



UNIVERSIDAD NACIONAL DE COLOMBIA

ESTUDIO TEÓRICO DEL TRANSPORTE ELECTRÓNICO A TRAVÉS DE NANOCINTAS

Edwin José Vargas Moreno

Universidad Nacional de Colombia
Facultad de Ciencias
Departamento de Física
Grupo de Materiales Nano-estructurados y sus Aplicaciones
Grupo de Óptica e Información Cuántica
Bogotá, Colombia
2024

ESTUDIO TEÓRICO DEL TRANSPORTE ELECTRÓNICO A TRAVÉS DE NANOCINTAS

Edwin José Vargas Moreno

Tesis de grado presentada(o) como requisito parcial para optar al título de:
Magister en Ciencias - Física

Director:
Rafael Ramón Rey González Dr. Sc.
Profesor Titular

Línea de Investigación:
Grupo de Materiales Nano-estructurados y sus Aplicaciones
Grupo de Óptica e Información Cuántica
Universidad Nacional de Colombia
Facultad de ciencias, Departamento de Física
Bogotá, Colombia
2024

(Dedicatoria)

A Ruby Angélica Gil Forero, por creer en mí, brindarme su apoyo y confianza en esta etapa de mi vida profesional. Tu ejemplo ha sido mi guía y me inspiró a alcanzar nuevas metas y creer en mis habilidades. Gracias por ser no sólo una fuente de sabiduría, sino también un modelo a seguir en mi vida personal y profesional.

A Yenny Paola Forero Méndez, por creer en mí y en mis capacidades. Tu confianza constante me impulsó a dar lo mejor de mí, recordándome siempre el potencial que llevo dentro. ¡Gracias por alentarme a alcanzar mis metas!

A Yenys María Monsalve Lobo, quien me hacía reflexionar en los momentos que sentía que no podía continuar

Agradecimientos

Quiero expresar mi más profundo agradecimiento a mi compañero Óscar David Hernández Pardo, por tu gran ayuda durante el proceso de programación de los cálculos realizados en este trabajo. Su conocimiento en Python y disposición fueron indispensables para lograr el desarrollo y la implementación de los comandos necesarios para el funcionamiento correcto del programa. .

Resumen

ESTUDIO TEÓRICO DEL TRANSPORTE ELECTRÓNICO A TRAVÉS DE NANOCINTAS

En este trabajo de grado, se estudia la probabilidad de transmisión a través de nanocintas de grafeno de tipo brazo de silla y zig-zag al variar sus dimensiones y reducir el sistema a un solo grado de libertad mediante el proceso de decimación. Se utilizan funciones de Green y la ecuación de Dyson para comprender el movimiento del electrón en estas estructuras. La implementación práctica de los cálculos de la probabilidad de transmisión, realizada en el lenguaje de programación Python, revela que las nanocintas de grafeno de tipo brazo de silla presentan una mayor probabilidad de transmisión en sus bordes en comparación con las nanocintas de tipo zig-zag. Estos resultados contribuyen a la comprensión de las propiedades de transmisión en nanocintas de grafeno con potenciales aplicaciones en dispositivos nanoestructurados.

PALABRAS CLAVE: Transporte electrónico, probabilidad de transmisión, nanocintas de grafeno, decimación, funciones de Green

Abstract

THEORETICAL STUDY OF ELECTRONIC TRANSPORT THROUGH NANORIBBONS

In this degree work, the probability of transmission through chair-arm and zig-zag type graphene nanoribbons is studied by varying their dimensions and reducing the system to a single degree of freedom through the decimation process. Green's functions and the Dyson equation are used to understand electron motion in these structures. The practical implementation of transmission probability calculations, carried out in the Python programming language, reveals that chair-arm type graphene nanoribbons have a higher transmission probability at their edges compared to zig-zag type nanoribbons. . . These results contribute to the understanding of the transmission properties in graphene nanoribbons with potential applications in nanostructured devices.

KEYWORDS: Electronic transport, transmission probability, graphene nanoribbons, decimation, Green's functions

Introducción

En los últimos años el avance tecnológico y científico ha abierto una gran cantidad de puertas a la investigación de nuevos materiales y dispositivos con propiedades tanto ópticas, eléctricas, magnéticas, mecánicas, termodinámicas entre otras [3, 9, 37]. El grafeno sobresale como un material novedoso e interesante el cual presenta una relación de dispersión electrónica con una brecha energética nula [34], formado por capas individuales de átomos de carbono organizados hexagonalmente [8]. Este material tiene varias aplicaciones con particularidades asombrosas [32], dentro de estas sobresalen las nanocintas de grafeno, las cuales son estructuras 1-D derivadas del grafeno con unos cuantos nanómetros de ancho y largo considerable [8]. Estas nanocintas pueden ser cortadas de diferentes maneras entre las cuáles sobre salen las brazo de silla y zig-zag [36] que a su vez exhiben diferentes propiedades fundamentales, entre estas propiedades sobresalen las características electrónicas, magnéticas, mecánicas y los comportamientos metálicos inherentes, las cuales desempeñan un papel crucial en la elaboración de diversos dispositivos [37, 29].

Las nanocintas de grafeno tipo brazo de silla presentan una estructura hexagonal con 6 átomos de carbono por anillo y se caracterizan por sus bordes paralelos a la dirección de los anillos, lo que les confiere una apariencia que recuerda a la forma de un sillón. Por otro lado, las nanocintas tipo zig-zag tienen bordes donde los enlaces de carbono forman ángulos cercanos a 120 grados entre sí, entre cada anillo que conforma su estructura. [12]. La diferencia en los bordes de las nanocintas de grafeno tipo brazo de silla y zig-zag las ha convertido en estructuras óptimas para el estudio del transporte electrónico, gracias a sus propiedades electrónicas y al comportamiento único relacionado con el efecto de dichos bordes. [21]

El estudio del transporte electrónico a través de las nanocintas de grafeno ha alcanzado gran trascendencia, puesto que estas estructuras presentan un comportamiento único relacionado con el efecto de sus bordes. Estudios recientemente realizados se han centrado en calcular el transporte de electrones a través de nanocintas de grafeno y cómo estos cambios influyen en su conductividad y sus posibles aplicaciones en dispositivos tales como transistores, diodos, fotodiodos, microchips, ordenadores, entre otros [7, 25, 17].

Este trabajo se centra en el cálculo del transporte electrónico a través de nanocintas de grafeno, teniendo en cuenta los diferentes bordes que estas presentan (brazo de silla y zig-zag). Utilizando procesos de decimación, ecuaciones de Green, Dyson y simulaciones computacionales en Python, buscamos comprender cómo los diferentes bordes (brazo de silla y zig-zag) impactan en las propiedades de transporte electrónico de las nanocintas de grafeno. Esto permitirá tener una mayor comprensión de la física de estas estructuras para aplicaciones futuras en la fabricación de dispositivos nanoelectrónicos.

Lista de Figuras

1-1.	Estructura cristalina del grafeno en dos ejes coordenados, teniendo en cuenta los vectores de traslación y sus respectivas hibridaciones tipo π , el cual nos dice que tan buen conductor es el material y tipo σ que nos habla sobre su dureza [8]	2
1-2.	Tipos de corte de una nanocinta de grafeno. El corte (a) corresponde a una nanocinta zig-zag, el tipo (b) a una brazo de silla y el (c) a una quirral	5
2-1.	Cadena lineal de átomos de carbono unidos por acoples V	14
2-2.	Nanodispositivo conectado a dos electrodos (Electrodo Derecho (R) y electrodo Izquierdo (I)), por el cual circula una corriente I_L , la cual viaja desde el electrodo izquierdo hasta el derecho.	16
2-3.	Cadena lineal de N átomos de carbono, conectados a dos electrodos y con energías efectivas V	17
3-1.	Nanocinta de grafeno tipo brazo de silla de 2 anillos de largo y uno de ancho, conectada a los electrodos L y R. Los átomos de carbonó se encuentran unidos por una energía efectiva V	19
3-2.	Nanocinta de grafeno con los sitios redefinidos y la energía de acople V entre ellos.	20
3-3.	Nanocinta de grafeno decimada con nuevas energías efectivas de acople ω , β y una nueva función de Green g_1	21
3-4.	Resultados de la probabilidad de transmisión en nanocintas de grafeno tipo brazo de silla para diferentes longitudes de anillos (a) dos, (b) cuatro y (c) siete anillos, con energías de acople de $1eV$	23
3-5.	Resultados al variar los parámetros de acoplamiento Γ y V para una nanocinta de grafeno tipo brazo de silla con siete anillos de longitud. (a) $\Gamma = -0,2eV$, $V = 0,5eV$, (b) $\Gamma = 0,5eV$, $V = -0,2eV$ y (c) $\Gamma = -0,5eV$, $V = -0,5eV$. .	24
3-6.	Nanocinta de grafeno tipo brazo de silla con un ancho de dos anillos, largo de tres anillos y energías de acople V	25
3-7.	Nanocinta de grafeno con los sitios renombrados.	25
3-8.	Primera decimación de la nanocinta de grafeno tipo brazo de silla con sitios renombrados, sus nuevas energías de acople V_1 , V_2 , V_3 y su nueva función de Green g_1	26

