (154)$$

$$\alpha_4^{IV} = \alpha + \beta x(x^2 - 1)^{-1} + \frac{\beta^2}{(E - \alpha)\left(\frac{\beta}{\beta}\right) - \beta x^{-1}} \quad (155)$$

$$\alpha_4^{IV} = \alpha + \beta x(x^2 - 1)^{-1} + \frac{\beta^2}{x\beta - \beta x^{-1}} \quad (156)$$

$$\alpha_4^{IV} = \alpha + \beta x(x^2 - 1)^{-1} + \frac{\beta^2}{\beta(x - x^{-1})} \quad (157)$$

$$\alpha_4^{IV} = \alpha + \beta x(x^2 - 1)^{-1} + \frac{\beta}{x - \frac{1}{x}} \quad (158)$$

$$\alpha_4^{IV} = \alpha + \beta x(x^2 - 1)^{-1} + \frac{\beta x}{x^2 - 1} \quad (159)$$

$$\alpha_4^{IV} = \alpha + \beta x(x^2 - 1)^{-1} + \beta x(x^2 - 1)^{-1} \quad (160)$$

$$\alpha_4^{IV} = \alpha + 2\beta x(x^2 - 1)^{-1} \quad (161)$$

de (152)

$$\beta_{41}^{IV} = \beta_{41}^{II} + \frac{\beta_{43}\beta_{31}^{III}}{E - \alpha_3^{III}}$$

donde:  $\beta_{41}^{IV} = \beta_{41}^{II} = \beta(x^2 - 1)^{-1}$

(en 154 ya se demostró esta expresión )

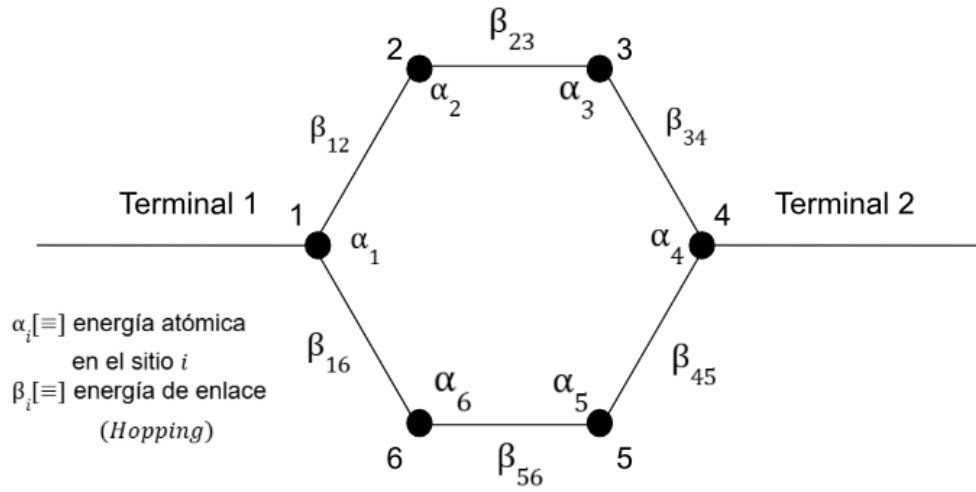
$$\beta_{41}^{IV} = \beta_{14}^{IV} = \beta(x^2 - 1)^{-1} \quad (153)$$

$$\alpha_1^{IV} = \alpha_4^{IV} = \alpha + \beta_{14}^{IV} x \quad (154)$$

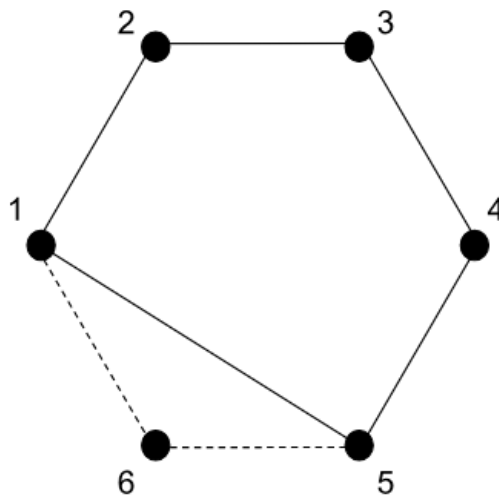
$$\text{donde } x = \frac{E - \alpha}{\beta}$$

## Anexo 2

### Ecuaciones del caso asimétrico en un átomo



1. Renormalización de parámetros efectivos para eliminar el átomo 6, conservando la energía de  $\alpha_6$



$$(E - \alpha_m)G_{mn} = \delta_{mn} + \sum_k \beta_{mk} G_{kn} \quad (1)$$

Expandiendo (1) para los sitios 1, 5 y 6

$$(E - \alpha_1)G_{11} = 1 + \beta_{12}G_{21} + \beta_{16}G_{61} \quad m = n = 1 \quad (2)$$

$$(E - \alpha_6)G_{66} = 1 + \beta_{16}G_{61} + \beta_{56}G_{65} \quad m = n = 6 \quad (3)$$

$$(E - \alpha_5)G_{55} = 1 + \beta_{54}G_{45} + \beta_{56}G_{65} \quad m = n = 5 \quad (4)$$

$$(E - \alpha_1)G_{16} = \beta_{12}G_{21} + \beta_{15}G_{56} \quad m = 1, n = 6 \quad (5)$$

$$(E - \alpha_1)G_{15} = \beta_{12}G_{25} + \beta_{16}G_{65} \quad m = 1, n = 5 \quad (6)$$

$$(E - \alpha_6)G_{61} = \beta_{61}G_{11} + \beta_{65}G_{51} \quad m = 6, n = 1 \quad (7)$$

$$(E - \alpha_6)G_{65} = \beta_{61}G_{15} + \beta_{65}G_{55} \quad m = 6, n = 5 \quad (8)$$

$$(E - \alpha_5)G_{51} = \beta_{54}G_{41} + \beta_{56}G_{61} \quad m = 5, n = 1 \quad (9)$$

$$(E - \alpha_5)G_{56} = \beta_{54}G_{46} + \beta_{56}G_{66} \quad m = 5, n = 6 \quad (10)$$

$$\text{de (7): } G_{61} = (E - \alpha_6)^{-1} \{ \beta_{61}G_{11} + \beta_{65}G_{51} \} \quad (11)$$

sustituyendo (11) en (2)

$$(E - \alpha_1)G_{11} = 1 + \beta_{12}G_{21} + \beta_{16} \left[ (E - \alpha_6)^{-1} \{ \beta_{61}G_{11} + \beta_{65}G_{51} \} \right] \quad (12)$$

$$(E - \alpha_1)G_{11} = 1 + \beta_{12}G_{21} + \beta_{16}\beta_{61}(E - \alpha_6)^{-1}G_{11} + \beta_{16}\beta_{65}(E - \alpha_6)^{-1}G_{51} \quad (13)$$

$$(E - \alpha_1)G_{11} - \beta_{16}\beta_{61}(E - \alpha_6)^{-1}G_{11} = 1 + \beta_{12}G_{21} + \beta_{16}\beta_{65}(E - \alpha_6)^{-1}G_{51} \quad (14)$$

$$\left[ E - \alpha_1 - \frac{\beta_{16}\beta_{61}}{(E - \alpha_6)} \right] G_{11} = 1 + \beta_{12}G_{21} + \frac{\beta_{16}\beta_{65}}{(E - \alpha_6)} G_{51} \quad (15)$$

$$\text{si se define } \alpha_1^I = \alpha_1 + \frac{\beta_{12}^2}{(E - \alpha_6)} \quad (16) \quad \text{y} \quad \beta_{15}^I = \frac{\beta_{16}\beta_{65}}{(E - \alpha_6)} \quad (17)$$

$$\therefore (E - \alpha_1^I)G_{11} = 1 + \beta_{12}G_{21} + \beta_{15}^I G_{51} \quad (18)$$

$$\text{de (8): } G_{65} = (E - \alpha_6)^{-1} \left\{ \beta_{61}G_{15} + \beta_{65}G_{55} \right\} \quad (19)$$

sustituyendo (19) en (4)

$$(E - \alpha_5)G_{55} = 1 + \beta_{54}G_{45} + \beta_{56} \left[ (E - \alpha_6)^{-1} \left\{ \beta_{61}G_{15} + \beta_{65}G_{55} \right\} \right] \quad (20)$$

$$(E - \alpha_5)G_{55} = 1 + \beta_{54}G_{45} + \beta_{56}\beta_{61}(E - \alpha_6)^{-1}G_{15} + \beta_{56}\beta_{65}(E - \alpha_6)^{-1}G_{55} \quad (21)$$

$$\left[ E - \alpha_5 - \frac{\beta_{56}\beta_{65}}{(E - \alpha_6)} \right] G_{55} = 1 + \beta_{54}G_{45} + \frac{\beta_{56}\beta_{61}}{(E - \alpha_6)}G_{15} \quad (22)$$

$$\text{si } \alpha_5^I = \alpha_5 + \frac{\beta_{56}^2}{(E - \alpha_6)} \quad (22) \quad \text{y} \quad \beta_{51}^I = \frac{\beta_{56}\beta_{61}}{(E - \alpha_6)} \quad (23)$$

$$\therefore (E - \alpha_5^I)G_{55} = 1 + \beta_{54}G_{45} + \beta_{51}^I G_{15} \quad (24)$$

$$\text{de (10): } G_{66} = \frac{1}{\beta_{56}} \left\{ (E - \alpha_5)G_{56} - \beta_{54}G_{46} \right\} \quad (25)$$

sustituyendo en (3)

$$(E - \alpha_6) \left[ \frac{1}{\beta_{56}} \left\{ (E - \alpha_5)G_{56} - \beta_{54}G_{46} \right\} \right] = 1 + \beta_{16}G_{61} + \beta_{56}G_{65} \quad (26)$$

$$\frac{(E - \alpha_6)(E - \alpha_5)}{\beta_{56}} G_{56} - \frac{(E - \alpha_6)\beta_{54}}{\beta_{56}} G_{46} = 1 + \beta_{61} \left[ (E - \alpha_6)^{-1} \left\{ \beta_{61}G_{11} + \beta_{65}G_{51} \right\} \right] \quad (27)$$

$$\text{si de (19): } G_{56} = \langle 6 \boxtimes G \boxtimes 5 \rangle = (E - \alpha_6)^{-1} \left\{ \beta_{61}G_{11} + \beta_{65}G_{51} \right\} \quad (28)$$

$$G_{65} = \langle 6 \boxtimes G | 5 \rangle = \langle 5 | G | 6 \rangle^* = \langle 5 \boxtimes G^\dagger \boxtimes 6 \rangle^* = (G_{56}^\dagger)^* \quad (29)$$

$$\therefore G_{56} = (G_{56}^\dagger)^* = (E - \alpha_6)^{-1} \left\{ \beta_{61}(G_{51}^\dagger)^* + \beta_{65}(G_{55}^\dagger)^* \right\}, \quad G_{55} = (G_{55}^\dagger)^* \quad (30)$$

$$\frac{(E - \alpha_5)(E - \alpha_6)(E - \alpha_6)^{-1}}{\beta_{56}} \left[ \beta_{61}(G_{51}^\dagger)^* + \beta_{65}G_{55} \right] - \frac{(E - \alpha_6)\beta_{54}}{\beta_{56}} G_{45} = 1 + \beta_{61} \left[ (E - \alpha_6)^{-1} \left\{ \beta_{61}G_{11} + \beta_{65}G_{51} \right\} \right] \quad (31)$$

$$(E - \alpha_5) \frac{\beta_{61}}{\beta_{51}} (G_{51}^\dagger)^* + (E - \alpha_5)G_{55} - \frac{(E - \alpha_6)\beta_{54}}{\beta_{56}} G_{45} = 1 + \beta_{61} \left[ (E - \alpha_6)^{-1} \left\{ \beta_{61}G_{11} + \beta_{65}G_{51} \right\} \right] + \beta_{65} \quad (32)$$

$$\text{de (3): } G_{66} = (E - \alpha_6)^{-1} \left\{ 1 + \beta_{16}G_{61} + \beta_{56}G_{65} \right\} \quad (33)$$

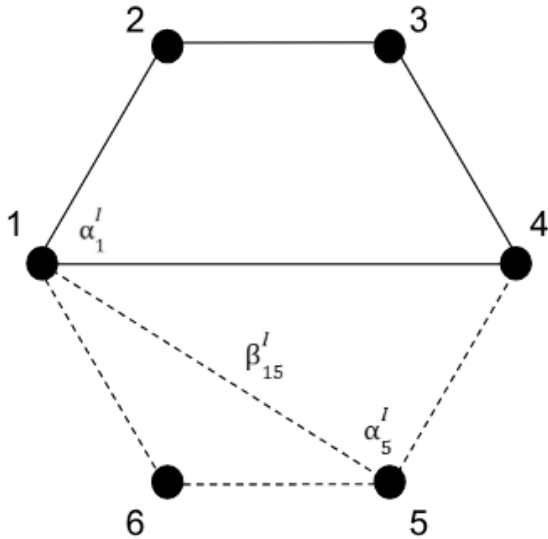
$$G_{66} = (E - \alpha_6)^{-1} \left[ 1 + \beta_{16} \left[ (E - \alpha_6)^{-1} \left\{ \beta_{61}G_{11} + \beta_{65}G_{51} \right\} \right] + \beta_{56} (E - \alpha_6)^{-1} \left\{ \beta_{61}(G_{51}^\dagger)^* + \beta_{65}(G_{55}^\dagger)^* \right\} \right] \quad (34)$$

si se define  $x = \frac{E - \alpha_i}{\beta}$

$$G_{66} = (E - \alpha_6)^{-1} \left[ 1 + \beta_{16} x^{-1} (\beta_{61} G_{11} + \beta_{65} G_{51}) + x^{-1} \left( \beta_{56} (G_{51}^\dagger)^* \beta_{65} (G_{55}^\dagger)^* \right) \right] \quad (35)$$

$$G_{66} = (E - \alpha_6)^{-1} + x^{-2} G_{55} + x^{-2} (G_{51}^\dagger)^* x^{-2} (G_{55}^\dagger)^* \quad (36)$$