3-9. Nanocinta decimada con nuevas energías efectivas de acople V_4 , V_5 y función de Green g_2	27
3-10. Resultados de la probabilidad de transmisión en nanocintas de grafeno tipo brazo de silla para diferentes anchos de anillos (a) dos, (b) siete y (c) 11 anillos, con energías de acople de 1eV.	28
3-11. Resultados al variar los parámetros de acoplamiento Γ y V para una nanocinta de grafeno tipo brazo de silla con 11 anillos de ancho. (a) $\Gamma = -0,2eV$, $V = 0,5eV$, (b) $\Gamma = 0,5eV$, $V = -0,2eV$ y (c) $\Gamma = -0,5eV$, $V = -0,5eV$	29
3-12. Nanocinta de grafeno tipo zig-zag con un ancho de un anillo y dos anillos de longitud.	30
3-13. Nanocinta de grafeno tipo zig-zag en su primera decimación, con nuevo acople τ y la función de Green g_5	31
3-14. Nanocinta de grafeno tipo zig-zag decimada con energía de acople τ y función de Green g_6	31
3-15. Resultados de la probabilidad de transmisión en nanocintas de grafeno tipo Zig-Zag para diferentes longitudes de anillos (a) dos, (b) cuatro y (c) seis anillos, con energías de acople de 1eV.	32
3-16. Resultados al variar los parámetros de acoplamiento Γ y V para una nanocinta de grafeno tipo zig.zag con seis anillos de longitud. (a) $\Gamma = -0,2eV$, $V = 0,5eV$, (b) $\Gamma = 0,5eV$, $V = -0,2eV$ y (c) $\Gamma = -0,5eV$, $V = -0,5eV$	33
3-17. Variación la energía de acople v , manteniendo constante la energía Γ (a) $\Gamma = 1$ eV y V varia en el rango de -2 a 2 eV (b) $\Gamma = -1$ y V varia entre -2 y 2.	34
3-18. Variación la energía de acople Γ , manteniendo constante la energía V (a) $V = 1$ eV y Γ varia en el rango de -2 a 2 eV (b) $v = -1$ y Γ varia entre -2 y 2.	35
3-19. Nanocinta de grafeno tipo zig-zag con acoples V , longitud y ancho de 3 anillos.	36
3-20. Nanocinta de grafeno tipo zig-zag con sitios renombrados y energías efectivas V	36
3-21. primera decimación de la nanocinta de grafeno tipo zig-zag, sitios renombrados con nuevas energías de acople ω_1 , ω_2 , ω_3 y función de Green g_{10}	37
3-22. segunda decimación de la nanocinta de grafeno tipo Zig - Zag, sitios renombrados con nuevas energías de acople ω_4 , ω_5 y función de Green g_{11}	38
3-23. Decimación final de la nanocinta de grafeno tipo zig-zag con nuevas energías efectivas de acople ω_6 y nueva función de Green g_{12} para cada sitio.	38
3-24. Resultados de la probabilidad de transmisión en nanocintas de grafeno tipo zig-zag para diferentes anchos de anillos (a) tres, (b) seis y (c) diez anillos, con energías de acople de 1eV.	39
3-25. Resultados de variar los parámetros de acoplamiento Γ y V para una nanocinta de grafeno tipo zig.zag con diez anillos de ancho. (a) $\Gamma = -0,2eV$, $V = 0,5eV$, (b) $\Gamma = 0,5eV$, $V = -0,2eV$ y (c) $\Gamma = -0,5eV$, $V = -0,5eV$	41

A-1. Nanocinta de grafeno tipo brazo de silla de Largo $L=4$ (dos anillos), conectada a dos electrodos (izquierdo (L) y derecho (R)). Los átomos de carbonó se encuentran unidos por una energía efectiva V	44
A-2. Nanocinta de grafeno con los sitios renombrados y energía de acople V entre ellos.	44
A-3. Nanocinta de grafeno decimada con nuevas energías efectivas de acople ω , β y nueva función de Green g_1	50
B-1. Nanocinta de grafeno tipo brazo de silla con un ancho de dos anillos y energías de acople V	51
B-2. Nanocinta de grafeno con los sitios renombrados	51
B-3. Primera decimación de la nanocinta de grafeno tipo brazo de silla con sitios renombrados y sus nuevas energías de acople V_1 , V_2 , V_3 y su nueva función de Green g_1	63
B-4. Nanocinta decimada con nuevas energías efectivas de acople V_4 , V_5 y función de Green g_2	65
C-1. Nanocinta de grafeno tipo Zig Zag con un ancho de un anillo y dos de longitud.	66
C-2. Nanocinta de grafeno tipo zig-zag con los sitios renombrados	66
C-3. Nanocinta de grafeno tipo Zigzag en su primera decimación, con nuevo acople τ , función de Green g_5 y sitios renombrados.	68
C-4. Nanocinta de grafeno tipo Zig - Zag decimada con energía de acople τ y función de Green g_6	70
D-1. Nanocinta de grafeno tipo Zig - Zag con acoples V , longitud y ancho de 3 anillos	71
D-2. Nanocinta de grafeno tipo zig-zag con sitios renombrados y energías efectivas V	71
D-3. primera decimación de la nanocinta de grafeno tipo Zig - Zag, sitios renombrados con nuevas energías de acople ω_1 , ω_2 , ω_3 y función de Green g_{10}	85
D-4. segunda decimación de la nanocinta de grafeno tipo Zig - Zag, sitios renombrados con nuevas energías de acople ω_4 , ω_5 y función de Green g_{11}	87
D-5. Decimación final de la nanocinta de grafeno tipo Zig - Zag con nuevas energías efectivas de acople ω_6 , y nueva función de Green g_{12} para cada sitio.	88

Contenido

Agradecimientos	v
Resumen	vii
Introducción	ix
Lista de figuras	xi
1. GRAFENO	2
1.1. Grafeno	2
1.2. Propiedades del grafeno	3
1.3. Nanocintas de Grafeno	5
2. TRANSPORTE ELECTRÓNICO	7
2.1. Función de Green independiente del tiempo	7
2.1.1. Función de Green para una partícula libre	11
2.1.2. Función de Green para una cadena lineal de átomos de carbono	13
2.2. Función de Transmisión	15
2.2.1. Funciones de Green y probabilidad de transmisión para una cadena lineal de átomos de carbono interactuante con los electrodos	17
3. RESULTADOS	19
3.1. Nanocinta de grafeno tipo brazo de silla	19
3.1.1. Variación de su longitud	19
3.1.1.1. Cálculo de las funciones de Green G_{44} y G_{14}	22
3.1.1.2. Variación de los parámetros de acoplamiento Γ y V para una nanocinta de grafeno tipo brazo de silla de 7 anillos de longitud	24
3.1.2. Variación del ancho	25
3.1.2.1. Variación de los parámetros de acoplamiento Γ y V para una nanocinta de grafeno tipo brazo de silla de 11 anillos de ancho	29
3.2. Nanocinta de grafeno tipo Zig-Zag	30
3.2.1. Variación de su longitud	30
3.2.1.1. Variación de los parámetros de acoplamiento Γ y V para una nanocinta de grafeno tipo zig-zag de 6 anillos de longitud	33

3.2.1.2. Variación de los parámetros de acoplamiento Γ y V para una nanocinta tipo zig-zag de seis anillos de longitud	34
3.2.2. Variación del ancho	35
3.2.2.1. Variación de los parámetros de acoplamiento Γ y V para una nanocinta de grafeno tipo zig-zag de diez anillos de ancho	41
4. CONCLUSIONES	42
A. Anexo: Decimación de una nanocinta de grafeno tipo brazo de silla con dos anillos de longitud y uno de ancho	44
B. Anexo: Decimación de una nanocinta de grafeno tipo brazo de silla con dos anillos de ancho y tres de longitud	51
C. Anexo: Decimación de una nanocinta de grafeno tipo Zig - Zag con dos anillo de ancho y tres de longitud	66
D. Anexo: Decimación de una nanocinta de grafeno tipo Zig - Zag con tres anillos de ancho	71
E. Anexo: Objetivos	89
E.1. General	89
E.1.1. Específicos	89
Bibliografía	90

—

1. GRAFENO

En este capítulo se realizará una breve descripción sobre el grafeno y algunas de sus principales propiedades y sus posibles aplicaciones, incluyendo entre estos: las nanocintas de grafeno y sus tipos de cinta que se puede obtener al cortar su borde de diferentes formas.