2. Renormalización de parámetros efectivos para eliminar el átomo 5.



donde

$$\alpha_1^I = \alpha_1 + \frac{\beta_{12}^2}{(E - \alpha_6)}$$

$$\alpha_5^I = \alpha_5 + \frac{\beta_{56}^2}{(E - \alpha_6)}$$

$$\beta_{15}^I = \frac{\beta_{16} \beta_{65}}{(E - \alpha_6)}$$

Expandiendo (1) para los sitios 1, 4 y 5

$$(E - \alpha_1^I) G_{11} = 1 + \beta_{12} G_{21} + \beta_{15}^I G_{51} \quad m = n = 1 \quad (37)$$

$$(E - \alpha_5^I) G_{55} = 1 + \beta_{51}^I G_{51} + \beta_{54} G_{45} \quad m = n = 5 \quad (28)$$

$$(E - \alpha_4) G_{44} = 1 + \beta_{43} G_{34} + \beta_{45} G_{54} \quad m = n = 4 \quad (29)$$

$$(E - \alpha_1^I) G_{15} = \beta_{12} G_{25} + \beta_{15}^I G_{55} \quad m = 1, n = 5 \quad (30)$$

$$(E - \alpha_1^I) G_{14} = \beta_{12} G_{24} + \beta_{15}^I G_{54} \quad m = 1, n = 4 \quad (40)$$

$$(E - \alpha_5^I) G_{51} = \beta_{51}^I G_{11} + \beta_{54} G_{41} \quad m = 5, n = 1 \quad (41)$$

$$(E - \alpha_5^I)G_{54} = \beta_{51}^I G_{14} + \beta_{54} G_{44} \quad m = 5, n = 4 \quad (42)$$

$$(E - \alpha_4)G_{41} = \beta_{43} G_{31} + \beta_{45} G_{51} \quad m = 4, n = 1 \quad (43)$$

$$(E - \alpha_4)G_{45} = \beta_{43} G_{35} + \beta_{45} G_{55} \quad m = 4, n = 5 \quad (44)$$

$$\text{de (41): } G_{51} = (E - \alpha_5^I)^{-1} \{ \beta_{51}^I G_{11} + \beta_{54} G_{41} \} \quad (45)$$

sustituyendo en (37)

$$(E - \alpha_1^I)G_{11} = 1 + \beta_{12} G_{21} + \beta_{15}^I \left[ (E - \alpha_5^I)^{-1} \{ \beta_{51}^I G_{11} + \beta_{54} G_{41} \} \right] \quad (46)$$

$$(E - \alpha_1^I)G_{11} = 1 + \beta_{12} G_{21} + \beta_{15}^I \beta_{51}^I (E - \alpha_5^I)^{-1} G_{11} + \beta_{15}^I \beta_{54} (E - \alpha_5^I)^{-1} G_{41} \quad (47)$$

$$(E - \alpha_1^I)G_{11} - \beta_{15}^I \beta_{51}^I (E - \alpha_5^I)^{-1} G_{11} = 1 + \beta_{12} G_{21} + \beta_{15}^I \beta_{54} (E - \alpha_5^I)^{-1} G_{41} \quad (48)$$

$$\left[ E - \alpha_1^I - \frac{\beta_{15}^I \beta_{51}^I}{(E - \alpha_5^I)} \right] G_{11} = 1 + \beta_{12} G_{21} + \frac{\beta_{15}^I \beta_{54}}{(E - \alpha_5^I)} G_{41} \quad (49)$$

$$\text{si } \alpha_1^{II} = \alpha_1^I + \frac{\beta_{15}^I \beta_{51}^I}{(E - \alpha_5^I)} \quad (50) \quad , \quad \beta_{14}^{II} = \frac{\beta_{15}^I \beta_{54}}{(E - \alpha_5^I)} \quad (51)$$

$$\therefore (E - \alpha_1^{II})G_{11} = 1 + \beta_{12} G_{21} + \beta_{14}^{II} G_{41} \quad (52)$$

de (50)

$$\alpha_1^{II} = \alpha_1^I + \frac{\beta_{16}^2}{(E - \alpha_6)} + \left( \frac{\beta_{16} \beta_{65}}{(E - \alpha_6)} \right) \left( \frac{\beta_{56} \beta_{61}}{(E - \alpha_6)} \right) \left( \frac{1}{E - \alpha_5 - \frac{\beta_{56}^2}{(E - \alpha_6)}} \right) \quad (53)$$

$$\text{si } \beta_{16} = \beta_{65} = \beta_{61} = \beta_{56} = \beta$$

$$\alpha_1^{II} = \alpha_1^I + \frac{\beta^2}{(E - \alpha_6)} + \left( \frac{\beta^4}{(E - \alpha_6)^2} \right) \left( \frac{1}{E - \alpha_5 - \frac{\beta^2}{(E - \alpha_6)}} \right) \quad (54)$$

$$\text{si } \alpha_6 \neq \alpha_5 = \alpha \quad \therefore x = \frac{E - \alpha_i}{\beta}, x_6 = \frac{E - \alpha_i}{\beta}$$

$$\alpha_1^{II} = \alpha + \beta x_6^{-1} + \beta^2 x_6^{-2} \left( \frac{1}{x\beta - \beta x_6^{-1}} \right) \quad (55)$$

$$\alpha_1^{II} = \alpha + \beta x_6^{-1} + \beta^2 x_6^{-2} \left( \frac{1}{\beta(x - x_6^{-1})} \right) \quad (56)$$

$$\alpha_1^{II} = \alpha + \beta x_6^{-1} + \frac{\beta^2 x_6^{-2}}{\beta} \left( \frac{1}{(x - x_6^{-1})} \right) \quad (58)$$

$$\alpha_1^{II} = \alpha + \beta x_6^{-1} + \beta x_6^{-2} \left( \frac{x_6^{-1}}{(x - x_6^{-1})} \right) \left( \frac{x_6}{x_6} \right) \quad (59)$$

$$\alpha_1^{II} = \alpha + \beta x_6^{-1} + \beta x_6^{-2} \left( \frac{1}{x x_6^{-1}} \right) \quad (60)$$

$$\alpha_1^{II} = \alpha + \beta x_6^{-1} + \beta x_6^{-2} (x x_6 - 1)^{-1} \quad (61)$$

$$\text{donde } x = \frac{E - \alpha}{\beta}, \quad x_6 = \frac{E - \alpha_6}{\beta}$$

trabajando con (51)

$$\beta_{14}^{II} = \frac{\beta_{16} \beta_{65}}{(E - \alpha_6)} \left( \frac{\beta_{45}}{E - \alpha_5 - \frac{\beta_{56}^2}{(E - \alpha_6)}} \right) \quad (65)$$

$$\text{si } \beta_{16} = \beta_{65} = \beta_{54} = \beta_{56} = \beta$$

$$\alpha_6 \neq \alpha_5 = \alpha$$

$$\beta_{14}^{II} = \frac{\beta^3}{(E - \alpha)(E - \alpha_6) \left( \frac{\beta^2}{\beta^2} \right) - \beta^2} = \frac{\beta^3}{x x_6 \beta^2 - \beta^2} = \frac{\beta}{x x_6 - 1} \quad (66)$$

$$\beta_{14}^{II} = \beta (x x_6 - 1)^{-1} \quad (67)$$

$$\text{de (42): } G_{54} = (E - \alpha_5^I)^{-1} \left\{ \beta_{51}^I G_{14} + \beta_{54} G_{44} \right\} \quad (68)$$

sustituyendo (68) en (29)

$$(E - \alpha_4) G_{44} = 1 + \beta_{43} G_{34} + \beta_{45} \left[ (E - \alpha_5^I)^{-1} \left\{ \beta_{51}^I G_{14} + \beta_{54} G_{44} \right\} \right] \quad (69)$$

$$(E - \alpha_4)G_{44} = 1 + \beta_{43}G_{34} + \beta_{45}\beta_{51}^I(E - \alpha_5^I)^{-1}G_{14} + \beta_{45}\beta_{54}(E - \alpha_5^I)^{-1}G_{44} \quad (70)$$

$$\left[ E - \alpha_4 - \frac{\beta_{45}\beta_{54}}{E - \alpha_5^I} \right] G_{44} = 1 + \beta_{43}G_{34} + \frac{\beta_{45}\beta_{51}^I}{E - \alpha_5^I}G_{14} \quad (71)$$

Si se define

$$\alpha_4^{II} = \alpha_4 + \frac{\beta_{45}\beta_{54}}{E - \alpha_5^I} \quad (72)$$

$$\beta_{41}^{II} = \frac{\beta_{45}\beta_{51}^I}{E - \alpha_5^I} \quad (73)$$

$$\therefore (E - \alpha_4)G_{44} = 1 + \beta_{43}G_{34} + \beta_{41}^{II}G_{14} \quad (74)$$

de (72)

$$\alpha_4^{II} = \alpha_4 + \frac{\beta_{45}\beta_{54}}{E - \alpha_5 - \frac{\beta_{56}^2}{E - \alpha_6}} \quad (75)$$

si  $\beta_{45} = \beta_{54} = \beta_{56} = \beta$

$$\alpha_6 \neq \alpha_4 = \alpha \quad \therefore x = \frac{E - \alpha_i}{\beta}, x_6 = \frac{E - \alpha_i}{\beta}$$

$$\alpha_4^{II} = \alpha_4 + \frac{\beta^2}{(E - \alpha_5)\left(\frac{\beta}{\beta}\right) - \beta x_6^{-1}} \quad (76)$$

$$\alpha_4^{II} = \alpha_4 + \frac{\beta^2}{x\beta - \beta x_6^{-1}} \quad (78)$$

$$\alpha_4^{II} = \alpha_4 + \frac{\beta}{x - x_6^{-1}} \quad (79)$$

$$\alpha_4^{II} = \alpha_4 + \frac{\beta}{x - \frac{1}{x}} = \alpha_4 + \frac{\beta x_6}{x x_6^{-1}} \quad (80)$$

$$\alpha_4^{II} = \alpha_4 + \beta x_6 (x x_6 - 1)^{-1} \quad (81)$$

de (73)

$$\beta_{41}^{II} = \beta_{45} \left( \frac{\beta_{16} \beta_{65}}{E - \alpha_6} \right) \left( \frac{1}{E - \alpha_5 - \frac{\beta_{56}^2}{E - \alpha_6}} \right) \quad (82)$$

si  $\beta_{45} = \beta_{16} = \beta_{65} = \beta_{56} = \beta$

$$\alpha_6 \neq \alpha \quad \therefore \quad x = \frac{E - \alpha_i}{\beta} \quad , \quad x_6 = \frac{E - \alpha_i}{\beta}$$

$$\beta_{41}^{II} = \left( \frac{\beta^3}{E - \alpha_6} \right) \left( \frac{1}{E - \alpha_5 - \frac{\beta_{56}^2}{E - \alpha_6}} \right) \quad (83)$$

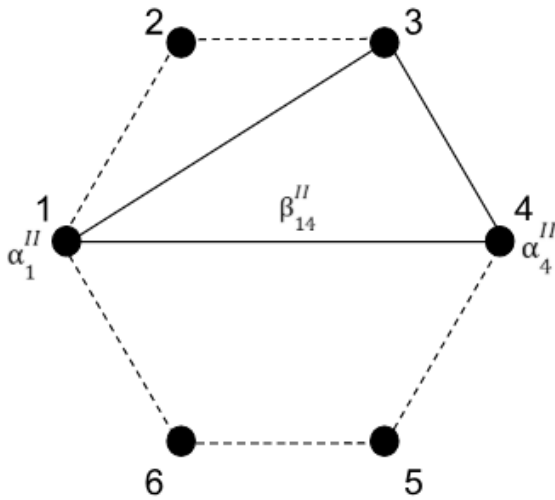
$$\beta_{41}^{II} = \left( \frac{\beta^3}{(E - \alpha_6)(E - \alpha_5) - \beta^2} \right) \quad (84)$$

$$\beta_{41}^{II} = \left( \frac{\beta^3}{(E - \alpha_6)(E - \alpha_5) \left( \frac{\beta^2}{\beta^2} \right) - \beta^2} \right) \quad (85)$$

$$\beta_{41}^{II} = \left( \frac{\beta^3}{x_6 x \beta^2 - \beta^2} \right) = \left( \frac{\beta}{x_6 x - 1} \right) \quad (86)$$

$$\beta_{41}^{II} = \beta (x_6 x - 1)^{-1} \quad (87)$$

### 3. Renormalización de parámetros efectivos para eliminar el átomo 2



donde:

$$\alpha_1^{II} = \alpha + \beta x_6^{-1} + \beta x_6^{-2} (x x_6 - 1)^{-1}$$

$$\alpha_4^{II} = \alpha_4 + \beta x_6 (x x_6 - 1)^{-1}$$

$$\beta_{14}^{II} = \beta_{41}^{II} = \beta (x_6 x - 1)^{-1}$$

Expandiendo (1) para los sitios 1, 2 y 3

$$(E - \alpha_1^{II}) G_{11} = 1 + \beta_{12} G_{21} + \beta_{14}^{II} G_{51} \quad m = n = 1 \quad (88)$$

$$(E - \alpha_2)G_{22} = 1 + \beta_{21}G_{22} + \beta_{23}G_{32} \quad m = n = 2 \quad (89)$$

$$(E - \alpha_3)G_{33} = 1 + \beta_{32}G_{23} + \beta_{34}G_{43} \quad m = n = 3 \quad (90)$$

$$(E - \alpha_1^I)G_{12} = \beta_{12}G_{22} + \beta_{14}G_{42} \quad m = 1, n = 2 \quad (91)$$

$$(E - \alpha_1^I)G_{13} = \beta_{12}G_{23} + \beta_{14}^I G_{43} \quad m = 1, n = 3 \quad (92)$$

$$(E - \alpha_3)G_{21} = \beta_{21}G_{11} + \beta_{23}G_{31} \quad m = 2, n = 1 \quad (93)$$

$$(E - \alpha_3)G_{23} = \beta_{21}G_{13} + \beta_{23}G_{33} \quad m = 2, n = 3 \quad (94)$$

$$(E - \alpha_3)G_{31} = \beta_{32}G_{21} + \beta_{34}G_{41} \quad m = 3, n = 1 \quad (95)$$

$$(E - \alpha_3)G_{32} = \beta_{31}G_{12} + \beta_{34}G_{42} \quad m = 3, n = 2 \quad (96)$$

$$\text{de (92): } G_{21} = (E - \alpha_2)^{-1} \{ \beta_{21}G_{11} + \beta_{23}G_{31} \} \quad (97)$$

sustituyendo en (88)

$$(E - \alpha_1^I)G_{11} = 1 + \beta_{12} \left[ (E - \alpha_2)^{-1} \{ \beta_{21}G_{11} + \beta_{23}G_{31} \} \right] \quad (98)$$

$$(E - \alpha_1^I)G_{11} = 1 + \beta_{12}\beta_{21}(E - \alpha_2)^{-1} G_{11} + \beta_{12}\beta_{23}(E - \alpha_2)^{-1} G_{31} \quad (99)$$

$$\left[ E - \alpha_1^I - \frac{\beta_{12}\beta_{21}}{(E - \alpha_2)} \right] G_{11} = 1 + \beta_{14}^I G_{41} + \frac{\beta_{12}\beta_{23}}{(E - \alpha_2)} G_{31} \quad (100)$$

$$\text{Si } \alpha_1^{III} = \alpha_1^I + \frac{\beta_{12}\beta_{21}}{(E - \alpha_2)} \quad (101)$$

$$\beta_{13}^{III} = \frac{\beta_{12}\beta_{23}}{(E - \alpha_2)} \quad (102)$$

$$\therefore (E - \alpha_1^{III}) = 1 + \beta_{14}^I G_{41} + \beta_{13}^{III} G_{31} \quad (103)$$

de (101)

$$\alpha_1^{III} = \alpha + \beta x_6^{-1} + \beta x_6^{-2} (x x_6 - 1)^{-1} + \frac{\beta_{12}\beta_{21}}{(E - \alpha_2)} \quad (104)$$

$$\alpha_1^{III} = \alpha + \beta x_6^{-1} + \beta x_6^{-2} (x x_6 - 1)^{-1} + \beta x^{-1} \quad (105)$$

$$\text{de (93): } G_{23} = (E - \alpha_2)^{-1} \{ \beta_{21} G_{13} + \beta_{23} G_{33} \} \quad (115)$$

sustituyendo (115) en (107)

$$(E - \alpha_3) G_{33} = 1 + \beta_{34} G_{43} + \beta_{32} \left[ (E - \alpha_2)^{-1} \{ \beta_{21} G_{13} + \beta_{23} G_{33} \} \right] \quad (116)$$

$$(E - \alpha_3) G_{33} = 1 + \beta_{34} G_{43} + \beta_{32} \beta_{21} (E - \alpha_2)^{-1} G_{13} + \beta_{32} \beta_{23} (E - \alpha_2)^{-1} G_{33} \quad (117)$$