1.1. Grafeno

El grafeno es una capa en dos dimensiones que posee un espesor característico de un solo átomo, su estructura se basa en átomos de carbono debidamente organizados en una red plana hexagonal que tiene una semejanza al panal que construyen las abejas [38][35], como lo muestra la figura 1-1 que se encuentran unidos a través de enlaces covalentes y con una distancia intramolecular aproximada de 1,42 Å [8].

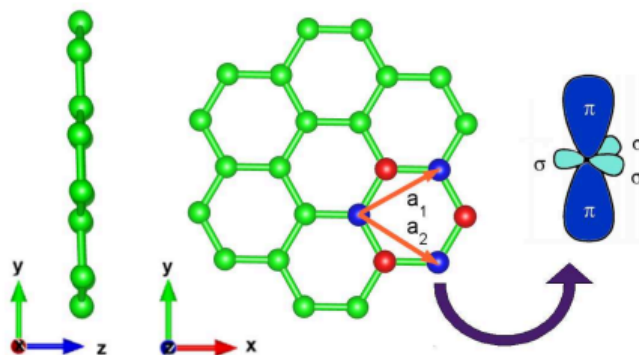


Figura 1-1.: Estructura cristalina del grafeno en dos ejes coordenados, teniendo en cuenta los vectores de traslación y sus respectivas hibridaciones tipo π , el cual nos dice que tan buen conductor es el material y tipo σ que nos habla sobre su dureza [8]

La estructura hexagonal de la cual forma parte pertenece al grupo espacial $P6/mm$ y puede ser definida como una red triangular que posee dos átomos de carbono en cada celda unidad

cuyos vectores están dados por

$$a_1 = \frac{a}{2}(3, -\sqrt{3}),$$
$$a_2 = \frac{a}{2}(3, \sqrt{3}),$$

donde a es la distancia entre átomos iguales en las celdas vecinas, resultando $|a_1| = |a_2| = 2,46\text{\AA}$.

La configuración electrónica del átomo de carbono está determinada a través de los siguientes subniveles de energía $1s^2$, $2s^2$, $2p^2$. No obstante, en el grafeno el orbital atómico $2s$ del carbono presenta una hibridación con dos orbitales $2p$ [23], que a su vez, genera tres orbitales moleculares organizados en forma trigonal con hibridación sp^2 , esta configuración resulta en un enlace covalente fuerte σ con los átomos de carbono vecinos de la red bidimensional [8]. Además, es importante resaltar que, aparte de la hibridación sp^2 , también se puede tener hibridación sp^3 . Esta última involucra que un átomo de carbono combine un orbital s con tres orbitales p , generando cuatro orbitales híbridos sp^3 [30], lo que se observa, por ejemplo, en el diamante, donde los átomos de carbono se organizan en una estructura cristalina tridimensional tetraédrica.

Además, el orbital p_z origina los enlaces π con los átomos de carbono vecinos [11], que son perpendiculares a los σ . La unión de estos enlaces es débil y permite saltos entre orbitales con deslocalización de electrones, en la que las propiedades electrónicas son de baja energía y una elevada conductividad eléctrica. «los enlaces tipo π explican la conductividad del grafeno y los tipo σ la resistencia». Por lo tanto, el grafeno se caracteriza por tener una estructura molecular en la que múltiples anillos de ciclohexanos están conectados entre sí, creando una cadena o una red de anillos interconectados, generando una nube de electrones π . Esta nube aporta a las propiedades conductoras y electrónicas del grafeno, lo que lo convierte en un material interesante para diversas aplicaciones tecnológicas y científicas. [8].

1.2. Propiedades del grafeno

El grafeno exhibe una amplia gama de propiedades distintivas, que abarcan campos como la electrónica, la óptica, la conductividad térmica y la resistencia mecánica [26]. A continuación, se ofrece una breve descripción de algunas de estas notables propiedades:

Térmicas

Posee una capacidad de conducción de 400 W/mK [28]; evidenciando una mejora de calidad en el material al momento de ser implementadas en dispositivos térmicos. Cabe aclarar que esta propiedad térmica del grafeno sugiere una gran variedad de usos y aplicaciones como lo es la disipación de calor en dispositivos electrónicos, así como combinaciones de compuestos que aumenten la conductividad térmica[3].

Mecánicas

Siendo el grafeno uno de los materiales altamente rígido y fuerte de los existentes superando el diamante y 200 veces más resistente que el acero, tiene un módulo de Young de $1Tpa$ que le permite soportar grandes fuerzas con una deformación leve y con densidad de $0,77mm$ por m^2 [22]. También cabe destacar que soporta grandes fuerzas de flexión, es decir, se puede doblar sin que se rompa [37].

Potenciador fotocatalítico

Gracias a su modificación química este puede ajustar sus propiedades superficiales tales como hidrofobicidad, Carga superficial, Rugosidad superficial, entre otras convirtiéndolo en una sustancia ideal en la fabricación de compuestos como el Óxido de grafeno, grafeno dopado, membranas y filtros [2]. Ahora, si se combina con TiO_2 se podría obtener un material con excelente capacidad de absorción, transparencia y conductividad [29].

Electrónicas

Debido a su configuración espacial y la organización de sus electrones en un arreglo de orbitales híbridos sp^2 , los electrones se desplazan en la superficie del grafeno a una velocidad excepcional de $10^6m/s$ [33]. Este movimiento exhibe un comportamiento similar al de partículas sin masa, las cuales son identificadas como fermiones de Dirac. En este contexto, las bandas de energía correspondientes a la conducción y la valencia no adoptan la forma de paraboloides, sino que adoptan la estructura de conos conectados en un solo punto, estos son conocidos como conos de Dirac. Esta configuración particular resulta en una relación de dispersión $E(k)$ que se presenta de manera lineal en el grafeno.

Además, es importante destacar que el nivel de Fermi se ubica precisamente en este punto de convergencia, esta singularidad cónica que presentan las bandas de energía del grafeno con una dependencia de la energía E en función del momento P del electrón, dada por la relación $E(P) = \pm v|P|$ (por analogía con los fotones, donde $E(P) = \pm c|P|$, donde v es la velocidad de Fermi, c la velocidad de la luz y $|P|$ es el módulo del momento en bidimensional, $|P| = \sqrt{Px^2 + Py^2}$). Por lo tanto, el grafeno es considerado un material semimetálico debido a que su banda prohibida (gap) es de valor cero como el de los metales, pero con la peculiaridad de que la densidad de estados en el nivel de Fermi es nula, como ocurre en los semiconductores; así que también se le puede considerar como un semiconductor de gap nulo[3].

Transporte electrónico

El grafeno es un material bidimensional que actúa como un semiconductor con una banda de energía nula [14]. Su estructura consiste en átomos dispuestos en patrones hexagonales. Lo

más sorprendente es su peculiar comportamiento de portadores de carga, que se desplazan como fermiones de Dirac. Estas partículas carecen de masa y muestran un comportamiento excepcionalmente distinto al de los electrones cuando se encuentran en campos magnéticos. Esta singularidad conduce a la observación del efecto Hall cuántico en el grafeno[10].

1.3. Nanocintas de Grafeno

Las nanocintas de grafeno son segmentos del material con dimensiones en el rango de nanómetros a decenas de nanómetros[31], lo que les otorga un ancho limitado. Aunque pueden tener longitudes considerablemente extensas, debido a su proporción entre el ancho y el largo, se les clasifica como estructuras cuasi unidimensionales, o sea, cercanas a un sistema unidimensional. Estas nanocintas se generan al recortar tiras estrechas de grafeno en diversas orientaciones, y su estudio ofrece una visión única de las propiedades y comportamientos del grafeno en dimensiones reducidas [8].

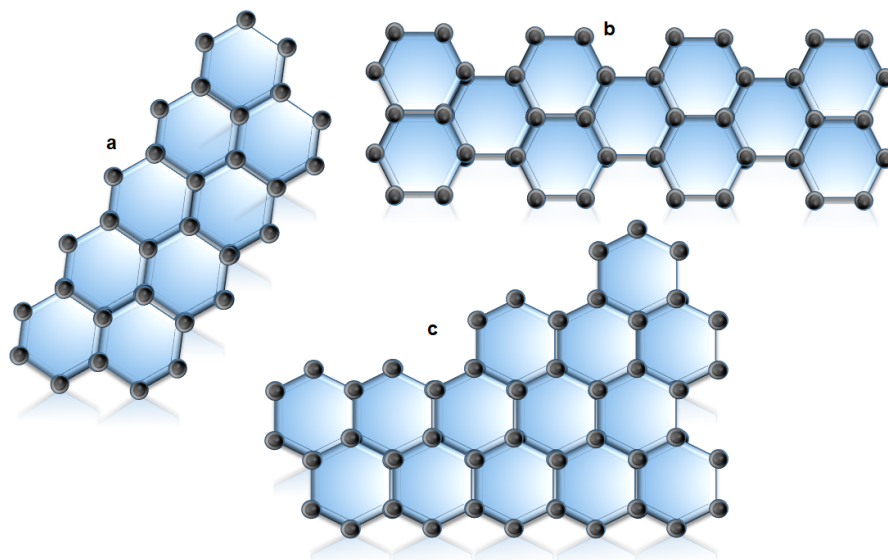


Figura 1-2.: Tipos de corte de una nanocinta de grafeno. El corte (a) corresponde a una nanocinta zig-zag, el tipo (b) a una brazo de silla y el (c) a una quiral

Sin embargo, en la figura 1-2. se observa la posibilidad de obtener tres tipos distintos de nanocintas, cada una de los cuales afecta de manera diferente las propiedades eléctricas, térmicas, mecánicas, magnéticas, etc. Las nanocintas de tipo zig-zag presentan características eléctricas, magnéticas y mecánicas notables [17]. Por otro lado, las nanocintas tipo brazo de silla tienen un comportamiento inherentemente metálico, mientras que las nanocintas quiral ofrecen la capacidad de ajustar las dimensiones de las bandas de energía. Este variado conjunto de nanocintas no solo amplía nuestras opciones en términos de propiedades, sino

que también resalta la versatilidad y el potencial de estas estructuras en diversas aplicaciones tecnológicas [8].

2. TRANSPORTE ELECTRÓNICO

A continuación, se abordarán las funciones de Green y su aplicación en física para una cadena lineal de átomos de carbono idénticos, para posteriormente encontrar la probabilidad de transmisión en la misma.

2.1. Función de Green independiente del tiempo

Las funciones de Green son usadas ampliamente en matemáticas para solucionar ecuaciones diferenciales con condiciones de frontera no homogéneas. Para el análisis de las funciones de Green se hará un desarrollo análogo a [13], [6] y [18]. La función de Green se define como una solución a una ecuación diferencial no homogénea de la forma

$$[Z - \hat{L}(r)]\hat{G}(r - r'; Z) = \delta(r' - r), \quad (2-1)$$

donde $\hat{L}(r)$ corresponde a un operador hermitiano y diferencial independiente del tiempo, Z es un número complejo ($Z = \lambda \pm iS$) con $\lambda \equiv Re(Z)$, $S \equiv Im(Z)$ y $\delta(r' - r)$ es la delta de Dirac, la cual indica que la función de Green será cero en todo punto excepto en $r' = r$. Dado que $\hat{L}(r)$ es un operador hermitico posee todo un conjunto de autofunciones $[\phi_n(r)]$, entonces:

$$\hat{L}(r)\phi_n(r) = \lambda_n\phi_n(r), \quad (2-2)$$

este conjunto es ortonormal, por lo cual

$$\int \phi_n^*(r)\phi_m(r)dr = \delta_{mn}. \quad (2-3)$$

Teniendo en cuenta que el complemento del conjunto de autofunciones $[\phi_n(r)]$ indica que

$$\sum_n \phi_n^*(r')\phi_n(r) + \int \phi_n^*(r')\phi_m(r)dn = \delta(r - r'), \quad (2-4)$$

donde n podrá tomar valores continuos o discretos. Para facilitar el uso de las funciones de Green se usa la notación de Dirac (Bra y Ket), por tal razón, se tiene

$$\langle r|\phi_n\rangle = \phi_n(r), \quad (2-5)$$

$$\langle r|\hat{G}(Z)|r'\rangle = \hat{G}(r, r'; Z), \quad (2-6)$$

$$\delta(r - r') = \langle r|r' \rangle, \quad (2-7)$$

$$1 = \int |r\rangle\langle r| dr. \quad (2-8)$$

Las cuatro ecuaciones anteriores las podemos escribir de la siguiente manera

$$1 = (Z - \hat{L})\hat{G}(Z), \quad (2-9)$$

$$\lambda_n|\phi_n\rangle = \hat{L}|\phi_n\rangle, \quad (2-10)$$

$$\delta_{nm} = \langle \phi_n|\phi_m \rangle, \quad (2-11)$$

$$1 = \sum_n |\phi_n\rangle\langle \phi_n| + \int |\phi_n\rangle\langle \phi_n| dn. \quad (2-12)$$

Estas representaciones facilitan toda la parte algebraica, además de que no restringe la representación de r , por lo cual podemos trabajar usando una representación de momentos ($P(K)$) para todas las ecuaciones. Con esto y asumiendo que los valores propios de $Z - \lambda$ son diferentes de cero para evitar indeterminaciones, la solución de la ecuación (2-1) sera

$$\hat{G}(Z) = \frac{1}{Z - \hat{L}}. \quad (2-13)$$

Usando las ecuaciones (2-13) y (2-14) tenemos

$$\hat{G}(Z) = \frac{1}{Z - \hat{L}} \left(\sum_n |\phi_n\rangle\langle \phi_n| + \int |\phi_n\rangle\langle \phi_n| dn \right), \quad (2-14)$$

$$\hat{G}(Z) = \sum_n \frac{|\phi_n\rangle\langle \phi_n|}{Z - \hat{L}} + \int \frac{|\phi_n\rangle\langle \phi_n|}{Z - \hat{L}} dn. \quad (2-15)$$

Esta ecuación también la podemos escribir en la representación de posiciones de la siguiente manera.

$$\hat{G}(r, r'; Z) = \sum_n \frac{\phi_n(r)\phi_n^*(r')}{Z - \lambda_n} + \int \frac{\phi_n(r)\phi_n^*(r')}{Z - \lambda_n} dn. \quad (2-16)$$

Como \hat{L} es un operador hermitiano todos sus autovalores (λ_n) serán reales. Por lo cual, si $Im[Z] \neq 0$, $Z \neq [\lambda_n]$ y significa que $\hat{G}(Z)$ es una función analítica en el plano z complejo con excepción de los puntos o partes del eje z real que corresponden a los autovalores discretos de \hat{L} . Si λ hace parte del espectro continuo, entonces la función de Green $\hat{G}(r, r'; \lambda)$ tendrá una discontinuidad en el plano real $Z=\lambda$.

Para solucionar el inconveniente donde $Z = \lambda$ se definen las funciones de Green usando un procedimiento de limitación, por tal razón las funciones de Green se expresan de la siguiente manera

$$\hat{G}^+(r, r'; \lambda) = \lim_{s \rightarrow 0^+} \hat{G}(r, r'; \lambda + iS), \quad (2-17)$$

$$\hat{G}^-(r, r'; \lambda) = \lim_{s \rightarrow 0^-} \hat{G}(r, r'; \lambda - iS). \quad (2-18)$$

Las funciones estarán definidas una vez que la convergencia y la existencia del límite se cumpla, por lo cual

$$\hat{G}^*(r, r'; Z) = \hat{G}(r, r'; Z^*). \quad (2-19)$$

Como λ hace parte del espectro continuo del operador \hat{L} , se verifica que

$$\hat{G}^-(r, r'; \lambda) = [\hat{G}^+(r, r'; \lambda)]^*. \quad (2-20)$$

Por lo cual

$$Re[\hat{G}^-(r, r'; \lambda)] = Re[\hat{G}^+(r, r'; \lambda)], \quad (2-21)$$

$$Im[\hat{G}^-(r, r'; \lambda)] = -Im[\hat{G}^+(r, r'; \lambda)]. \quad (2-22)$$

Usando la siguiente ecuación y teniendo en cuenta la ecuación (2-17) podemos expresar la discontinuidad de la siguiente manera

$$\lim_{y \rightarrow 0^+} \frac{1}{x \pm iy} = P \frac{1}{x} \pm i\pi\delta(x), \quad (2-23)$$

Esta ecuación se conoce como la fórmula de Cauchy, la cual establece una conexión fundamental entre la función inversa de un número complejo y las distribuciones singulares, como la delgada de Dirac.