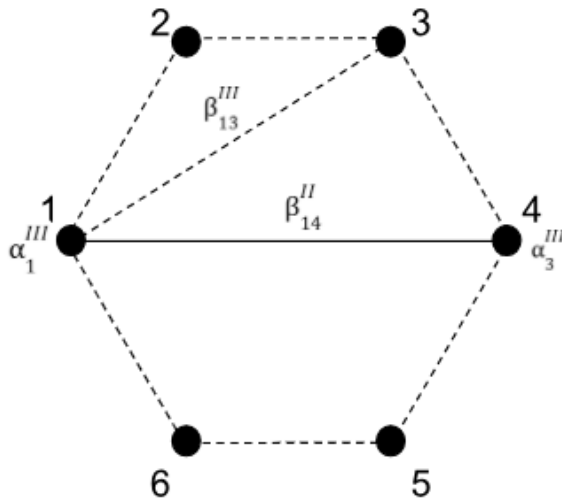
$$\left[ E - \alpha_3 - \frac{\beta_{32} \beta_{23}}{(E - \alpha_2)} \right] G_{33} = 1 + \beta_{34} G_{43} + \frac{\beta_{32} \beta_{21}}{E - \alpha_2} G_{13} \quad (118)$$

$$\text{si } \alpha_3^{III} = \alpha_3 + \frac{\beta_{32} \beta_{23}}{(E - \alpha_2)} = \alpha + \beta x^{-1} \quad (119)$$

$$\beta_{31}^{III} = \frac{\beta_{32} \beta_{21}}{E - \alpha_2} = \beta x^{-1} \quad (120)$$

$$\therefore (E - \alpha_3^{III}) G_{33} = 1 + \beta_{34} G_{43} + \beta_{31}^{III} G_{13}$$

4. Renormalización de parámetros efectivos para eliminar el átomo 3.



donde

$$\alpha_1^{III} = \alpha + \beta x_6^{-1} + \beta x_6^{-2} (x x_6 - 1)^{-1} + \beta x^{-1}$$

$$\alpha_3^{III} = \alpha + \beta x^{-1}$$

$$\beta_{31}^{III} = \beta x^{-1}$$

Expandiendo (1) para los sitios 1, 3 y 4

$$(E - \alpha_1^{III})G_{11} = 1 + \beta_{13}^{III}G_{31} + \beta_{14}^{II}G_{41} \quad m = n = 1 \quad (106)$$

$$(E - \alpha_3^{III})G_{33} = 1 + \beta_{31}G_{13} + \beta_{34}G_{43} \quad m = n = 3 \quad (107)$$

$$(E - \alpha_3^{III})G_{44} = 1 + \beta_{41}^{II}G_{14} + \beta_{43}G_{34} \quad m = n = 4 \quad (108)$$

$$(E - \alpha_1^{III})G_{13} = \beta_{13}^{III}G_{33} + \beta_{41}^{II}G_{43} \quad m = 1, n = 3 \quad (109)$$

$$(E - \alpha_1^{III})G_{14} = \beta_{31}^{III}G_{43} + \beta_{41}^{II}G_{44} \quad m = 1, n = 4 \quad (110)$$

$$(E - \alpha_3^{III})G_{31} = \beta_{31}^{III}G_{11} + \beta_{43}G_{41} \quad m = 3, n = 1 \quad (111)$$

$$(E - \alpha_3^{III})G_{34} = \beta_{31}^{III}G_{14} + \beta_{34}G_{44} \quad m = 3, n = 4 \quad (112)$$

$$(E - \alpha_4^{II})G_{41} = \beta_{41}G_{11} + \beta_{43}G_{31} \quad m = 4, n = 1 \quad (113)$$

$$(E - \alpha_4^{II})G_{43} = \beta_{41}G_{13} + \beta_{43}G_{33} \quad m = 4, n = 3 \quad (114)$$

$$\text{de (113): } G_{31} = (E - \alpha_3^{III})^{-1} \beta_{31}^{III}G_{11} + \beta_{43}G_{41} \quad (122)$$

sustituyendo en (108)

$$(E - \alpha_1^{III})G_{11} = 1 + \beta_{14}^{II}G_{41} + \beta_{13}^{III} \left[ (E - \alpha_3^{III})^{-1} \beta_{31}^{III}G_{11} + \beta_{43}G_{41} \right] \quad (123)$$

$$(E - \alpha_1^{III})G_{11} = 1 + \beta_{14}^{II}G_{41} + \beta_{13}^{III} \beta_{31}^{III} (E - \alpha_3^{III})^{-1} G_{11} + \beta_{13}^{III} \beta_{43} (E - \alpha_3^{III})^{-1} G_{41} \quad (124)$$

$$\left[ E - \alpha_1^{III} - \frac{\beta_{13}^{III} \beta_{31}^{III}}{E - \alpha_3^{III}} \right] G_{11} = 1 + \beta_{14}^{II}G_{41} + \frac{\beta_{13}^{III} \beta_{43}}{E - \alpha_3^{III}} G_{41} \quad (125)$$

si se define

$$\alpha_1^{IV} = \alpha_1^{III} + \frac{\beta_{13}^{III}\beta_{31}^{III}}{E-\alpha_3^{III}} \quad (126)$$

$$\beta_{14}^{IV} = \frac{\beta_{13}^{III}\beta_{43}^{III}}{E-\alpha_3^{III}} + \beta_{14}^{II} \quad (127)$$

trabajando con (126)

$$\alpha_1^{IV} = \alpha + \beta x_6^{-1} + \beta x_6^{-2} (x x_6 - 1)^{-1} + \beta x^{-1} + \frac{\beta^2 x^{-2}}{E - (\alpha_3 + \beta x^{-1})} \quad (128)$$

$$\alpha_1^{IV} = \alpha + \beta x_6^{-1} + \beta x_6^{-2} (x x_6 - 1)^{-1} + \beta x^{-1} + \frac{\beta^2 x^{-2}}{(E-\alpha)\left(\frac{\beta}{\beta}\right) - \beta x^{-1}} \quad (129)$$

$$\alpha_1^{IV} = \alpha + \beta x_6^{-1} + \beta x_6^{-2} (x x_6 - 1)^{-1} + \beta x^{-1} + \frac{\beta^2 x^{-2}}{x\beta - \beta x^{-1}} \quad (130)$$

$$\alpha_1^{IV} = \alpha + \beta x_6^{-1} + \beta x_6^{-2} (x x_6 - 1)^{-1} + \beta x^{-1} + \frac{\beta^2 x^{-2}}{\beta(x-x^{-1})} \quad (131)$$

$$\alpha_1^{IV} = \alpha + \beta x_6^{-1} + \beta x_6^{-2} (x x_6 - 1)^{-1} + \beta x^{-1} + \frac{\beta x^{-2}}{(x-x^{-1})} \quad (132)$$

$$\alpha_1^{IV} = \alpha + \beta x_6^{-1} + \beta x_6^{-2} (x x_6 - 1)^{-1} + \beta x^{-1} \left(1 + \frac{x^{-2}}{x-x^{-1}}\right) \left(\frac{x}{x}\right) \quad (133)$$

$$\alpha_1^{IV} = \alpha + \beta x_6^{-1} + \beta x_6^{-2} (x x_6 - 1)^{-1} + \beta x^{-1} \left(1 + \frac{1}{x^2-1}\right) \quad (134)$$

$$\alpha_1^{IV} = \alpha + \beta x_6^{-1} + \beta x_6^{-2} (x x_6 - 1)^{-1} + \beta x^{-1} \left(1 + (x^2 - 1)^{-1}\right) \quad (135)$$

trabajando con (127)

$$\beta_{14}^{IV} = \frac{(\beta x^{-1})\beta}{E - (\alpha_3 + \beta x^{-1})} + \beta_{14}^{II} \quad (136)$$

$$\beta_{14}^{IV} = \frac{\beta^2 x^{-1}}{(E-\alpha_3)\left(\frac{\beta}{\beta}\right) - \beta x^{-1}} + \beta_{14}^{II} \quad (137)$$

$$\beta_{14}^{IV} = \frac{\beta^2 x^{-1}}{x\beta - \beta x^{-1}} + \beta_{14}^{II} \quad (138)$$

$$\beta_{14}^{IV} = \frac{\beta^2 x^{-1}}{\beta(x-x^{-1})} + \beta_{14}^{II} \quad (139)$$

$$\beta_{14}^{IV} = \frac{\beta^2 x^{-1}}{\beta(x-x^{-1})} + \beta_{14}^{II} \quad (140)$$

$$\beta_{14}^{IV} = \frac{\beta x^{-1}}{x-x^{-1}} + \beta_{14}^{II} \quad (150)$$

$$\beta_{14}^{IV} = \beta x^{-1}(x-x^{-1})^{-1} + \beta(x_6 x - 1)^{-1} \quad (151)$$

$$\therefore (E - \alpha_1^{IV})G_{11} = 1 + \beta_{14}^{IV}G_{41} \quad (152)$$

de (114):  $G_{34} = (E - \alpha_3^{III})^{-1} \beta_{31}^{III} G_{14} + \beta_{34} G_{44}$  (153)

sustituyendo en (108)

$$(E - \alpha_3^{III})G_{44} = 1 + \beta_{41}^{II} G_{14} + \beta_{43} \left[ (E - \alpha_3^{III})^{-1} \beta_{31}^{III} G_{14} + \beta_{34} G_{44} \right] \quad (154)$$

$$(E - \alpha_3^{III})G_{44} = 1 + \beta_{41}^{II} G_{14} + \beta_{43} \beta_{31}^{III} (E - \alpha_3^{III})^{-1} G_{14} + \beta_{43} \beta_{34} (E - \alpha_3^{III})^{-1} G_{44} \quad (155)$$

$$\left[ E - \alpha_3^{III} - \frac{\beta_{43} \beta_{34}}{(E - \alpha_3^{III})} \right] G_{44} = 1 + \beta_{41}^{II} + \frac{\beta_{43} \beta_{31}^{III}}{E - \alpha_3^{III}} G_{14} \quad (156)$$

si se define

$$\alpha_4^{IV} = \alpha_4^{II} + \frac{\beta_{43} \beta_{34}}{(E - \alpha_3^{III})} \quad (157)$$

$$\beta_{41}^{IV} = \beta_{41}^{II} + \frac{\beta_{43} \beta_{31}^{III}}{E - \alpha_3^{III}} \quad (158)$$

$$\therefore (E - \alpha_4^{IV})G_{44} = 1 + \beta_{41}^{IV} G_{14} \quad (159)$$

de (157)

$$\alpha_4^{IV} = \alpha + \beta x_6 (x x_6 - 1)^{-1} + \frac{\beta^2}{E - (\alpha + \beta x^{-1})} \quad (160)$$

$$\alpha_4^{IV} = \alpha + \beta x_6 (x x_6 - 1)^{-1} + \frac{\beta^2}{(E - \alpha) \left( \frac{\beta}{\beta} \right) - \beta x^{-1}} \quad (161)$$

$$\alpha_4^{IV} = \alpha + \beta x_6 (x x_6 - 1)^{-1} + \frac{\beta^2}{x\beta - \beta x^{-1}} \quad (162)$$

$$\alpha_4^{IV} = \alpha + \beta x_6 (xx_6 - 1)^{-1} + \frac{\beta^2}{\beta(x-x^{-1})} \quad (163)$$

$$\alpha_4^{IV} = \alpha + \beta x_6 (xx_6 - 1)^{-1} + \frac{\beta}{x-x^{-1}} \quad (164)$$

de (158)

$$\beta_{41}^{IV} = \beta (xx_6 - 1)^{-1} + \frac{\beta^2 x^{-1}}{E-(\alpha+\beta x^{-1})} \quad (165)$$

$$\beta_{41}^{IV} = \beta (xx_6 - 1)^{-1} + \frac{\beta^2 x^{-1}}{\beta(x-x^{-1})} \quad (166)$$

$$\beta_{41}^{IV} = \beta (xx_6 - 1)^{-1} + \frac{\beta x^{-1}}{x-x^{-1}} \quad (167)$$

∴

$$\beta_{41}^{IV} = \beta_{14}^{IV} = \beta (xx_6 - 1)^{-1} + \frac{\beta x^{-1}}{x-x^{-1}} \quad (168)$$

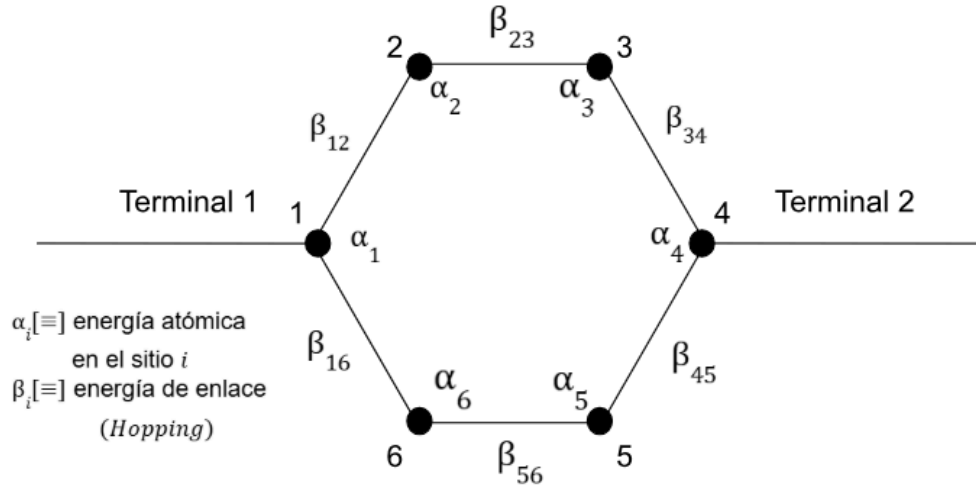
$$\alpha_4^{IV} = \alpha + \beta x_6 (xx_6 - 1)^{-1} + \frac{\beta}{x-x^{-1}} \quad (169)$$

$$\alpha_1^{IV} = \alpha + \beta x_6^{-1} + \beta x_6^{-2} (x x_6 - 1)^{-1} + \beta x^{-1} \left( 1 + (x^2 - 1)^{-1} \right) \quad (170)$$

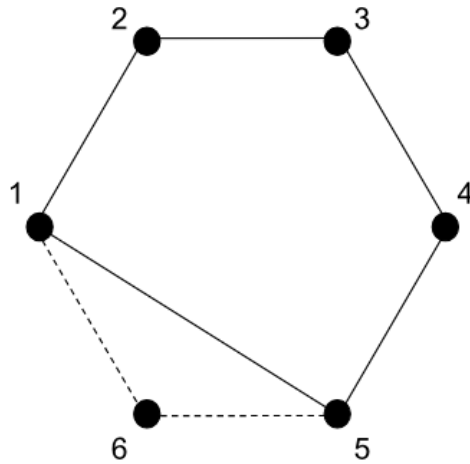
$$\text{donde } x = \frac{E-\alpha}{\beta} \quad , \quad x_6 = \frac{E-\alpha_6}{\beta}$$

## Anexo 3

### Ecuaciones del caso asimétrico en dos átomos



1. Renormalización de parámetros efectivos para eliminar el átomo 6, conservando la energía de  $\alpha_6$  y  $\alpha_5$



$$(E - \alpha_m)G_{mn} = \delta_{mn} + \sum_k \beta_{mk} G_{kn} \quad (1)$$

Expandiendo (1) para los sitios 1, 5 y 6

$$(E - \alpha_1)G_{11} = 1 + \beta_{12}G_{21} + \beta_{16}G_{61} \quad m = n = 1 \quad (2)$$

$$(E - \alpha_6)G_{66} = 1 + \beta_{16}G_{66} + \beta_{56}G_{65} \quad m = n = 6 \quad (3)$$

$$(E - \alpha_5)G_{55} = 1 + \beta_{54}G_{45} + \beta_{56}G_{65} \quad m = n = 5 \quad (4)$$

$$(E - \alpha_1)G_{16} = \beta_{12}G_{21} + \beta_{15}G_{56} \quad m = 1, n = 6 \quad (5)$$

$$(E - \alpha_1)G_{15} = \beta_{12}G_{25} + \beta_{16}G_{65} \quad m = 1, n = 5 \quad (6)$$

$$(E - \alpha_6)G_{61} = \beta_{61}G_{11} + \beta_{65}G_{51} \quad m = 6, n = 1 \quad (7)$$

$$(E - \alpha_6)G_{65} = \beta_{61}G_{15} + \beta_{65}G_{55} \quad m = 6, n = 5 \quad (8)$$

$$(E - \alpha_5)G_{51} = \beta_{54}G_{41} + \beta_{56}G_{61} \quad m = 5, n = 1 \quad (9)$$

$$(E - \alpha_5)G_{56} = \beta_{54}G_{46} + \beta_{56}G_{66} \quad m = 5, n = 6 \quad (10)$$

$$\text{de (7): } G_{61} = (E - \alpha_6)^{-1} \{ \beta_{61}G_{11} + \beta_{65}G_{51} \} \quad (11)$$

sustituyendo (11) en (2)

$$(E - \alpha_1)G_{11} = 1 + \beta_{12}G_{21} + \beta_{16} \left[ (E - \alpha_6)^{-1} \{ \beta_{61}G_{11} + \beta_{65}G_{51} \} \right] \quad (12)$$

$$(E - \alpha_1)G_{11} = 1 + \beta_{12}G_{21} + \beta_{16} \beta_{61} (E - \alpha_6)^{-1} G_{11} + \beta_{16} \beta_{65} (E - \alpha_6)^{-1} G_{51} \quad (13)$$

$$(E - \alpha_1)G_{11} - \beta_{16} \beta_{61} (E - \alpha_6)^{-1} G_{11} = 1 + \beta_{12}G_{21} + \beta_{16} \beta_{65} (E - \alpha_6)^{-1} G_{51} \quad (14)$$

$$\left[ E - \alpha_1 - \frac{\beta_{16} \beta_{61}}{(E - \alpha_6)} \right] G_{11} = 1 + \beta_{12}G_{21} + \frac{\beta_{16} \beta_{65}}{(E - \alpha_6)} G_{51} \quad (15)$$

$$\text{si se define } \alpha_1^I = \alpha_1 + \frac{\beta_{12}^2}{(E - \alpha_6)} \quad (16) \quad \text{y}$$

$$\beta_{15}^I = \frac{\beta_{16} \beta_{65}}{(E - \alpha_6)} \quad (17)$$

$$\therefore (E - \alpha_1^I)G_{11} = 1 + \beta_{12}G_{21} + \beta_{15}^I G_{51} \quad (18)$$

$$\text{de (8): } G_{65} = (E - \alpha_6)^{-1} \left\{ \beta_{61}G_{15} + \beta_{65}G_{55} \right\} \quad (19)$$

sustituyendo (19) en (4)

$$(E - \alpha_5)G_{55} = 1 + \beta_{54}G_{45} + \beta_{56}\left[(E - \alpha_6)^{-1}\left\{\beta_{61}G_{15} + \beta_{65}G_{55}\right\}\right] \quad (20)$$

$$(E - \alpha_5)G_{55} = 1 + \beta_{54}G_{45} + \beta_{56}\beta_{61}(E - \alpha_6)^{-1}G_{15} + \beta_{56}\beta_{65}(E - \alpha_6)^{-1}G_{55} \quad (21)$$

$$\left[E - \alpha_5 - \frac{\beta_{56}\beta_{65}}{(E - \alpha_6)}\right]G_{55} = 1 + \beta_{54}G_{45} + \frac{\beta_{56}\beta_{61}}{(E - \alpha_6)}G_{15} \quad (22)$$

$$\text{si } \alpha_5^I = \alpha_5 + \frac{\beta_{56}^2}{(E - \alpha_6)} \quad (22)$$

$$\beta_{51}^I = \frac{\beta_{56}\beta_{61}}{(E - \alpha_6)} \quad (23)$$

$$\therefore (E - \alpha_5^I)G_{55} = 1 + \beta_{54}G_{45} + \beta_{51}^I G_{15} \quad (24)$$

$$\text{de (10): } G_{66} = \frac{1}{\beta_{56}} \left\{ (E - \alpha_5)G_{56} - \beta_{54}G_{46} \right\} \quad (25)$$

sustituyendo en (3)

$$(E - \alpha_6) \left[ \frac{1}{\beta_{56}} \left\{ (E - \alpha_5)G_{56} - \beta_{54}G_{46} \right\} \right] = 1 + \beta_{16}G_{61} + \beta_{56}G_{65} \quad (26)$$

$$\frac{(E - \alpha_6)(E - \alpha_5)}{\beta_{56}}G_{56} - \frac{(E - \alpha_6)\beta_{54}}{\beta_{56}}G_{46} = 1 + \beta_{61} \left[ (E - \alpha_6)^{-1} \left\{ \beta_{61}G_{11} + \beta_{65}G_{51} \right\} \right] \quad (27)$$

$$\text{si de (19): } G_{56} = \langle 6|G|5 \rangle = (E - \alpha_6)^{-1} \left\{ \beta_{61}G_{11} + \beta_{65}G_{51} \right\} \quad (28)$$

$$G_{65} = \langle 6|G|5 \rangle = \langle 5|G|6 \rangle^* = \langle 5|G^\dagger|6 \rangle^* = (G_{56}^\dagger)^* \quad (29)$$

$$\therefore G_{56} = (G_{56}^\dagger)^* = (E - \alpha_6)^{-1} \left\{ \beta_{61}(G_{51}^\dagger)^* + \beta_{65}(G_{55}^\dagger)^* \right\}, \quad G_{55} = (G_{55}^\dagger)^* \quad (30)$$

$$\frac{(E - \alpha_5)(E - \alpha_6)(E - \alpha_6)^{-1}}{\beta_{56}} \left[ \beta_{61}(G_{51}^\dagger)^* + \beta_{65}G_{55} \right] - \frac{(E - \alpha_6)}{\beta_{56}}\beta_{54}G_{45} = 1 + \beta_{61} \left[ (E - \alpha_6)^{-1} \left\{ \beta_{61}G_{11} + \beta_{65}G_{51} \right\} \right] \quad (31)$$

$$(E - \alpha_5) \frac{\beta_{61}}{\beta_{51}} (G_{51}^\dagger)^* + (E - \alpha_5)G_{55} - \frac{(E - \alpha_6)\beta_{54}}{\beta_{56}}G_{45} = 1 + \beta_{61} \left[ (E - \alpha_6)^{-1} \left\{ \beta_{61}G_{11} + \beta_{65}G_{51} \right\} \right] + \beta_{65} \quad (32)$$

$$\text{de (3): } G_{66} = (E - \alpha_6)^{-1} \left\{ 1 + \beta_{16}G_{61} + \beta_{56}G_{65} \right\} \quad (33)$$

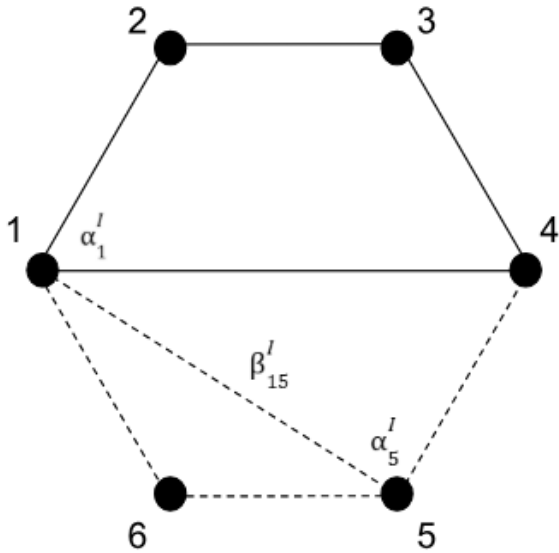
$$G_{66} = (E - \alpha_6)^{-1} \left[ 1 + \beta_{16} \left[ (E - \alpha_6)^{-1} \{ \beta_{61} G_{11} + \beta_{65} G_{51} \} \right] + \beta_{56} (E - \alpha_6)^{-1} \left\{ \beta_{61} (G_{51}^\dagger)^* + \beta_{65} (G_{55}^\dagger)^* \right\} \right] \quad (34)$$

si se define  $x = \frac{E - \alpha_i}{\beta}$

$$G_{66} = (E - \alpha_6)^{-1} \left[ 1 + \beta_{16} x^{-1} (\beta_{61} G_{11} + \beta_{65} G_{51}) + x^{-1} (\beta_{56} (G_{51}^\dagger)^* + \beta_{65} (G_{55}^\dagger)^*) \right] \quad (35)$$

$$G_{66} = (E - \alpha_6)^{-1} + x^{-2} G_{55} + x^{-2} (G_{51}^\dagger)^* x^{-2} (G_{55}^\dagger)^* \quad (36)$$

2. Renormalización de parámetros efectivos para eliminar el átomo 5.



donde

$$\alpha_1^I = \alpha_1 + \frac{\beta_{12}^2}{(E - \alpha_6)}$$

$$\alpha_5^I = \alpha_5 + \frac{\beta_{56}^2}{(E - \alpha_6)}$$

$$\beta_{15}^I = \frac{\beta_{16} \beta_{65}}{(E - \alpha_6)}$$

Expandiendo (1) para los sitios 1, 4 y 5

$$(E - \alpha_1^I) G_{11} = 1 + \beta_{12} G_{21} + \beta_{15}^I G_{51} \quad m = n = 1 \quad (37)$$

$$(E - \alpha_5^I) G_{55} = 1 + \beta_{51}^I G_{51} + \beta_{54} G_{45} \quad m = n = 5 \quad (28)$$

$$(E - \alpha_4) G_{44} = 1 + \beta_{43} G_{34} + \beta_{45} G_{54} \quad m = n = 4 \quad (29)$$

$$(E - \alpha_1^I) G_{15} = \beta_{12} G_{25} + \beta_{15}^I G_{55} \quad m = 1, n = 5 \quad (30)$$

$$(E - \alpha_1^I)G_{14} = \beta_{12}G_{24} + \beta_{15}^I G_{54} \quad m = 1, n = 4 \quad (40)$$

$$(E - \alpha_5^I)G_{51} = \beta_{51}^I G_{11} + \beta_{54}G_{41} \quad m = 5, n = 1 \quad (41)$$

$$(E - \alpha_5^I)G_{54} = \beta_{51}^I G_{14} + \beta_{54}G_{44} \quad m = 5, n = 4 \quad (42)$$

$$(E - \alpha_4)G_{41} = \beta_{43}G_{31} + \beta_{45}G_{51} \quad m = 4, n = 1 \quad (43)$$

$$(E - \alpha_4)G_{45} = \beta_{43}G_{35} + \beta_{45}G_{55} \quad m = 4, n = 5 \quad (44)$$

$$\text{de (41): } G_{51} = (E - \alpha_5^I)^{-1} \{ \beta_{51}^I G_{11} + \beta_{54}G_{41} \} \quad (45)$$

sustituyendo en (37)

$$(E - \alpha_1^I)G_{11} = 1 + \beta_{12}G_{21} + \beta_{15}^I \left[ (E - \alpha_5^I)^{-1} \{ \beta_{51}^I G_{11} + \beta_{54}G_{41} \} \right] \quad (46)$$

$$(E - \alpha_1^I)G_{11} = 1 + \beta_{12}G_{21} + \beta_{15}^I \beta_{51}^I (E - \alpha_5^I)^{-1} G_{11} + \beta_{15}^I \beta_{54} (E - \alpha_5^I)^{-1} G_{41} \quad (47)$$

$$(E - \alpha_1^I)G_{11} - \beta_{15}^I \beta_{51}^I (E - \alpha_5^I)^{-1} G_{11} = 1 + \beta_{12}G_{21} + \beta_{15}^I \beta_{54} (E - \alpha_5^I)^{-1} G_{41} \quad (48)$$

$$\left[ E - \alpha_1^I - \frac{\beta_{15}^I \beta_{51}^I}{(E - \alpha_5^I)} \right] G_{11} = 1 + \beta_{12}G_{21} + \frac{\beta_{15}^I \beta_{54}}{(E - \alpha_5^I)} G_{41} \quad (49)$$

$$\text{si } \alpha_1^{II} = \alpha_1^I + \frac{\beta_{15}^I \beta_{51}^I}{(E - \alpha_5^I)} \quad (50) \quad , \quad \beta_{14}^{II} = \frac{\beta_{15}^I \beta_{54}}{(E - \alpha_5^I)} \quad (51)$$

$$\therefore (E - \alpha_1^{II})G_{11} = 1 + \beta_{12}G_{21} + \beta_{14}^{II}G_{41} \quad (52)$$

de (50)

$$\alpha_1^{II} = \alpha_1^I + \frac{\beta_{16}^2}{(E - \alpha_6)} + \left( \frac{\beta_{16}\beta_{65}}{(E - \alpha_6)} \right) \left( \frac{\beta_{56}\beta_{61}}{(E - \alpha_6)} \right) \left( \frac{1}{E - \alpha_5 - \frac{\beta_{56}^2}{(E - \alpha_6)}} \right) \quad (53)$$

$$\text{si } \beta_{16} = \beta_{65} = \beta_{61} = \beta_{56} = \beta$$

$$\alpha_1^{II} = \alpha_1^I + \frac{\beta^2}{(E - \alpha_6)} + \left( \frac{\beta^4}{(E - \alpha_6)^2} \right) \left( \frac{1}{E - \alpha_5 - \frac{\beta^2}{(E - \alpha_6)}} \right) \quad (54)$$

$$\text{si } \alpha_6 \neq \alpha_5 \neq \alpha \quad \therefore \quad x = \frac{E-\alpha_i}{\beta}, \quad x_6 = \frac{E-\alpha_6}{\beta}, \quad x_5 = \frac{E-\alpha_5}{\beta}$$

$$\alpha_1^{II} = \alpha + \beta x_6^{-1} + \beta^2 x_6^{-2} \left( \frac{1}{x_5 \beta - \beta x_6^{-1}} \right) \quad (55)$$

$$\alpha_1^{II} = \alpha + \beta x_6^{-1} + \beta^2 x_6^{-2} \left( \frac{1}{\beta(x_5 - x_6^{-1})} \right) \quad (56)$$

$$\alpha_1^{II} = \alpha + \beta x_6^{-1} + \frac{\beta^2 x_6^{-2}}{\beta} \left( \frac{1}{(x_5 - x_6^{-1})} \right) \quad (58)$$

$$\alpha_1^{II} = \alpha + \beta x_6^{-1} + \beta x_6^{-2} \left( \frac{x_6^{-1}}{(x_5 - x_6^{-1})} \right) \left( \frac{x_6}{x_6} \right) \quad (59)$$

$$\alpha_1^{II} = \alpha + \beta x_6^{-1} + \beta x_6^{-2} \left( \frac{1}{x_5 x_6 - 1} \right) \quad (60)$$

$$\alpha_1^{II} = \alpha + \beta x_6^{-1} + \beta x_6^{-2} (x_5 x_6 - 1)^{-1} \quad (61)$$

$$\text{donde } x = \frac{E-\alpha}{\beta}, \quad x_6 = \frac{E-\alpha_6}{\beta}, \quad x_5 = \frac{E-\alpha_5}{\beta}$$

trabajando con (51)

$$\beta_{14}^{II} = \frac{\beta_{16} \beta_{65}}{(E-\alpha_6)} \left( \frac{\beta_{45}}{E-\alpha_5 - \frac{\beta_{56}^2}{(E-\alpha_6)}} \right) \quad (65)$$

$$\text{si } \beta_{16} = \beta_{65} = \beta_{54} = \beta_{56} = \beta$$

$$\alpha_6 \neq \alpha_5 \neq \alpha$$

$$\beta_{14}^{II} = \frac{\beta^3}{(E-\alpha)(E-\alpha_6) \left( \frac{\beta^2}{\beta^2} \right) - \beta^2} = \frac{\beta^3}{x_5 x_6 \beta^2 - \beta^2} = \frac{\beta}{x_5 x_6 - 1} \quad (66)$$

$$\beta_{14}^{II} = \beta (x_5 x_6 - 1)^{-1} \quad (67)$$

$$\text{de (42): } G_{54} = (E - \alpha_5^I)^{-1} \left\{ \beta_{51}^I G_{14} + \beta_{54} G_{44} \right\} \quad (68)$$

sustituyendo (68) en (29)

$$(E - \alpha_4)G_{44} = 1 + \beta_{43}G_{34} + \beta_{45}\left[(E - \alpha_5')^{-1}\{\beta_{51}'G_{14} + \beta_{54}G_{44}\}\right] \quad (69)$$

$$(E - \alpha_4)G_{44} = 1 + \beta_{43}G_{34} + \beta_{45}\beta_{51}'(E - \alpha_5')^{-1}G_{14} + \beta_{45}\beta_{54}(E - \alpha_5')^{-1}G_{44} \quad (70)$$

$$\left[E - \alpha_4 - \frac{\beta_{45}\beta_{54}}{E - \alpha_5'}\right]G_{44} = 1 + \beta_{43}G_{34} + \frac{\beta_{45}\beta_{51}'}{E - \alpha_5'}G_{14} \quad (71)$$