$$\Delta\hat{G}(\lambda) = \hat{G}^+(\lambda) - \hat{G}^-(\lambda). \quad (2-24)$$

Como

$$\Delta\hat{G}(r, r'; \lambda) = -2\pi i \sum_n \delta(\lambda - \lambda_n) \phi_n(r) \phi_n^*(r'), \quad (2-25)$$

$$\Delta\hat{G}(r, r'; \lambda) = -2\pi i \sum_n \delta(\lambda - \lambda_n) \phi_n(r) \phi_n^*(r') - 2\pi i \int \delta(\lambda - \lambda_n) \phi_n(r) \phi_n^*(r') dn. \quad (2-26)$$

En cuanto a la diagonal de la matriz de las ecuaciones (2-17) y 2-21) tenemos.

$$\hat{G}^\pm(r, r'; \lambda) = P \sum_n \frac{\phi_n(r) \phi_n^*(r')}{\lambda - \lambda_n} \pm i\pi \sum_n \delta(\lambda - \lambda_n) \phi_n(r) \phi_n^*(r'), \quad (2-27)$$

Integramos respecto a r .

$$\hat{G}^\pm(r, r'; \lambda) = P \int \frac{\phi_n(r) \phi_n^*(r')}{\lambda - \lambda_n} dn \pm i\pi \int \delta(\lambda - \lambda_n) \phi_n(r) \phi_n^*(r') dn, \quad (2-28)$$

$$Tr\hat{G}^\pm(\lambda) = P \sum_n \frac{1}{\lambda - \lambda_n} \pm i\pi \sum_n \delta(\lambda - \lambda_n), \quad (2-29)$$

donde $\sum_n \delta(\lambda - \lambda_n)$ corresponde al número de estados para λ , en otras palabras $N(\lambda)$ y la cantidad

$$\rho(r, \lambda) \equiv \sum_n \delta(\lambda - \lambda_n) \phi_n(r) \phi_n^*(r') + \int \delta(\lambda - \lambda_n) \phi_n(r) \phi_n^*(r') dn, \quad (2-30)$$

corresponde a la densidad de estados por unidad de volumen, por consiguiente se define

$$N(\lambda) = \int \rho(r, \lambda) dr. \quad (2-31)$$

En consecuencia \hat{G}^+ y \hat{G}^- no corresponden al mismo operador, entonces

$$\Delta \hat{G}(r, r'; \lambda) = -2\pi \rho(r, \lambda). \quad (2-32)$$

Finalmente, vemos que las funciones de Green nos permitirán obtener soluciones a ecuaciones reales no homogéneas. Por lo tanto, considere el siguiente teorema que muestra la utilidad de las funciones de Green en el estudio de ecuaciones no homogéneas [6].

TEOREMA: sea $\hat{L}(r)$ un operador lineal hermitiano independiente del tiempo y Z un número complejo. Consideramos la siguiente ecuación diferencial no homogénea[6]

$$[Z - L(r)]u(r) = f(r). \quad (2-33)$$

Entonces la solución $u(r)$ que satisface la ecuación diferencial será:

$$u(\mathbf{r}) = \begin{cases} \int \hat{G}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; z) f(\mathbf{r}') d\mathbf{r}' & \text{si } z \neq \lambda_n \\ \int \hat{G}^\pm(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; z) f(\mathbf{r}') d\mathbf{r}' + \phi(\mathbf{r}) & \text{si } z = \lambda_n \end{cases}, \quad (2-34)$$

Con $\phi(r)$ que representa la solución general de la ecuación homogénea y $\hat{G}(r, r'; Z)$ corresponde a la función de Green. Para la ecuación de Schrodinger independiente del tiempo se tiene que

$$[Z - \hat{H}(r)]\hat{G}(r, r'; E) = 0. \quad (2-35)$$

Haciendo las sustituciones correspondientes.

$$\hat{L}(r) \longrightarrow \hat{H}(r),$$

$$\lambda \longrightarrow E,$$

$$Z = \lambda + is \longrightarrow Z = E + is,$$

$$\lambda_n \longrightarrow E_n.$$

La función de Green asociada a la ecuación de schrodinger independiente del tiempo será:

$$[Z - \hat{H}(r)]\hat{G}(r, r'; E) = \delta(r, r'). \quad (2-36)$$

Por lo cual

$$\hat{G}(r, r'; Z) = \sum_n \frac{|\phi_n\rangle\langle\phi_n|}{Z - E} + \int \frac{|\phi_n\rangle\langle\phi_n|}{Z - E} dn. \quad (2-37)$$

2.1.1. Función de Green para una partícula libre

En física, las partículas que se mueven libremente en el espacio sin ser afectadas por fuerzas externas se denominan partículas libres [1]. Un ejemplo son las partículas que no se afectan por la presencia de campos electromagnéticos. Partimos del Hamiltoniano

$$H = \frac{-\hbar^2}{2m} \nabla^2 + U(x), \quad (2-38)$$

donde H es un operador Hamiltoniano que describe la energía total de un sistema cuántico. Teniendo en cuenta que la partícula libre no está sometida a ningún tipo de fuerza externa tenemos que $U(x) = 0$, por lo tanto, el Hamiltoniano será.

$$H = \frac{-\hbar^2}{2m} \nabla^2. \quad (2-39)$$

Por otro lado la ecuación de Schrodinger independiente del tiempo es.

$$H\Phi(x) = E\Phi(x). \quad (2-40)$$

Reemplazando (2-40) en (2-41) tenemos la ecuación de Schrodinger independiente del tiempo para la partícula libre.

$$\frac{-\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Phi(x) = E\Phi(x). \quad (2-41)$$

Asumiendo que la función de onda tiene la forma de una onda plana.

$$\Phi(x) = Ae^{ikx}. \quad (2-42)$$

Entonces.

$$\frac{-\hbar^2}{2m} \nabla^2 Ae^{ikx} = EAe^{ikx}, \quad (2-43)$$

$$\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 Ae^{ikx} + EAe^{ikx} = 0, \quad (2-44)$$

Recordemos que $\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2}$, por lo tanto.

$$\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} Ae^{ikx} + EAe^{ikx} = 0. \quad (2-45)$$

Derivando dos veces tenemos.

$$\frac{\partial Ae^{ikx}}{\partial x} = ikAe^{ikx}, \quad (2-46)$$

$$\frac{\partial^2 Ae^{ikx}}{\partial x^2} = -k^2 Ae^{ikx}, \quad (2-47)$$

Sustituyendo (2-48) en (2-46) se tiene que.

$$\frac{\hbar^2}{2m}(-k^2 A e^{ikx}) + E A e^{ikx} = 0, \quad (2-48)$$

$$\frac{-\hbar^2}{2m} k^2 A e^{ikx} + E A e^{ikx} = 0, \quad (2-49)$$

$$\left(\frac{-\hbar^2 k^2}{2m} + E\right) A e^{ikx} = 0, \quad (2-50)$$

esta ecuación tiene dos posibles soluciones, la primera es cuando $A = 0$ y la segunda $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$. Recordemos que la función de Green independiente del tiempo está definida por.

$$[Z - L(x)]G(x - x') = \delta(x' - x), \quad (2-51)$$

donde

$$Z \longrightarrow E \quad \text{y} \quad L(r) \longrightarrow H(r), \quad (2-52)$$

por lo cual (2-51) queda de la forma

$$[E - H]G(x - x') = \delta(x' - x). \quad (2-53)$$

Usando la expresión (2-39) y teniendo en cuenta que $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ y $\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2}$, la ecuación (2-53) puede escribirse de la forma.

$$\left[\frac{\hbar^2 k^2}{2m} - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2}\right] G(x - x') = \delta(x' - x), \quad (2-54)$$

Multiplicando por $\frac{2m}{\hbar^2}$ se tiene.

$$\left[k^2 - \frac{\partial}{\partial x^2}\right] G(x - x') = \delta(x' - x) \frac{2m}{\hbar^2}. \quad (2-55)$$

Esto nos lleva a una solución de la forma $G(x - x') = A e^{ik|x-x'|}$, donde A es una constante de integración que se determinaremos a continuación.