Si se define

$$\alpha_4^{II} = \alpha_4 + \frac{\beta_{45}\beta_{54}}{E - \alpha_5'} \quad (72)$$

$$\beta_{41}^{II} = \frac{\beta_{45}\beta_{51}'}{E - \alpha_5'} \quad (73)$$

$$\therefore (E - \alpha_4)G_{44} = 1 + \beta_{43}G_{34} + \beta_{41}^{II}G_{14} \quad (74)$$

de (72)

$$\alpha_4^{II} = \alpha_4 + \frac{\beta_{45}\beta_{54}}{E - \alpha_5' - \frac{\beta_{56}^2}{E - \alpha_6}} \quad (75)$$

$$\text{si } \beta_{45} = \beta_{54} = \beta_{56} = \beta$$

$$\alpha_6 \neq \alpha_4 = \alpha \quad \therefore x = \frac{E - \alpha_i}{\beta}, x_6 = \frac{E - \alpha_i}{\beta}$$

$$\alpha_4^{II} = \alpha_4 + \frac{\beta^2}{(E - \alpha_5')\left(\frac{\beta}{\beta}\right) - \beta x_6^{-1}} \quad (76)$$

$$\alpha_4^{II} = \alpha_4 + \frac{\beta^2}{x_5\beta - \beta x_6^{-1}} \quad (78)$$

$$\alpha_4^{II} = \alpha_4 + \frac{\beta}{x_5 - x_6^{-1}} \quad (79)$$

$$\alpha_4^{II} = \alpha_4 + \frac{\beta}{x_5 - \frac{1}{x}} = \alpha_4 + \frac{\beta x_6}{xx_5x_6 - 1} \quad (80)$$

$$\alpha_4^{II} = \alpha_4 + \beta x_6(x_5x_6 - 1)^{-1} \quad (81)$$

de (73)

$$\beta_{41}^{II} = \beta_{45} \left( \frac{\beta_{16} \beta_{65}}{E - \alpha_6} \right) \left( \frac{1}{E - \alpha_5 - \frac{\beta_{56}^2}{E - \alpha_6}} \right) \quad (82)$$

$$\text{si } \beta_{45} = \beta_{16} = \beta_{65} = \beta_{56} = \beta$$

$$\alpha_6 \neq \alpha \quad \therefore \quad x = \frac{E - \alpha_i}{\beta} \quad , \quad x_6 = \frac{E - \alpha_i}{\beta}$$

$$\beta_{41}^{II} = \left( \frac{\beta^3}{E - \alpha_6} \right) \left( \frac{1}{E - \alpha_5 - \frac{\beta_{56}^2}{E - \alpha_6}} \right) \quad (83)$$

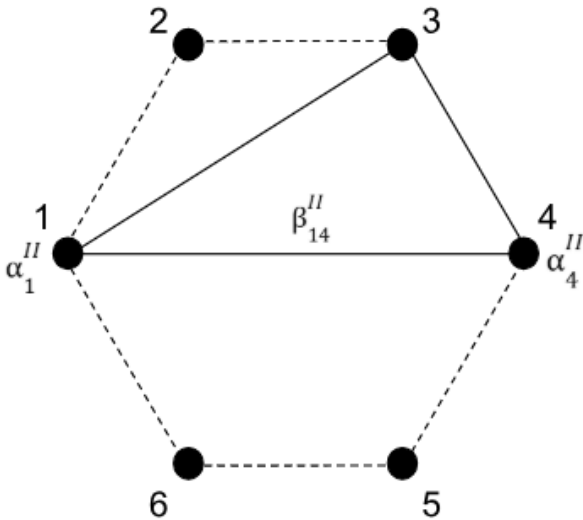
$$\beta_{41}^{II} = \left( \frac{\beta^3}{(E - \alpha_6)(E - \alpha_5) - \beta^2} \right) \quad (84)$$

$$\beta_{41}^{II} = \left( \frac{\beta^3}{(E - \alpha_6)(E - \alpha_5) \left( \frac{\beta^2}{\beta^2} \right) - \beta^2} \right) \quad (85)$$

$$\beta_{41}^{II} = \left( \frac{\beta^3}{x_6 x_5 \beta^2 - \beta^2} \right) = \left( \frac{\beta}{x_6 x_5 - 1} \right) \quad (86)$$

$$\beta_{41}^{II} = \beta (x_6 x_5 - 1)^{-1} \quad (87)$$

### 3. Renormalización de parámetros efectivos para eliminar el átomo 2



donde

$$\alpha_1^{II} = \alpha + \beta x_6^{-1} + \beta x_6^{-2} (x_5 x_6 - 1)^{-1}$$

$$\alpha_4^{II} = \alpha_4 + \beta x_6 (x_5 x_6 - 1)^{-1}$$

$$\beta_{14}^{II} = \beta_{41}^{II} = \beta (x_6 x_5 - 1)^{-1}$$

Expandiendo (1) para los sitios 1, 2 y 3

$$(E - \alpha_1^I)G_{11} = 1 + \beta_{12}G_{21} + \beta_{14}^I G_{51} \quad m = n = 1 \quad (88)$$

$$(E - \alpha_2)G_{22} = 1 + \beta_{21}G_{22} + \beta_{23}G_{32} \quad m = n = 2 \quad (89)$$

$$(E - \alpha_3)G_{33} = 1 + \beta_{32}G_{23} + \beta_{34}G_{43} \quad m = n = 3 \quad (90)$$

$$(E - \alpha_1^I)G_{12} = \beta_{12}G_{22} + \beta_{14}G_{42} \quad m = 1, n = 2 \quad (91)$$

$$(E - \alpha_1^I)G_{13} = \beta_{12}G_{23} + \beta_{14}^I G_{43} \quad m = 1, n = 3 \quad (92)$$

$$(E - \alpha_3)G_{21} = \beta_{21}G_{11} + \beta_{23}G_{31} \quad m = 2, n = 1 \quad (93)$$

$$(E - \alpha_3)G_{23} = \beta_{21}G_{13} + \beta_{23}G_{33} \quad m = 2, n = 3 \quad (94)$$

$$(E - \alpha_3)G_{31} = \beta_{32}G_{21} + \beta_{34}G_{41} \quad m = 3, n = 1 \quad (95)$$

$$(E - \alpha_3)G_{32} = \beta_{31}G_{12} + \beta_{34}G_{42} \quad m = 3, n = 2 \quad (96)$$

$$\text{de (92): } G_{21} = (E - \alpha_2)^{-1} \{ \beta_{21}G_{11} + \beta_{23}G_{31} \} \quad (97)$$

sustituyendo en (88)

$$(E - \alpha_1^I)G_{11} = 1 + \beta_{12} \left[ (E - \alpha_2)^{-1} \{ \beta_{21}G_{11} + \beta_{23}G_{31} \} \right] \quad (98)$$

$$(E - \alpha_1^I)G_{11} = 1 + \beta_{12}\beta_{21}(E - \alpha_2)^{-1} G_{11} + \beta_{12}\beta_{23}(E - \alpha_2)^{-1} G_{31} \quad (99)$$

$$\left[ E - \alpha_1^I - \frac{\beta_{12}\beta_{21}}{(E - \alpha_2)} \right] G_{11} = 1 + \beta_{14}^I G_{41} + \frac{\beta_{12}\beta_{23}}{(E - \alpha_2)} G_{31} \quad (100)$$

$$\text{Si } \alpha_1^{III} = \alpha_1^I + \frac{\beta_{12}\beta_{21}}{(E - \alpha_2)} \quad (101)$$

$$\beta_{13}^{III} = \frac{\beta_{12}\beta_{23}}{(E - \alpha_2)} \quad (102)$$

$$\therefore (E - \alpha_1^{III}) = 1 + \beta_{14}^I G_{21} + \beta_{13}^{III} G_{31} \quad (103)$$

de (101)

$$\alpha_1^{III} = \alpha + \beta x_6^{-1} + \beta x_6^{-2} (x_5 x_6 - 1)^{-1} + \frac{\beta_{12}\beta_{21}}{(E - \alpha_2)} \quad (104)$$

$$\alpha_1^{III} = \alpha + \beta x_6^{-1} + \beta x_6^{-2} (x_5 x_6 - 1)^{-1} + \beta x^{-1} \quad (105)$$

$$\text{de (93): } G_{23} = (E - \alpha_2)^{-1} \{ \beta_{21} G_{13} + \beta_{23} G_{33} \} \quad (115)$$

sustituyendo (115) en (107)

$$(E - \alpha_3) G_{33} = 1 + \beta_{34} G_{43} + \beta_{32} \left[ (E - \alpha_2)^{-1} \{ \beta_{21} G_{13} + \beta_{23} G_{33} \} \right] \quad (116)$$

$$(E - \alpha_3) G_{33} = 1 + \beta_{34} G_{43} + \beta_{32} \beta_{21} (E - \alpha_2)^{-1} G_{13} + \beta_{32} \beta_{23} (E - \alpha_2)^{-1} G_{33} \quad (117)$$

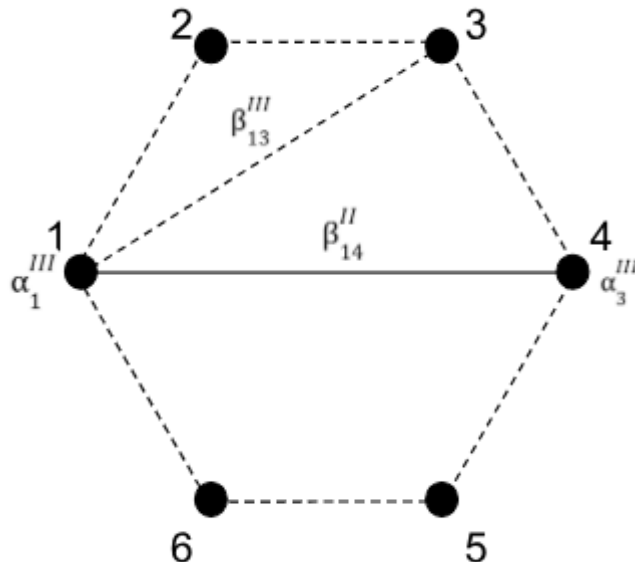
$$\left[ E - \alpha_3 - \frac{\beta_{32} \beta_{23}}{(E - \alpha_2)} \right] G_{33} = 1 + \beta_{34} G_{43} + \frac{\beta_{32} \beta_{21}}{E - \alpha_2} G_{13} \quad (118)$$

$$\text{si } \alpha_3^{III} = \alpha_3 + \frac{\beta_{32} \beta_{23}}{(E - \alpha_2)} = \alpha + \beta x^{-1} \quad (119)$$

$$\beta_{31}^{III} = \frac{\beta_{32} \beta_{21}}{E - \alpha_2} = \beta x^{-1} \quad (120)$$

$$\therefore (E - \alpha_3^{III}) G_{33} = 1 + \beta_{34} G_{43} + \beta_{31}^{III} G_{13} \quad (121)$$

4. Renormalización de parámetros efectivos para eliminar el átomo 3.



donde

$$\alpha_1^{III} = \alpha + \beta x_6^{-1} + \beta x_6^{-2} (x_5 x_6 - 1)^{-1} + \beta x^{-1}$$

$$\alpha_3^{III} = \alpha_3 + \frac{\beta_{32} \beta_{23}}{(E - \alpha_2)} = \alpha + \beta x^{-1}$$

$$\beta_{31}^{III} = \frac{\beta_{32} \beta_{21}}{E - \alpha_2} = \beta x^{-1}$$

Expandiendo (1) para los sitios 1, 3 y 4

$$(E - \alpha_1^{III})G_{11} = 1 + \beta_{13}^{III}G_{31} + \beta_{14}^{II}G_{41} \quad m = n = 1 \quad (106)$$

$$(E - \alpha_3^{III})G_{33} = 1 + \beta_{31}G_{13} + \beta_{34}G_{43} \quad m = n = 3 \quad (107)$$

$$(E - \alpha_3^{III})G_{44} = 1 + \beta_{41}^{II}G_{14} + \beta_{43}G_{34} \quad m = n = 4 \quad (108)$$

$$(E - \alpha_1^{III})G_{13} = \beta_{13}^{III}G_{33} + \beta_{41}^{II}G_{43} \quad m = 1, n = 3 \quad (109)$$

$$(E - \alpha_1^{III})G_{14} = \beta_{31}^{III}G_{43} + \beta_{41}^{II}G_{44} \quad m = 1, n = 4 \quad (110)$$

$$(E - \alpha_3^{III})G_{31} = \beta_{31}^{III}G_{11} + \beta_{43}G_{41} \quad m = 3, n = 1 \quad (111)$$

$$(E - \alpha_3^{III})G_{34} = \beta_{31}^{III}G_{14} + \beta_{34}G_{44} \quad m = 3, n = 4 \quad (112)$$

$$(E - \alpha_4^{II})G_{41} = \beta_{41}G_{11} + \beta_{43}G_{31} \quad m = 4, n = 1 \quad (113)$$

$$(E - \alpha_4^{II})G_{43} = \beta_{41}G_{13} + \beta_{43}G_{33} \quad m = 4, n = 3 \quad (114)$$

$$\text{de (113): } G_{31} = (E - \alpha_3^{III})^{-1} \beta_{31}^{III} G_{11} + \beta_{43} G_{41} \quad (122)$$

sustituyendo en (108)

$$(E - \alpha_1^{III})G_{11} = 1 + \beta_{14}^{II}G_{41} + \beta_{13}^{III} \left[ (E - \alpha_3^{III})^{-1} \beta_{31}^{III} G_{11} + \beta_{43} G_{41} \right] \quad (123)$$

$$(E - \alpha_1^{III})G_{11} = 1 + \beta_{14}^{II}G_{41} + \beta_{13}^{III} \beta_{31}^{III} (E - \alpha_3^{III})^{-1} G_{11} + \beta_{13}^{III} \beta_{43} (E - \alpha_3^{III})^{-1} G_{41} \quad (124)$$

$$\left[ E - \alpha_1^{III} - \frac{\beta_{13}^{III} \beta_{31}^{III}}{E - \alpha_3^{III}} \right] G_{11} = 1 + \beta_{14}^{II} G_{41} + \frac{\beta_{13}^{III} \beta_{43}}{E - \alpha_3^{III}} G_{41} \quad (125)$$

si se define

$$\alpha_1^{IV} = \alpha_1^{III} + \frac{\beta_{13}^{III}\beta_{31}^{III}}{E-\alpha_3^{III}} \quad (126)$$

$$\beta_{14}^{IV} = \frac{\beta_{13}^{III}\beta_{43}^{III}}{E-\alpha_3^{III}} + \beta_{14}^{II} \quad (127)$$

trabajando con (126)

$$\alpha_1^{IV} = \alpha + \beta x_6^{-1} \left(1 + (x_5 x_6 - 1)^{-1}\right) + \beta x^{-1} + \frac{\beta^2 x^{-2}}{E - (\alpha_3 + \beta x^{-1})} \quad (128)$$

$$\alpha_1^{IV} = \alpha + \beta x_6^{-1} \left(1 + (x_5 x_6 - 1)^{-1}\right) + \beta x^{-1} + \frac{\beta^2 x^{-2}}{(E-\alpha)\left(\frac{\beta}{\beta}\right) - \beta x^{-1}} \quad (129)$$

$$\alpha_1^{IV} = \alpha + \beta x_6^{-1} \left(1 + (x_5 x_6 - 1)^{-1}\right) + \beta x^{-1} + \frac{\beta^2 x^{-2}}{x\beta - \beta x^{-1}} \quad (130)$$

$$\alpha_1^{IV} = \alpha + \beta x_6^{-1} \left(1 + (x_5 x_6 - 1)^{-1}\right) + \beta x^{-1} + \frac{\beta^2 x^{-2}}{\beta(x-x^{-1})} \quad (131)$$

$$\alpha_1^{IV} = \alpha + \beta x_6^{-1} \left(1 + (x_5 x_6 - 1)^{-1}\right) + \beta x^{-1} + \frac{\beta x^{-2}}{(x-x^{-1})} \quad (132)$$

$$\alpha_1^{IV} = \alpha + \beta x_6^{-1} \left(1 + (x_5 x_6 - 1)^{-1}\right) + \beta x^{-1} \left(1 + \frac{x^{-1}}{x-x^{-1}}\right) \left(\frac{x}{x}\right) \quad (133)$$

$$\alpha_1^{IV} = \alpha + \beta x_6^{-1} \left(1 + (x_5 x_6 - 1)^{-1}\right) + \beta x^{-1} \left(1 + \frac{1}{x^2-1}\right) \quad (134)$$

$$\alpha_1^{IV} = \alpha + \beta x_6^{-1} \left(1 + (x_5 x_6 - 1)^{-1}\right) + \beta x^{-1} \left(1 + (x^2 - 1)^{-1}\right) \quad (135)$$

trabajando con (127)

$$\beta_{14}^{IV} = \frac{(\beta x^{-1})\beta}{E - (\alpha_3 + \beta x^{-1})} + \beta_{14}^{II} \quad (136)$$

$$\beta_{14}^{IV} = \frac{\beta^2 x^{-1}}{(E-\alpha_3)\left(\frac{\beta}{\beta}\right) - \beta x^{-1}} + \beta_{14}^{II} \quad (137)$$

$$\beta_{14}^{IV} = \frac{\beta^2 x^{-1}}{x\beta - \beta x^{-1}} + \beta_{14}^{II} \quad (138)$$

$$\beta_{14}^{IV} = \frac{\beta^2 x^{-1}}{\beta(x-x^{-1})} + \beta_{14}^{II} \quad (139)$$

$$\beta_{14}^{IV} = \frac{\beta^2 x^{-1}}{\beta(x-x^{-1})} + \beta_{14}^{II} \quad (140)$$

$$\beta_{14}^{IV} = \frac{\beta x^{-1}}{x-x^{-1}} + \beta_{14}^{II} \quad (150)$$

$$\beta_{14}^{IV} = \beta x^{-1}(x-x^{-1})^{-1} + \beta(x_6 x_5 - 1)^{-1} \quad (151)$$

$$\therefore (E - \alpha_1^{IV})G_{11} = 1 + \beta_{14}^{IV}G_{41} \quad (152)$$

$$\text{de (114): } G_{34} = (E - \alpha_3^{III})^{-1} \beta_{31}^{III} G_{14} + \beta_{34} G_{44} \quad (153)$$

sustituyendo en (108)

$$(E - \alpha_3^{III})G_{44} = 1 + \beta_{41}^{II} G_{14} + \beta_{43} \left[ (E - \alpha_3^{III})^{-1} \beta_{31}^{III} G_{14} + \beta_{34} G_{44} \right] \quad (154)$$

$$(E - \alpha_3^{III})G_{44} = 1 + \beta_{41}^{II} G_{14} + \beta_{43} \beta_{31}^{III} (E - \alpha_3^{III})^{-1} G_{14} + \beta_{43} \beta_{34} (E - \alpha_3^{III})^{-1} G_{44} \quad (155)$$

$$\left[ E - \alpha_3^{III} - \frac{\beta_{43} \beta_{34}}{(E - \alpha_3^{III})} \right] G_{44} = 1 + \beta_{41}^{II} + \frac{\beta_{43} \beta_{31}^{III}}{E - \alpha_3^{III}} G_{14} \quad (156)$$

si se define

$$\alpha_4^{IV} = \alpha_4^{II} + \frac{\beta_{43} \beta_{34}}{(E - \alpha_3^{III})} \quad (157)$$

$$\beta_{41}^{IV} = \beta_{41}^{II} + \frac{\beta_{43} \beta_{31}^{III}}{E - \alpha_3^{III}} \quad (158)$$

$$\therefore (E - \alpha_4^{IV})G_{44} = 1 + \beta_{41}^{IV}G_{14} \quad (159)$$

de (157)

$$\alpha_4^{IV} = \alpha + \beta x_6 (x_5 x_6 - 1)^{-1} + \frac{\beta^2}{E - (\alpha + \beta x^{-1})} \quad (160)$$

$$\alpha_4^{IV} = \alpha + \beta x_6 (x_5 x_6 - 1)^{-1} + \frac{\beta^2}{(E - \alpha) \left( \frac{\beta}{\beta} \right) - \beta x^{-1}} \quad (161)$$

$$\alpha_4^{IV} = \alpha + \beta x_6 (x_5 x_6 - 1)^{-1} + \frac{\beta^2}{x\beta - \beta x^{-1}} \quad (162)$$

$$\alpha_4^{IV} = \alpha + \beta x_6 (x_5 x_6 - 1)^{-1} + \frac{\beta^2}{\beta(x-x^{-1})} \quad (163)$$

$$\alpha_4^{IV} = \alpha + \beta x_6 (x_5 x_6 - 1)^{-1} + \frac{\beta}{x-x^{-1}} \quad (164)$$

de (158)

$$\beta_{41}^{IV} = \beta (x_5 x_6 - 1)^{-1} + \frac{\beta^2 x^{-1}}{E-(\alpha+\beta x^{-1})} \quad (165)$$

$$\beta_{41}^{IV} = \beta (x_5 x_6 - 1)^{-1} + \frac{\beta^2 x^{-1}}{\beta(x-x^{-1})} \quad (166)$$

$$\beta_{41}^{IV} = \beta (x_5 x_6 - 1)^{-1} + \frac{\beta x^{-1}}{x-x^{-1}} \quad (167)$$

∴

$$\beta_{41}^{IV} = \beta_{14}^{IV} = \beta (x_5 x_6 - 1)^{-1} + \frac{\beta x^{-1}}{x-x^{-1}} \quad (168)$$

$$\alpha_4^{IV} = \alpha + \beta x_6 (x_5 x_6 - 1)^{-1} + \frac{\beta}{x-x^{-1}} \quad (169)$$

$$\alpha_1^{IV} = \alpha + \beta x_6^{-1} + \beta x_6^{-2} (x_5 x_6 - 1)^{-1} + \beta x^{-1} \left( 1 + (x^2 - 1)^{-1} \right) \quad (170)$$

$$\text{donde } x = \frac{E-\alpha}{\beta} \quad , \quad x_6 = \frac{E-\alpha_6}{\beta} \quad , \quad x_5 = \frac{E-\alpha_5}{\beta}$$

## Anexo 4

### Ecuación de Lippmann-Schwinger

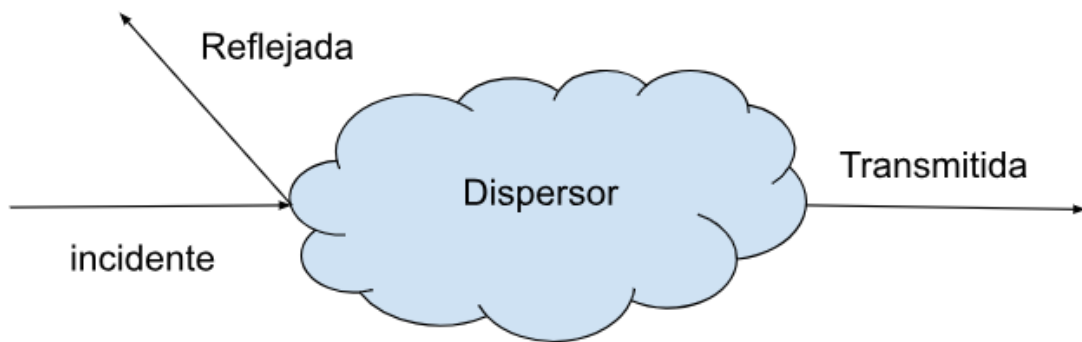
$$C_n(k) = C_n^0(k) + \sum_{l,m} G_0(n,l) v(l,m) C_m(k) \quad (1)$$

$$\Psi_n(k) = \Psi_n^0(k) + \sum_{l,m} G_0(n,l) v(l,m) C_m(k) \quad (2)$$

$$\text{con } G_0(n,m) = \langle n | G_0 | m \rangle = \frac{ie^{i|n-m|\theta_k}}{2\beta \text{sen}\theta_k} \quad (3)$$

$$C_n^0(k) = e^{in\theta_k} \quad (4)$$

$$\theta_k = k_a$$



$$\begin{aligned} C_n(k) &= e^{in\theta_k}, \quad n \rightarrow -\infty \\ &= \tau e^{in\theta_k}, \quad n \rightarrow \infty \end{aligned} \quad (5)$$

donde:  $C_n = \Psi$

∴ de Lippmann-Schwinger

$$\tau e^{in\theta_k} = e^{in\theta_k} + \sum_{l,n} \left( \frac{ie^{i|n-l|\theta_k}}{2\beta \text{sen}\theta_k} \right) V(l,m) C_n(k) \quad (6)$$

si  $n > l$

$$\tau e^{in\theta_k} = e^{in\theta_k} + \sum_{l,n} \left( \frac{ie^{in\theta_k} \cdot e^{-in\theta_k}}{2\beta \text{sen}\theta_k} \right) V(l, m) C_m(k) \quad (7)$$

$$\tau = 1 + \sum_{l,m} \frac{e^{-in\theta_k}}{(-2i \text{sen}\theta_k)^\beta} \cdot V(l, m) C_m(k) \quad (8)$$

$$\text{si } w = 2i \text{sen}\theta_k, \quad t = e^{in\theta_k} \quad (9)$$

$$\tau = 1 + (w\beta)^{-1} \sum_{i,m} t^{-l} V(l, m) C_m(k) \quad (10)$$

desarrollando (9)

$$\tau = 1 + (w\beta)^{-1} \left[ V(0, 0) C_0 + t^{-1} V(1, 1) C_1 + V(0, 1) C_1 + t^{-1} V(1, 0) C_0 \right] \quad (11)$$

$$\text{si } V = 2\beta [z_0 |0\rangle\langle 0| + z_1 |1\rangle\langle 1| + \gamma(|0\rangle\langle 1| + |1\rangle\langle 0|)] \quad (12)$$

donde:

$$z_j = \frac{(\alpha_j - \alpha)}{2\beta}, \quad j = (0, 1) \quad (13)$$

$$\gamma = \frac{\beta_{01} - \beta}{2\beta} \quad (14)$$

$$V = \sum_{i,j=0}^1 |i\rangle\langle i| V |j\rangle\langle j| = \langle 0|V|0\rangle |0\rangle\langle 0| + \langle 1|V|1\rangle |1\rangle\langle 1| + \langle 0|V|1\rangle |0\rangle\langle 1| + \langle 1|V|0\rangle |1\rangle\langle 0| \quad (15)$$

sustituyendo (12) en (11)

$$\tau = 1 + (w\beta) \left\{ 2\beta \left( \frac{\alpha_0 - \alpha}{2\beta} \right) C_0 + t^{-1} 2\beta \left( \frac{\alpha_1 - \alpha}{2\beta} \right) C_1 + 2\beta \left( \frac{\beta_{01} - \beta}{2\beta} \right) C_1 + t^{-1} 2\beta \left( \frac{\beta_{01} - \beta}{2\beta} \right) C_0 \right\} \quad (16)$$

$$\left( \frac{\alpha_0 - \alpha}{2\beta} \right) = \langle 0|V|0\rangle$$

$$\left( \frac{\alpha_1 - \alpha}{2\beta} \right) = \langle 1|V|1\rangle$$

$$\left( \frac{\beta_{01} - \beta}{2\beta} \right) = \langle 0|V|1\rangle$$

$$\left( \frac{\beta_{01} - \beta}{2\beta} \right) = \langle 1|V|0\rangle$$

$$\tau = 1 + (w\beta)^{-1} \left\{ 2\beta z_0 C_0 + t^{-1} 2\beta z_1 C_1 + 2\beta \gamma C_1 + t^{-1} 2\beta \gamma C_1 + t^{-1} 2\beta \gamma C_0 \right\} \quad (17)$$

$$\tau = 1 + 2w^{-1} \left\{ Z_0 C_0 + t^{-1} Z_1 C_1 + \gamma C_1 + t^{-1} \gamma C_1 + t^{-1} \gamma C_0 \right\} \quad (18)$$

$$\tau = 1 + 2w^{-1} \left\{ (Z_0 + t^{-1} \gamma) C_0 + (t^{-1} Z_1 + \gamma) C_1 \right\} \quad (19)$$

para encontrar  $C_0$  y  $C_1$ , se desarrolla:

$$C_n^0(k) = C_n^0(k) + \sum_{l,n} G_0(n,l) V(l,m) C_m(k) \quad (20)$$

$$\text{con } G_0(n,l) = \frac{ie^{i|n-l|\theta_k}}{2\beta \text{sen}\theta_k} \quad (21)$$

$$C_n^0(k) = e^{in\theta_k} \quad , \quad w = 2i \text{sen}\theta_k \quad (22)$$

$$t = e^{in\theta_k}$$

$$n = 0 \quad , \quad C_0(k) = 1 + \sum_{l,m} \frac{e^{i|l|\theta_k}}{(-2i \text{sen}\theta_k)} V(l,m) C_m(k) \quad (23)$$

$$C_0 = 1 + (w\beta)^{-1} \sum_{l,m} t^{|l|} V(l,m) C_m \quad (24)$$

$$n = 1 \quad , \quad C_1(k) = e^{i\theta_k} + \sum_{l,m} \frac{e^{i|1-l|\theta_k}}{(-2i \text{sen}\theta_k)} V(l,m) C_m(k) \quad (25)$$

$$C_1 = t + (w\beta)^{-1} \sum_{l,m} t^{|1-l|} V(l,m) C_m \quad (26)$$

de (24)

$$C_0 = 1 + (w\beta)^{-1} \left\{ V(0,0)C_0 + tV(1,1)C_1 + V(0,1)C_1 + t(1,0)C_0 \right\} \quad (27)$$

donde:

$$V(0,0) = \langle 0|V|0 \rangle \quad , \quad \text{si} \left( \frac{\alpha_0 - \alpha}{2\beta} \right) = Z_0 \quad , \quad \langle 0|V|0 \rangle = 2\beta Z_0 \quad (28)$$

$$V(1,1) = \langle 0|V|0 \rangle \quad , \quad \text{si} \left( \frac{\alpha_1 - \alpha}{2\beta} \right) = Z_1 \quad , \quad \langle 1|V|1 \rangle = 2\beta Z_1 \quad (29)$$

$$V(0,1) = \langle 0|V|1 \rangle \quad , \quad \text{si} \left( \frac{\alpha_{01} - \alpha}{2\beta} \right) = \gamma \quad , \quad \langle 0|V|1 \rangle = 2\beta \gamma \quad (30)$$

$$V(1,0) = \langle 1|V|0 \rangle \quad , \quad \text{si} \left( \frac{\alpha_{10} - \alpha}{2\beta} \right) = \gamma \quad , \quad \langle 1|V|0 \rangle = 2\beta \gamma \quad (31)$$

$$C_0 = 1 + (w\beta)^{-1} \{2\beta Z_0 C_0 + 2\beta t Z_1 C_1 + 2\beta \gamma C_1 + 2\beta t \gamma C_0\} \quad (32)$$

$$C_0 = 1 + 2w^{-1} \{(Z_0 + t\gamma)C_0 + (tZ_1 + \gamma)C_1\} \quad (33)$$

$$C_0 = 1 + 2w^{-1} \{(Z_0 + t\gamma)C_0 + (tZ_1 + \gamma \frac{t}{t})C_1\} \quad (34)$$

$$C_0 = 1 + 2w^{-1} \{(Z_0 + t\gamma)C_0 + (Z_1 + \gamma t^{-1})tC_1\} \quad (35)$$

$$C_0 = 1 + 2w^{-1} \{(Z_0 + t\gamma)C_0 + (Z_1 + \gamma t^*)tC_1\} \quad (36)$$

de (26)

$$C_1 = t + (w\beta)^{-1} \{tV(0,0)C_0 + V(1,1)C_1 + tV(0,1)C_1 + V(1,0)C_0\} \quad (37)$$