Se reemplaza nuestra solución en la ecuación (2-55).

$$\left[k^2 - \frac{\partial^2}{\partial x^2}\right] A e^{ik|x-x'|} = \delta(x' - x) \frac{2m}{\hbar^2}, \quad (2-56)$$

$$k^2 A e^{ik|x-x'|} - \frac{\partial}{\partial x^2} A e^{ik|x-x'|} = \delta(x' - x) \frac{2m}{\hbar^2}, \quad (2-57)$$

$$k^2 A e^{ik|x-x'|} + A k^2 e^{ik|x-x'|} = \delta(x' - x) \frac{2m}{\hbar^2}, \quad (2-58)$$

$$2A k^2 e^{ik|x-x'|} = \delta(x' - x) \frac{2m}{\hbar^2}, \quad (2-59)$$

$$Ak^2 e^{ik|x-x'|} = \delta(x' - x) \frac{m}{\hbar^2}, \quad (2-60)$$

Tengamos presente que

$$\delta(x - x') = \frac{1}{2\pi} \int e^{ik|x-x'|} dk, \quad (2-61)$$

$$u = ik|x - x'|,$$

$$du = i|x - x'| dk, \quad (2-62)$$

$$dk = \frac{du}{i|x - x'|},$$

$$\delta(x - x') = \frac{1}{2\pi} \int e^u \frac{du}{i|x - x'|}, \quad (2-63)$$

$$\delta(x - x') = \frac{1}{2\pi} e^{i|x-x'|} \frac{1}{i|x - x'|}, \quad (2-64)$$

$$\delta(x - x') = \frac{e^{i|x-x'|}}{2\pi i|x - x'|}. \quad (2-65)$$

Reemplazando (2-65) en (2-60) nos queda.

$$Ak^2 e^{ik|x-x'|} = \frac{e^{i|x-x'|} m}{2\pi i|x - x'| \hbar^2}. \quad (2-66)$$

Por lo tanto A será.

$$A = \frac{m}{2\pi i k^2 |x - x'| \hbar^2}. \quad (2-67)$$

Entonces la función de Green sera.

$$G(x - x') = \frac{m}{2\pi i k^2 |x - x'| \hbar^2} e^{ik|x-x'|}, \quad (2-68)$$

$$G(x - x') = \frac{e^{ik|x-x'|}}{4\pi i E |x - x'|}. \quad (2-69)$$

La anterior ecuación es conocida como la función de Green para una partícula libre la cual describe la propagación de una gran cantidad de ondas en el plano tridimensional.

2.1.2. Función de Green para una cadena lineal de átomos de carbono

La función de Green es de suma importancia en la física al momento de describir las propiedades electrónicas de algunos materiales y como los electrones se mueven en el mismo, a continuación examinaremos cómo se comportan los electrones en una cadena lineal compuesta por n átomos de carbono (ver figura **2-1**) usando la función de Green

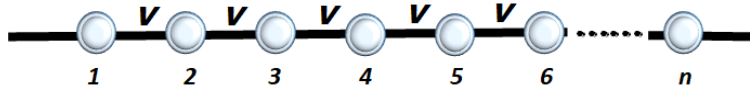


Figura 2-1.: Cadena lineal de átomos de carbono unidos por acoples V

La función de Green está determinada por la ecuación.

$$G(E - H) = 1, \quad (2-70)$$

donde H es el hamiltoniano del sistema y E es la energía.

La ecuación (2-70) la podemos escribir de forma matricial de la siguiente manera.

$$G_{ij} = \langle i|G|j\rangle, \quad (2-71)$$

$$\langle i|G(E - H)|j\rangle = \langle i|j\rangle, \quad (2-72)$$

ahora formamos la base completa en el espacio de Hilbert, para esto multiplicamos (2-72) por el operador de completos ($|k\rangle\langle k|$). Tengamos presente que cuando usamos este operador, estamos realizando una suma sobre todos los estados posibles de $|k\rangle$, entonces tenemos [24]

$$\sum_k \langle i|G|k\rangle\langle k|(E - H)|j\rangle = \delta_{ij}, \quad (2-73)$$

$$\sum_k G_{ik}\langle k|(E - H)|j\rangle = \delta_{ij}, \quad (2-74)$$

$$\sum_k G_{ik}\langle k|E|j\rangle - \langle k|H|j\rangle = \delta_{ij}, \quad (2-75)$$

$$\sum_k G_{ik}(E\delta_{kj} - H_{kj}) = \delta_{ij}. \quad (2-76)$$

El hamiltoniano para nuestro sistema está dado por.

$$H = \sum_n \epsilon_n |n\rangle\langle n| + \sum_{n \neq m} v_{nm} |n\rangle\langle m|. \quad (2-77)$$

Escrito en forma matricial será.

$$\langle k|H|j\rangle = H_{kj}, \quad (2-78)$$

$$\langle k|H|j\rangle = \sum_n \epsilon_n \langle k|n\rangle\langle n|j\rangle + \sum_{n \neq m} v_{nm} \langle k|n\rangle\langle m|j\rangle, \quad (2-79)$$

$$\langle k|H|j\rangle = \sum_n \epsilon_n \delta_{kn} \delta_{nj} + \sum_{n \neq m} v_{nm} \delta_{kn} \delta_{mj}. \quad (2-80)$$

Asumiendo que $k = n$ en la primer sumatoria, nos queda

$$\langle k|H|j\rangle = \epsilon_k \delta_{kk} \delta_{kj} + \sum_{n \neq m} v_{nm} \delta_{kn} \delta_{mj}, \quad (2-81)$$

$$\langle k|H|j\rangle = \epsilon_k \delta_{kj} + \sum_{n \neq m} v_{nm} \delta_{kn} \delta_{mj}, \quad (2-82)$$

$$\langle k|H|j\rangle = \epsilon_k \delta_{kj} + v_{kj}. \quad (2-83)$$

Reemplazando (2-83) en (2-76)

$$\sum_k G_{ik} (E \delta_{kj} - (\epsilon_k \delta_{kj} + v_{kj})) = \delta_{ij}, \quad (2-84)$$

$$\sum_k G_{ik} E \delta_{kj} - \sum_k G_{ik} \epsilon_k \delta_{kj} - \sum_k G_{ik} v_{kj} = \delta_{ij}, \quad (2-85)$$

$$\sum_k G_{ik} E \delta_{kj} - \sum_k G_{ik} \epsilon_k \delta_{kj} = \sum_k G_{ik} v_{kj} + \delta_{ij}, \quad (2-86)$$

$$G_{ij} E - G_{ij} \epsilon_j = \delta_{ij} + \sum_k G_{ik} v_{kj}, \quad (2-87)$$

$$G_{ij} (E - \epsilon_j) = \delta_{ij} + \sum_k G_{ik} v_{kj}, \quad (2-88)$$

$$G_{ij} = \frac{\delta_{ij}}{E - \epsilon_j} + \frac{\sum_k G_{ik} v_{kj}}{E - \epsilon_j}. \quad (2-89)$$

Llamando $G_0 = \frac{1}{E - \epsilon_j}$ que es la función de Green no perturbada del sistema, por lo cual

$$G_{ij} = G_0 \delta_{ij} + G_0 \sum_k G_{ik} v_{kj}. \quad (2-90)$$

La ecuación (2-90) es conocida como la función de Green para un sistema lineal de átomos de carbono o como la ecuación de Dyson, esta nos brinda información de la dinámica electrónica, adicionalmente, el segundo término de la derecha nos muestra como es la interacción con los primeros vecinos.

2.2. Función de Transmisión

Es la probabilidad de que los electrones viajen desde el reservorio o contacto izquierdo al derecho o viceversa. Para poder determinar esta función, se debe conocer toda la información relevante de como interactúan los electrodos entre sí y con el nanodispositivo [19].



Figura 2-2.: Nanodispositivo conectado a dos electrodos (Electrodo Derecho (R) y electrodo Izquierdo (I)), por el cual circula una corriente I_L , la cual viaja desde el electrodo izquierdo hasta el derecho.

El flujo de corriente que circula por un nanodispositivo (ver figura 2-2) del contacto izquierdo al derecho es [24]

$$\hat{I}_L = \frac{2e}{h} \int \hat{\tau}_L(E) f_L dE, \quad (2-91)$$

y para el caso de que la corriente viaje del electrodo derecho al izquierdo tenemos:

$$\hat{I}_R = \frac{2e}{h} \int \hat{\tau}_R(E) f_R dE, \quad (2-92)$$

donde h es la constante de Planck ($h = 6,626 \times 10^{-34} Js$), e corresponde a la carga del electrón ($e = -6,602 \times 10^{-19} c$), f es la función de distribución de fermi de cada contacto y $\hat{\tau}(E)$ es la probabilidad de trasmisión para cada uno de los electrodos.

La corriente total será entonces $\hat{I} = \hat{I}_L - \hat{I}_R$.

$$\hat{I} = \frac{2e}{h} \int (\hat{\tau}(E)_L f_L - \hat{\tau}(E)_R f_R) dE. \quad (2-93)$$

Teniendo en cuenta que los electrodos de nuestro sistema son exactamente iguales, entonces:

$$\hat{I} = \frac{2e}{h} \int \hat{\tau}(E) (f_L - f_R) dE, \quad (2-94)$$

por lo tanto

$$\hat{\tau}(E) = Tr[\hat{G}(E)\Gamma_R\hat{G}^\dagger(E)\Gamma_L], \quad (2-95)$$

donde $\hat{\tau}(E)$ corresponde a la probabilidad de trasmisión, la cual nos da toda la información acerca de las propiedades electrónicas del sistema cuando se le genera una diferencia de potencial químico entre los electrodos [19][4].

2.2.1. Funciones de Green y probabilidad de transmisión para una cadena lineal de átomos de carbono interactuante con los electrodos

Consideremos un sistema lineal de N átomos de carbono conectados a dos electrodos tal como se muestra en la figura 2-3. A continuación, calcularemos las funciones de Green que va desde el sitio uno hasta el sitio N teniendo en cuenta las interacciones del sistema con los contactos [24].

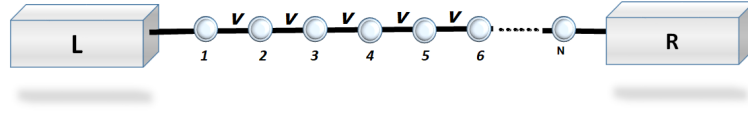


Figura 2-3.: Cadena lineal de N átomos de carbono, conectados a dos electrodos y con energías efectivas V

Introducimos una nueva cantidad conocida como la auto energía irreducible ΣG donde $\Sigma = \Sigma_L + \Sigma_R$ (Auto energías generadas por los contactos L, R y la interacción con los átomos de carbono de la cadena lineal). Teniendo en cuenta que deseamos encontrar la función de Green desde el sitio uno hasta el N, podemos reescribir la ecuación (2-90) de la siguiente manera [24].

$$\hat{G}^{1N} = \hat{G}_{1N} + \hat{G}_{11}\Sigma_L\hat{G}^{1N} + \hat{G}_{1N}\Sigma_R\hat{G}^{NN}, \quad (2-96)$$

con $\Sigma_L = \Sigma\hat{\Gamma}_L\hat{G}^L\hat{\Gamma}_L$, $\Sigma_R = \Sigma\hat{\Gamma}_R\hat{G}^R\hat{\Gamma}_R$ donde $\hat{\Gamma}_L$ y $\hat{\Gamma}_R$ son las energías de acoplamiento entre la cadena lineal y los electrodos. \hat{G}_{1N} , \hat{G}_{11} representa las funciones de Green del electrón no perturbadas y \hat{G}^{1N} , \hat{G}^{NN} corresponde a la función de Green de cada electrodo.

Haciendo un procedimiento análogo al anterior, podemos expresar \hat{G}^{NN} en términos de las auto energías de la siguiente forma.

$$\hat{G}^{NN} = \frac{\hat{G}_{NN} + \hat{G}_{1N}\Sigma_L\hat{G}^{1N}}{1 - \hat{G}_{NN}\Sigma_R}, \quad (2-97)$$

Reemplazando (2-97) en (2-96) y haciendo un poco de álgebra tenemos que:

$$\hat{G}^{1N} = \frac{\hat{G}_{1N}}{(1 - \hat{G}_{11}\Sigma_L)(1 - \hat{G}_{NN}\Sigma_R) - (\hat{G}_{1N})^2\Sigma_R\Sigma_L}, \quad (2-98)$$

Las autoenergías Σ_L y Σ_R pueden ser expresadas usando la matriz de ensanchamiento [15][5], quedando de la siguiente manera.

$$\Sigma_L = -i\frac{\hat{\Gamma}_L}{2}, \quad (2-99)$$

$$\Sigma_R = -i\frac{\hat{\Gamma}_R}{2}, \quad (2-100)$$

teniendo en cuenta esto, la ecuación (2-98) nos queda de la siguiente forma.

$$\hat{G}^{1N} = \frac{\hat{G}_{1N}}{(1 + i\frac{\hat{\Gamma}_L}{2}\hat{G}_{11})(1 + i\frac{\hat{\Gamma}_R}{2}\hat{G}_{NN}) + (\hat{G}_{1N})^2\frac{\hat{\Gamma}_L\hat{\Gamma}_R}{4}}, \quad (2-101)$$

Si consideramos que los contactos poseen características iguales, se cumple que $\hat{\Sigma}_L = \hat{\Sigma}_R = \hat{\Sigma}$ y $\hat{G}_{11} = \hat{G}_{NN}$ por lo cual (2-101) la podemos escribir como.

$$\hat{G}^{1N} = \frac{\hat{G}_{1N}}{(1 + i\frac{\hat{\Gamma}}{2}\hat{G}_{NN})^2 + (\hat{G}_{1N})^2\frac{(\hat{\Gamma})^2}{4}}, \quad (2-102)$$

donde \hat{G}^{1N} corresponde a la función de Green desde el sitio uno hasta el sitio N, teniendo en cuenta las interacciones con los contactos.

Considerando que el electrón recorre cada átomo de carbono del sistema lineal, solo ocupara un estado de cada átomo. La función de Green G^{1N} y Γ_L, Γ_R serán números y no matrices, por lo cual la ecuación de probabilidad (2-95) queda de la siguiente manera [24].

$$\tau(E) = \Gamma^2|G^{1N}|^2, \quad (2-103)$$

Reemplazando (2-102) en (2-103) tenemos.

$$\tau(E) = \frac{\Gamma^2|G_{1N}|^2}{|(1 + i\frac{\Gamma}{2}G_{NN})^2 + (G_{1N})^2\frac{(\Gamma)^2}{4}|^2}. \quad (2-104)$$

Finalmente obtenemos la probabilidad de transmisión para un sistema lineal de átomos de carbono teniendo en cuenta la cantidad de átomos, las interacciones entre ellos y con los electrodos.

3. RESULTADOS

En este capítulo se calculan las probabilidades de transmisión en las nanocintas de grafeno tipo brazo de silla y zig-zag, además se muestran los resultados obtenidos al variar el ancho y largo de estas nanocintas.

3.1. Nanocinta de grafeno tipo brazo de silla

3.1.1. Variación de su longitud

Nuestro sistema consta de una nanocinta de grafeno de un ancho de n y N anillos de largo (que para nuestro sistema tomaremos $N = 2$) conectada a dos electrodos, tal como se muestra en la figura 3-1. A esta nanocinta se le puede aplicar un proceso de decimación con el fin de restringir el movimiento de los electrones a un solo “canal”, como se muestra en la figura 3-3.

El Hamiltoniano de nuestra nanocinta de grafeno está descrito por:

$$H = \sum_{N=1}^n \epsilon_N C_N^\dagger C_N + \sum_{N=1}^{n-1} V (C_N^\dagger C_{N+1} + C_{N+1}^\dagger C_N) + \epsilon_L d_L^\dagger d_L + \epsilon_R d_R^\dagger d_R + \Gamma_R (d_R^\dagger C_N + C_N^\dagger d_R) + \Gamma_L (d_L^\dagger C_1 + C_1^\dagger d_L), \quad (3-1)$$

donde ϵ_N es la energía en el sitio N , V es la energía de acople, la cual asumimos que es igual para todos los sitios suponiendo que solamente tenemos orbitales tipo S , $C_N^\dagger C_N$ representa el operador número y nos dice cuántos electrones tenemos en el sitio N , $C^\dagger C$ y $d^\dagger d$ son los operadores de creación y destrucción de electrones en cada uno de los sitios N y $N + 1$ y de los contactos, Γ es la energía del electrodo derecho (R) y el izquierdo (L)

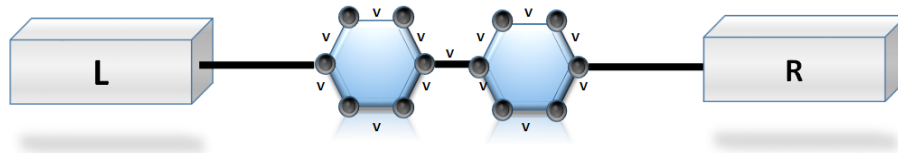


Figura 3-1.: Nanocinta de grafeno tipo brazo de silla de 2 anillos de largo y uno de ancho, conectada a los electrodos L y R. Los átomos de carbono se encuentran unidos por una energía efectiva V .