Utilizamos las mismas definiciones para los elementos de matriz  $V(l, m)$

$$C_1 = t + (w\beta)^{-1} \{t \cdot 2\beta Z_0 C_0 + 2\beta Z_1 C_1 + t2\beta \gamma C_1 + 2\gamma C_0\} \quad (38)$$

$$C_1 = t + 2w^{-1} \{(tZ_0 + \gamma)C_0 + (Z_1 + t\gamma)C_1\} \quad (39)$$

$$C_1 = t + 2w^{-1} \{(tZ_0 + \gamma(\frac{t}{t}))C_0 + (Z_1 + \gamma t)C_1\} \quad (40)$$

$$C_1 = t + 2w^{-1} \{(Z_0 + \gamma t^*)tC_0 + (Z_1 + \gamma t)C_1\} \quad (41)$$

resolviendo (36) y (41) simultáneamente

de (36)

$$C_0 - 2w^{-1}(Z_0 + t\gamma)C_0 = 1 + 2w^{-1}(Z_1 + \gamma t^*)tC_1 \quad (42)$$

$$C_0 - 2w^{-1}(Z_0 + t\gamma)C_0 = 1 + 2w^{-1}(Z_1 + \gamma t^*)tC_1 \quad (43)$$

$$C_0 = \frac{1+2w^{-1}(Z_1+\gamma t^*)tC_1}{1-2w^{-1}(Z_0+t\gamma)} \quad (44)$$

de (41)

$$C_1 - 2w^{-1}(Z_1 + \gamma t)C_0 = t + 2w^{-1}(Z_0 + \gamma t^*)tC_1 \quad (45)$$

$$C_1(1 - 2w^{-1}(Z_1 + \gamma t)) = t + 2w^{-1}(Z_0 + \gamma t^*)tC_0 \quad (46)$$

$$C_1 = \frac{t+2w^{-1}(Z_0+\gamma t^*)tC_0}{1-2w^{-1}(Z_1+\gamma t)} \quad (47)$$

sustituyendo en (36)

$$C_0 - 2w^{-1}(Z_0 + t\gamma)C_0 = 1 + 2w^{-1}(Z_1 + \gamma t^*)t \left( \frac{t+2w^{-1}(Z_0+\gamma t^*)tC_0}{1-2w^{-1}(Z_1+\gamma t)} \right) \quad (48)$$

$$C_0 - 2w^{-1}(Z_0 + t\gamma)C_0 = 1 + \frac{2w^{-1}(Z_1+\gamma t^*)t^2}{1-2w^{-1}(Z_1+\gamma t)} + \frac{(2w^{-1}(Z_1+\gamma t^*)(t^2))(2w^{-1}Z_0+\gamma t^*)C_0}{1-2w^{-1}(Z_1+\gamma t)} \quad (49)$$

$$C_0 - 2w^{-1}(Z_0 + t\gamma)C_0 - \frac{t^2(2w^{-1}(Z_1+\gamma t^*))(2w^{-1}(Z_0+\gamma t^*))}{1-2w^{-1}(Z_1+\gamma t)}C_0 = 1 + \frac{2w^{-1}(Z_1+\gamma t^*)t^2}{1-2w^{-1}(Z_1+\gamma t)} \quad (50)$$

$$\left[ \frac{(1-2w^{-1}(Z_1+\gamma t))-2w^{-1}(Z_0+t\gamma)(1-2w^{-1}(Z_1+\gamma t))-t^2(2w^{-1}(Z_1+\gamma t^*))(2w^{-1}(Z_0+\gamma t^*))}{1-2w^{-1}(Z_1+\gamma t)} \right] C_0 = \frac{1-2w^{-1}(Z_1+\gamma t)+2w^{-1}(Z_1+\gamma t^*)t^2}{1-2w^{-1}(Z_1+\gamma t)} \quad (51)$$

$$\left[ \frac{1 - 2w^{-1}Z_1 - 2w^{-1}\gamma t - (2w^{-1}Z_0 + 2w^{-1}t\gamma)(1 - 2w^{-1}Z_1 - 2w^{-1}\gamma t) - t^2(2w^{-1}Z_1 + 2w^{-1}\gamma t^*) \cdot (2w^{-1}Z_0 + 2w^{-1}\gamma t^*)}{1 - 2w^{-1}Z_1 - 2w^{-1}\gamma t + 2w^{-1}Z_1 t^2 + 2w^{-1}\gamma t} \right] C_0 = \frac{1 - 2w^{-1}Z_1(1 - t^2)}{1 - 2w^{-1}Z_1 - 2w^{-1}\gamma t + 2w^{-1}Z_1 t^2 + 2w^{-1}\gamma t} \quad (52)$$

$$\begin{aligned} & [1 - 2w^{-1}Z_1 - 2w^{-1}\gamma t - 2w^{-1}Z_0 + (2w^{-1})^2 Z_0 Z_1 + (2w^{-1})^2 Z_0 \gamma t - 2w^{-1}t\gamma + (2w^{-1})^2 Z_1 t\gamma + (2w^{-1})^2 t^2 Z_0 Z_1 \\ & - (2w^{-1})^2 t^2 Z_0 Z_1 - (2w^{-1})^2 Z_1 \gamma t^2 t^* - (2w^{-1})^2 \gamma^2 (t^*)^2 t^2 - (2w^{-1})^2 t^2 \gamma Z_0 t^*] C_0 = 1 - 2w^{-1}Z_1(1 - t^2) \end{aligned} \quad (53)$$

$$1 - 2w^{-1}(Z_0 Z_1) - 2w^{-1} \left\{ -2w^{-1}Z_0 Z_1 + 2w^{-1}t^2 Z_0 Z_1 + 2\gamma t - 2w^{-1}t^2 \gamma^2 + 2w^{-1} \otimes \right\} C_0 = 1 - 2w^{-1}Z_1(1 - t^2)$$

(54)

Trabajando con el lado derecho de la igualdad

$$\begin{aligned} & = 1 - 2w^{-1}Z_1(1 - t^2) \\ & = 1 - 2w^{-1}Z_1(w^{-1} - w^{-1}t^2) \end{aligned} \quad (55)$$

donde

$$w^{-1} - w^{-1}t^2 = -\frac{1}{2i \operatorname{sen}\theta_k} - \left( -\frac{1}{2i \operatorname{sen}\theta_k} \right) e^{2i\theta_k} \quad (56)$$

$$\text{utilizando } \operatorname{sen} x = \frac{e^{ix} - e^{-ix}}{2i} \quad (57)$$

$$\therefore w^{-1} - w^{-1}t^2 = \left( \frac{e^{i\theta_k} \cdot e^{i\theta_k}}{e^{i\theta_k} - e^{-i\theta_k}} \right) - \frac{1}{e^{i\theta_k} - e^{-i\theta_k}} \quad (58)$$

$$= \frac{e^{i\theta_k}}{1 - e^{-2i\theta_k}} - \frac{1}{e^{i\theta_k} - e^{-i\theta_k}} \cdot \frac{e^{-i\theta_k}}{e^{-i\theta_k}} \quad (59)$$

$$= \frac{e^{i\theta_k}}{1 - e^{-2i\theta_k}} - \frac{e^{-i\theta_k}}{1 - e^{-2i\theta_k}} \quad (60)$$

$$= \frac{e^{i\theta_k} - e^{-i\theta_k}}{1 - e^{-2i\theta_k}} = \frac{e^{i\theta_k} - e^{-i\theta_k}}{1 - (\cos 2\theta_k - i \operatorname{sen} 2\theta_k)} \quad (61)$$

$$= \frac{e^{i\theta_k} - e^{-i\theta_k}}{(1 - \cos 2\theta_k) + i \operatorname{sen} 2\theta_k} = \frac{e^{i\theta_k} - e^{-i\theta_k}}{2 \operatorname{sen}^2 \theta_k + i 2 \operatorname{sen} \theta \cos \theta_k} \quad (62)$$

$$= \frac{2i \operatorname{sen} \theta_k}{2 \operatorname{sen} \theta_k (\operatorname{sen} \theta_k + i \cos \theta_k)} = \frac{i}{\operatorname{sen} \theta_k + i \cos \theta_k} \cdot \frac{i}{i} \quad (63)$$

$$= -\frac{1}{i \operatorname{sen} \theta_k - \cos \theta_k} = \frac{1}{\cos \theta_k - i \operatorname{sen} \theta_k} = \frac{1}{e^{-i\theta_k}} \quad (64)$$

$$w^{-1} - w^{-1}t^2 = e^{i\theta_k} = t \quad (65)$$

$$w^{-1}(1 - t^2) = t \quad (66)$$

regresando con (54)

$$\left[ 1 - 2w^{-1}(Z_0 + Z_1) - 2w^{-1} \left\{ 2w^{-1}(t^2 - 1)Z_0Z_1 + 2\gamma t - 2w^{-1}t^2\gamma^2 + 2w^{-1}\gamma^2 \right\} \right] C_0 \quad (87)$$

↓

$$= 1 - 2Z_1t$$

$$\left[ 1 - 2w^{-1}(Z_0 + Z_1) - 2w^{-1} \left\{ -2tZ_0Z_1 + 2\gamma t + 2\gamma^2 w^{-1}(-t^2 - 1) \right\} \right] C_0 = 1 - 2Z_1t \quad (88)$$

↓

t

$$\left[ 1 - 2w^{-1}(Z_0 + Z_1) - 2w^{-1} \left\{ -2tZ_0Z_1 + 2\gamma t + 2\gamma^2 t \right\} \right] C_0 = 1 - 2Z_1t \quad (89)$$

$$\text{si } P = Z_0 + Z_1 \quad (90)$$

$$Q = Z_0Z_1 - \gamma - \gamma^2 \quad (91)$$

$$\left[1 - 2w^{-1}P - 2w^{-1}\left\{-2t(Z_0Z_1 - \gamma - \gamma^2)\right\}\right]C_0 = 1 - 2Z_1t \quad (92)$$

$$\left[1 - 2w^{-1}P - 2w^{-1}(-2tQ)\right]C_0 = 1 - 2Z_1t \quad (93)$$

$$\left[1 - 2w^{-1}(P - 2Qt)\right]C_0 = 1 - 2Z_1t \quad (94)$$

$$\text{si } \Delta = 1 - 2w^{-1}(P - 2Qt) \quad (95)$$

$$\Delta C_0 = 1 - 2Z_1t \quad (96)$$

$$\therefore C_0 = \frac{1-2Z_1t}{\Delta} \quad (97)$$

sustituyendo (97) en (41)

$$C_1 = t + 2w^{-1}(Z_0 + \gamma t^2)t\left[\frac{1-2Z_1t}{\Delta}\right] + 2w^{-1}(Z_1 + \gamma t)C_1 \quad (98)$$

↓

$C_0$

$$C_1\left[1 - 2w^{-1}(Z_1 + \gamma t)\right] = t + \frac{2w^{-1}t(Z_0 + \gamma t^*)(1-2Z_1t)}{\Delta} \quad (99)$$

$$C_1 = \frac{\frac{\Delta t + 2w^{-1}t(Z_0 + \gamma t^*)(1-2Z_1t)}{\Delta}}{1 - 2w^{-1}(Z_1 + \gamma t)} \quad (100)$$

$$C_1 = \frac{\Delta t + 2w^{-1}t(Z_0 + \gamma t^*)(1-2Z_1t)}{\Delta(1 - 2w^{-1}[Z_1 + \gamma t])} \quad (101)$$

$$C_1 = \frac{\Delta \cdot t + 2w^{-1}t\{Z_0 - 2Z_0Z_1t + \gamma t^* - 2\gamma Z_1t^*t\}}{\Delta(1 - 2w^{-1}[Z_1 + \gamma t])} \quad (102)$$

$$C_1 = \frac{\Delta \cdot t + 2w^{-1}tZ_0 - 4w^{-1}Z_0Z_1t^2 + 2w^{-1}\gamma - 4w^{-1}t\gamma Z_1}{\Delta(1 - 2w^{-1}[Z_1 + \gamma t])} \quad (103)$$

$$\left[\frac{1-2Z_1t}{\Delta}\right] = 1 - 2w^{-1}\left\{\frac{(Z_1 + \gamma t)(1-2Z_1t)}{\Delta}\right\} + 2w^{-1}(Z_1 + \gamma t^*)tC_1 \quad (105)$$

sustituyendo en (44)

$$\frac{1-2Z_1t}{\Delta} - \frac{2w^{-1}}{\Delta}(Z_0 + \gamma t)(1 - 2Z_1t) - 1 = 2w^{-1}(Z_1 + \gamma t^*)C_1 \quad (106)$$

$$\frac{1-2Z_1t-2w^{-1}(Z_0+\gamma t)(1-2Z_1t)-\Delta}{\Delta} = 2w^{-1}(Z_1 + \gamma t^*)C_1 \quad (107)$$

$$\frac{1-2Z_1t-2w^{-1}Z_0+4w^{-1}Z_0Z_1t-2w^{-1}\gamma t+4w^{-1}Z_1\gamma t^2-1+2w^{-1}(P-2Qt)}{\Delta} = 2w^{-1}(Z_1 + \gamma t^*)C_1 \quad (108)$$

$$\frac{-2Z_1t-2w^{-1}Z_0+4w^{-1}Z_0Z_1t+2w^{-1}\gamma t+4w^{-1}Z_1\gamma t^2+2w^{-1}\{Z_0+Z_1-2t[Z_0Z_1-\gamma-\gamma^2]\}}{\Delta} = 2w^{-1}(Z_1 + \gamma t^*)C_1 \quad (109)$$

$$\frac{-2Z_1t-2w^{-1}Z_0+4w^{-1}Z_0Z_1t+2w^{-1}\gamma t+4w^{-1}Z_1\gamma t^2+2w^{-1}Z_0+2w^{-1}Z_1-4w^{-1}Z_0Z_1+4w^{-1}t\gamma+4w^{-1}t\gamma^2}{\Delta} = 2w^{-1}(Z_1 + \gamma t^*)C_1 \quad (110)$$

$$\frac{2w^{-1}t\{-Z_1w-\gamma+2Z_1\gamma t+Z_1t^*+2\gamma+2\gamma^2\}}{\Delta} = 2w^{-1}(Z_1 + \gamma t^*)C_1 \quad (111)$$

$$\frac{-Z_1w+2Z_1\gamma t+Z_1t^*+\gamma+2\gamma^2}{\Delta} = (Z_1 + \gamma t^*)C_1 \quad (112)$$

$$\frac{t(-Z_1wt^*+2Z_1\gamma+Z_1t^*+\gamma t^*+2\gamma^2t^*)}{\Delta} = (Z_1 + \gamma t^*)C_1 \quad (113)$$

$$\frac{t(Z_1(t^{*2}-wt^*)2Z_1\gamma+\gamma t^*+2\gamma^2t^*)}{\Delta} = (Z_1 + \gamma t^*)C_1 \quad (114)$$

trabajando con el término:

$$(t^{*2} - wt^*) = \frac{1}{(t^*)^{-2}} - \frac{w}{(t^*)^{-1}} = \frac{1}{t^2} - \frac{w}{t} = \frac{1-wt}{t^2} \quad (115)$$

$$\text{si } wt = 1 - t^2 \quad (116)$$

de (66)

$$t^{*2} - wt^* = \frac{1-1+t^2}{t^2} = 1 \quad (117)$$

$$\therefore \frac{t(Z_1+2Z_1\gamma+\gamma t^*+2\gamma^2t^*)}{\Delta} = (Z_1 + \gamma t^*)C_1 \quad (118)$$

$$\frac{t[Z_1(1+2\gamma)+\gamma t^*(1+2\gamma)]}{\Delta} = (Z_1 + \gamma t^*)C_1 \quad (119)$$

$$\frac{t[(1+2\gamma)(Z_1+\gamma t^*)]}{\Delta} = (Z_1 + \gamma t^*)C_1 \quad (120)$$

$$\therefore C_1 = \frac{(1+2\gamma)t}{\Delta} \quad (121)$$

$$\text{Si } \tau = 1 + 2w^{-1} \left[ (Z_0 + \gamma t^{-1})C_0 + (Z_1 t^{-1} + \gamma)C_1 \right] \quad (122)$$

$$\tau = 1 + \frac{2w^{-1}(Z_0 + \gamma t^{-1})(1 - 2Z_1 t)}{\Delta} + \frac{2w^{-1}(Z_1 t^{-1} + \gamma)(1 + 2\gamma)t}{\Delta} \quad (123)$$

$$\tau = \frac{\Delta + 2w^{-1}(Z_0 + \gamma t^{-1})(1 - 2Z_1 t) + 2w^{-1}(Z_1 t^{-1} + \gamma)(1 + 2\gamma)t}{\Delta} \quad (124)$$

$$\tau = \frac{\Delta + 2w^{-1}Z_0 - 4w^{-1}Z_0 Z_1 t + 2w^{-1}\gamma t^{-1} - 4w^{-1}Z_1 \gamma + 2w^{-1}Z_1 + 4w^{-1}Z_1 \gamma + 2w^{-1}t\gamma + 4w^{-1}t\gamma^2}{\Delta} \quad (125)$$

$$\tau = \frac{1 - 2w^{-1}(Z_0 + Z_1 - 2t[Z_0 Z_1 - \gamma - \gamma^2]) + 2w^{-1}Z_0 - 4w^{-1}Z_0 Z_1 t + 2w^{-1}\gamma t^{-1} + 2w^{-1}Z_1 + 2w^{-1}t\gamma + 4w^{-1}t\gamma^2}{\Delta} \quad (126)$$

$$\tau = \frac{1 - 2w^{-1}Z_0 - 2w^{-1}Z_1 + 4w^{-1}tZ_0 Z_1 - 4w^{-1}t\gamma - 4w^{-1}t\gamma^2 + 2w^{-1}Z_0 - 4w^{-1}Z_0 Z_1 t + 2w^{-1}t^{-1}\gamma + 2w^{-1}Z_1 + 2w^{-1}t\gamma + 4w^{-1}t\gamma^2}{\Delta} \quad (127)$$

$$\tau = \frac{1 + 2w^{-1}t^{-1}\gamma - 2w^{-1}t\gamma}{\Delta} = \frac{1 + 2w^{-1}\gamma(t^{-1} - t)}{\Delta} \quad (128)$$

Trabajando con:  $(t^{-1} - t) = \frac{1}{t} - t = \frac{1 - t^2}{t}$

de (66)  $1 - t^2 = wt \quad \therefore (t^{-1} - t) = w$

$$\tau = \frac{1 + 2w^{-1}\gamma(w)}{\Delta} = \frac{1 + 2\gamma}{\Delta} \quad (129)$$

$$\tau = \frac{1 + 2\gamma}{\Delta} \Rightarrow \text{Amplitud de transmisión} \quad (130)$$

$$\tau = \frac{1 + 2\gamma}{\Delta} = \frac{1 + 2\gamma}{1 - 2w^{-1}(P - 2Qt)} \quad (131)$$

$$\tau\tau^* = \left( \frac{1 + 2\gamma}{1 - 2w^{-1}(P - 2Qt)} \right) \left( \frac{1 + 2\gamma}{1 - \frac{2}{w}(P - 2Qt)} \right) \quad (132)$$

$$\tau\tau^* = (1 + 2\gamma)^2 \left[ 1 - \frac{2}{w}(P - 2Qt) - \frac{2}{w}(P - 2Qt) + \frac{4}{|w|^2}(P - 2Qt)(P - 2Qt) \right]^{-1} \quad (133)$$

$$\tau\tau^* = (1 + 2\gamma)^2 \left[ 1 - \frac{2}{2i \operatorname{sen}\theta_k}(P - 2Qt) + \frac{2}{2i \operatorname{sen}\theta_k}(P - 2Qt) + \frac{4}{|w|^2}(P - 2Qt)(P - 2Qt) \right]^{-1} \quad (134)$$

$$\tau\tau^* = (1 + 2\gamma)^2 \left[ 1 - \frac{2}{2i \operatorname{sen}\theta_k} (P - 2Qt) - (P - 2Qt) + \frac{4}{|w|^2} (P - 2Qt)(P - 2Qt) \right]^{-1} \quad (135)$$

$$\tau\tau^* = (1 + 2\gamma)^2 \left[ 1 - \frac{4Q}{2i \operatorname{sen}\theta_k} (-e^{-i\theta_k} + e^{i\theta_k}) + \frac{4}{|w|^2} (P - 2Qt)(P - 2Qt) \right]^{-1} \quad (136)$$

$$|\tau|^2 = (1 + 2\gamma)^2 \left[ 1 - \frac{4Q}{2 \operatorname{sen}\theta_k} \left( \frac{e^{i\theta_k} - e^{-i\theta_k}}{2i} \right) + \frac{4}{|w|^2} (P - 2Qt)(P - 2Qt) \right]^{-1} \quad (137)$$

$$|\tau|^2 = (1 + 2\gamma)^2 \left[ 1 - 4Q + \frac{4}{|w|^2} (P - 2Qt)(P - 2Qt) \right]^{-1} \quad (138)$$

$$|\tau|^2 = (1 + 2\gamma)^2 \left[ 1 - 4Q + \frac{4}{4 \operatorname{sen}^2 \theta_k} (P - 2Qe^{i\theta_k})(P - 2Qe^{i\theta_k}) \right]^{-1} \quad (139)$$

$$|\tau|^2 = (1 + 2\gamma)^2 \left[ 1 - 4Q + \frac{1}{\operatorname{sen}^2 \theta_k} (P^2 - 2Qe^{-i\theta_k} - 2QP e^{i\theta_k} + 4Q^2) \right]^{-1} \quad (140)$$

$$|\tau|^2 = (1 + 2\gamma)^2 \left[ 1 - 4Q + \frac{1}{\operatorname{sen}^2 \theta_k} \left( P^2 - 2Q(e^{i\theta_k} - e^{-i\theta_k}) \left( \frac{2}{2} \right) + 4Q^2 \right) \right]^{-1} \quad (141)$$

$$|\tau|^2 = (1 + 2\gamma)^2 \left[ 1 - 4Q + \frac{1}{1 - \cos^2 \theta_k} (P^2 - 4QP \cos \theta_k + 4Q^2) \right]^{-1} \quad (142)$$

sabemos que:

$$\cos \theta_k = \frac{E_k - \alpha}{2\beta} = \frac{x}{2} \quad \operatorname{sen}^2 \theta_k + \cos^2 \theta_k = 1$$

$$|\tau|^2 = (1 + 2\gamma)^2 \left[ 1 - 4Q + \frac{1}{1 - \frac{x^2}{4}} (P^2 - 4QP \frac{x}{2} + 4Q^2) \right]^{-1} \quad (143)$$

$$|\tau|^2 = (1 + 2\gamma)^2 \left[ \frac{4 - x^2 - 4Q(4 - x^2) + 4P^2 - 2 \cdot 4QPx + 4 \cdot 4Q^2 + (4Q^2 x^2 - 4Q^2 x^2)}{4 - x^2} \right]^{-1} \quad (144)$$

poniéndolo en términos del artículo:

$$(1 - 2Q^2)(4 - x^2) = 4 - 16x + 16xQ^2 - x^2 + 4Qx^2 - 4Q^2 x^2 \quad (145)$$

$$|\tau|^2 = (1 + 2\gamma)^2 \left[ \frac{(1 - 2Q^2)(4 - x^2) + 4P^2 - 2 \cdot 4QPx + 4Q^2 x^2}{4 - x^2} \right]^{-1} \quad (146)$$

$$|\tau|^2 = (1 + 2\gamma)^2 \left[ \frac{(1-2Q)^2(4-x^2) + 4(P-Qx)^2}{4-x^2} \right]^{-1} \quad (147)$$

$$T = |\tau|^2 = \frac{(1+2\gamma)^2(4-x^2)}{(1-2Q)^2(4-x^2) + 4(P-Qx)^2} \quad (148)$$

# Bibliografía

- [1] Nitzan, A., & Ratner, M. A. (2003). Electron transport in molecular wire junctions. *Science*, 300(5624), 1384-1389. <https://doi.org/10.1126/science.1081572>
- [2] Cuevas, J. C., & Scheer, E. (2010). *Molecular Electronics: An Introduction to Theory and Experiment*. World Scientific Publishing.
- [3] Joachim, C., & Ratner, M. A. (2005). Molecular electronics: Some views on transport junctions and beyond. *Proceedings of the National Academy of Sciences*, 102(25), 8801-8808. <https://doi.org/10.1073/pnas.0501103102>
- [4] Datta, S. (1997). *Electronic Transport in Mesoscopic Systems*. Cambridge University Press.
- [5] Lindsay, S. M., & Ratner, M. A. (2007). Molecular transport junctions: Clearing mists. *Advanced Materials*, 19(1), 23-31. <https://doi.org/10.1002/adma.200600537>
- [6] Arroyo, C. R., et al. (2013). Quantum interference in single-molecule electrical junctions. *Angewandte Chemie International Edition*, 52(12), 3152-3155. <https://doi.org/10.1002/anie.201208518>
- [7] Baldea, I. (Ed.). (2016). *Molecular electronics: An experimental and theoretical approach*. Pan Stanford Publishing. <https://doi.org/10.1201/b19368>
- [8] Scheer, E., & Cuevas, J. C. (2010). *Molecular electronics: An introduction to theory and experiment: An introduction to theory and experiment*. World Scientific Publishing.
- [9] Morales Valenzuela, L. G., Iglesias Vázquez, P. E., & Villarreal Sánchez, R. C. (2019). Transporte electrónico a través de moléculas orgánicas. *REVISTA DE CIENCIAS TECNOLÓGICAS*, 2(2), 66–70. <https://doi.org/10.37636/recit.v226670>

- [10] Gorenskaia, E., Turner, K. L., Martín, S., Cea, P., & Low, P. J. (2021). Fabrication of metallic and non-metallic top electrodes for large-area molecular junctions. *Nanoscale*, 13(20), 9055–9074. <https://doi.org/10.1039/d1nr00917f>
- [11] Tipler, P. A., & Mosca, G. (2008). *Física para la ciencia y la tecnología. Volumen 2: Electricidad y magnetismo, luz* (6ª ed.). Barcelona: Reverté.
- [12] Ferry, D. K., Goodnick, S. M., & Bird, J. (2012a). *Transport in Nanostructures* (2a ed.). Cambridge University Press. <https://doi.org/10.1017/cbo9780511840463>
- [13] Sulston, K. W., & Davison, S. G. (2015). Transmission of Renormalized Benzene Circuits. En arXiv [cond-mat.mes-hall]. <http://arxiv.org/abs/1505.03808>
- [14] Mello, P. A., & Kumar, N. (2004). *Quantum transport in mesoscopic systems: Complexity and statistical fluctuations, a maximum-entropy viewpoint*. Oxford University Press.
- [15] Atkins, P., & de Paula, J. (2010). *Physical Chemistry* (9th ed.). Oxford University Press.
- [16] *Regla de Hund*. (s/f). Laguia2000.com. Recuperado el 2 de agosto de 2025, de <https://quimica.laguia2000.com/quimica-cuantica/regla-de-hund>
- [17] Foa Torres, L. E., Roche, S., & Charlier, J.-C. (2020). *Introduction to graphene-based nanomaterials: From electronic structure to quantum transport* (2a ed.). Cambridge University Press.
- [18] *Hybridization*. (2015, noviembre 19). Chemistry LibreTexts; Libretexts. [https://chem.libretexts.org/Ancillary\\_Materials/Reference/Organic\\_Chemistry\\_Glossary/Hybridization?utm\\_source](https://chem.libretexts.org/Ancillary_Materials/Reference/Organic_Chemistry_Glossary/Hybridization?utm_source)

- [19] Qiu, D., & Sulston, K. W. (2016). Electron transmission through modified benzene. En *arXiv [cond-mat.mes-hall]*. <https://doi.org/10.48550/ARXIV.1607.02072>
- [20] Davison, S. G., & Sulston, K. W. (2016). Applied-field effects on benzene transmission. En *arXiv [cond-mat.mes-hall]*.  
<https://doi.org/10.48550/ARXIV.1608.02460>
- [21] Darau, D., Begemann, G., Donarini, A., & Grifoni, M. (2009). *Interference effects on the transport characteristics of a benzene single-electron transistor*. *Physical Review B*, 79(23), 235404. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.79.235404>
- [22] Datta, S. (2005). *Quantum Transport: Atom to Transistor*. Cambridge University Press.
- [23] Goringe, C. M., Bowler, D. R., & Hernández, E. (1997). Tight-binding modelling of materials. *Reports on progress in physics. Physical Society (Great Britain)*, 60(12), 1447–1512. <https://doi.org/10.1088/0034-4885/60/12/001>
- [24] Harrison, W. A. (1989). *Electronic Structure and the Properties of Solids: The Physics of the Chemical Bond*. Dover Publications.
- [25] Slater, J. C., & Koster, G. F. (1954). Simplified LCAO method for the periodic potential problem. *The Physical Review*, 94(6), 1498–1524.  
<https://doi.org/10.1103/physrev.94.1498>
- [26] Sutton, A. P., Finnis, M. W., Pettifor, D. G., & Ohta, Y. (1988). The tight-binding bond model. *Journal of physics*, 21(1), 35–66.  
<https://doi.org/10.1088/0022-3719/21/1/007>

[27] Bagwell, P. F. (1990). Evanescent modes and scattering in quasi-one-dimensional wires. *Physical Review. B, Condensed Matter*, 41(15), 10354–10371.

<https://doi.org/10.1103/physrevb.41.10354>