Para realizar el proceso de decimación redefiniremos los sitios por columnas, las cuales irán desde cero hasta n y las filas se definirán en orden alfabético, tal como se muestra en la figura 3-2. Cada sitio tiene asociada una función de Green no perturbada [20] dada por

$$g_0 = \frac{1}{E - \epsilon - i\eta}, \quad (3-2)$$

donde ϵ representa la energía por sitio, la cual para nuestro sistema la tomaremos nula, por lo tanto tendremos que:

$$g_0 = \frac{1}{E - i\eta}. \quad (3-3)$$

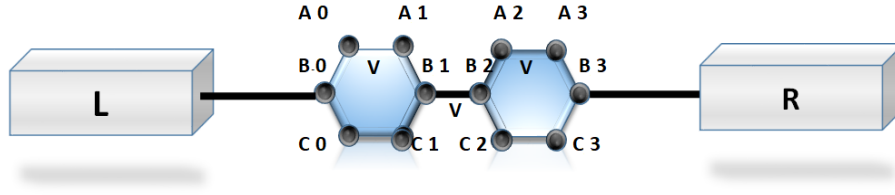


Figura 3-2.: Nanocinta de grafeno con los sitios redefinidos y la energía de acople V entre ellos.

Aplicando la ecuación (2-90) a los nuevos sitios A_0 , B_0 , Y C_0 , se obtiene lo siguiente.

$$G_{00}^A = g_0 + g_0 V G_{00}^B + g_0 V G_{01}^A, \quad (3-4)$$

$$G_{00}^B = g_0 + g_0 V G_{00}^C + g_0 V G_{00}^A, \quad (3-5)$$

$$G_{00}^C = g_0 + g_0 V G_{00}^B + g_0 V G_{01}^C, \quad (3-6)$$

análogamente se encuentra que G_{01}^A y G_{01}^C son.

$$G_{01}^A = g_0 V G_{00}^A + g_0 V G_{01}^B, \quad (3-7)$$

$$G_{01}^C = g_0 V G_{00}^C + g_0 V G_{01}^B. \quad (3-8)$$

Reemplazando (3-7) y (3-8) en (3-4) y (3-6) respectivamente nos queda lo siguiente.

$$G_{00}^A = \frac{g_0 + g_0 V G_{00}^B + g_0^2 V^2 G_{01}^B}{1 - g_0^2 V^2}, \quad (3-9)$$

$$G_{00}^C = \frac{g_0 + g_0 V G_{00}^B + g_0^2 V^2 G_{01}^B}{1 - g_0^2 V^2}, \quad (3-10)$$

donde se puede ver que $G_{00}^A = G_{00}^C$. Ahora, reemplazando (3-9) y (3-10) en (3-5) da lugar a.

$$G_{00}^B = g_1 + g_1 \omega G_{01}^B, \quad (3-11)$$

donde g_1 es la nueva función de Green con una energía efectiva de acople ω , dadas por

$$g_1 = \frac{g_0 - g_0^3 V^2 + 2g_0^2 V}{1 - 3g_0^2 V^2}, \quad (3-12)$$

$$\omega = \frac{2g_0^3 V^3}{g_0 - g_0^3 V^2 + 2g_0^2 V}. \quad (3-13)$$

Siguiendo el mismo procedimiento, para G_{11}^B, G_{22}^B y G_{33}^B se obtiene:

$$G_{11}^B = g_1 + g_1 \omega G_{10}^B + g_1 \beta G_{12}^B, \quad (3-14)$$

$$G_{22}^B = g_1 + g_1 \omega G_{23}^B + g_1 \beta G_{21}^B, \quad (3-15)$$

$$G_{33}^B = g_1 + g_1 \omega G_{32}^B, \quad (3-16)$$

Donde

$$\beta = \frac{g_0 V - g_0^3 v^3}{g_0 - g_0^3 V^2 + 2g_0^2 V}. \quad (3-17)$$

Por todo lo anterior, el sistema decimado queda de la siguiente forma:

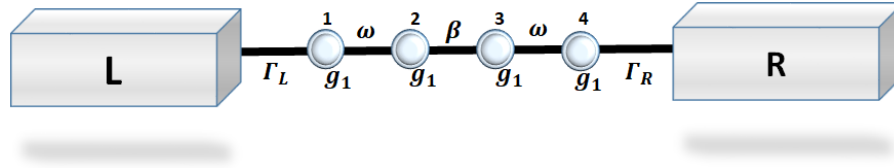


Figura 3-3.: Nanocinta de grafeno decimada con nuevas energías efectivas de acople ω , β y una nueva función de Green g_1 .

En el anexo A se presenta con detalle el procedimiento de decimación realizado. Si agregamos un anillo más al sistema saldrán dos nuevos sitios con sus respectivas funciones, esto modifica las anteriores funciones de la siguiente forma:

$$G_{00}^B = g_1 + g_1 \omega G_{01}^B, \quad (3-18)$$

$$G_{11}^B = g_1 + g_1 \omega G_{10}^B + g_1 \beta G_{12}^B, \quad (3-19)$$

$$G_{22}^B = g_1 + g_1 \omega G_{23}^B + g_1 \beta G_{21}^B, \quad (3-20)$$

$$G_{33}^B = g_1 + g_1 \omega G_{32}^B + g_1 \beta G_{34}^B, \quad (3-21)$$

$$G_{44}^B = g_1 + g_1 \omega G_{43}^B. \quad (3-22)$$

Nótese que, al incrementar el número de anillos, se da una relación de recurrencia entre los acoples de tal manera que estos quedan de forma intercalada ($\omega, \beta, \omega, \beta, \omega, etc.$), mientras las

funciones de Green g_1 serán las mismas para cada sitio.

Teniendo en cuenta la ecuación (2-104) y que nuestro sistema tiene 4 sitios, la probabilidad de transmisión para la nanocinta de grafeno con dos anillos decimada queda expresada por.

$$\tau(E) = \frac{\Gamma^2 |G_{14}|^2}{|(1 + i\frac{\Gamma}{2}G_{44})^2 + (G_{14})^2 \frac{(\Gamma)^2}{4}|^2}. \quad (3-23)$$

Donde $\tau(E)$ representa la probabilidad de trasmisión a través de una nanocinta de grafeno tipo brazo de silla, cuya longitud es de dos anillos. G_{44} y G_{14} son las funciones de Green, las cuales van desde el sitio 1 hasta el sitio 4.

3.1.1.1. Cálculo de las funciones de Green G_{44} y G_{14}

Para el cálculo de estas funciones se parte de la Figura 3-3 que corresponde a la decimación de una nanocinta de grafeno tipo brazo de silla de dos anillos. Aplicando la ecuación de Dyson (2-90) a este sistema obtenemos lo siguiente.

$$G_{14} = g_1 \omega G_{24}, \quad (3-24)$$

$$G_{24} = g_1 \beta G_{34} + g_1 \omega G_{14}, \quad (3-25)$$

$$G_{34} = g_1 \beta G_{24} + g_1 \omega G_{44}, \quad (3-26)$$

$$G_{44} = g_1 + g_1 \omega G_{34}. \quad (3-27)$$

El sistema de ecuaciones obtenido se puede escribir de forma matricial con el fin de facilitar su solución y encontrar las funciones de Green G_{14} y G_{44}

$$\begin{pmatrix} G_{14} \\ G_{24} \\ G_{34} \\ G_{44} \end{pmatrix} \begin{bmatrix} 1 & -g_1 \omega & 0 & 0 \\ -g_1 \omega & 1 & -g_1 \beta & 0 \\ 0 & -g_1 \beta & 1 & -g_1 \omega \\ 0 & 0 & -g_1 \omega & 1 \end{bmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ g_1 \end{pmatrix} \quad (3-28)$$

Para encontrar las funciones de Green G_{14} y G_{44} se sigue un procedimiento análogo a [27] y [16] encontrando que.

$$G_{14} = \frac{g_1^4 \omega^2 \beta^2}{1 - 2g_1^2 \omega^2 - g_1^2 \beta^2 + g_1^4 \omega^4}, \quad (3-29)$$

$$G_{44} = \frac{g_1(1 - g_1^2 \beta^2 - g_1^2 \omega^2)}{1 - 2g_1^2 \omega^2 - g_1^2 \beta^2 + g_1^4 \omega^4}. \quad (3-30)$$

Finalmente, luego de reemplazar (3-28) y (3-29) en (3-23), se obtiene la probabilidad de trasmisión para una nanocinta de grafeno compuesta de dos anillos con energías de acople

de $\Gamma = 1eV$ y $V = 1eV$. A continuación, se muestran los resultados obtenidos para la probabilidad de transmisión en nanocintas cuyas longitudes son de dos, cuatro y siete anillos.

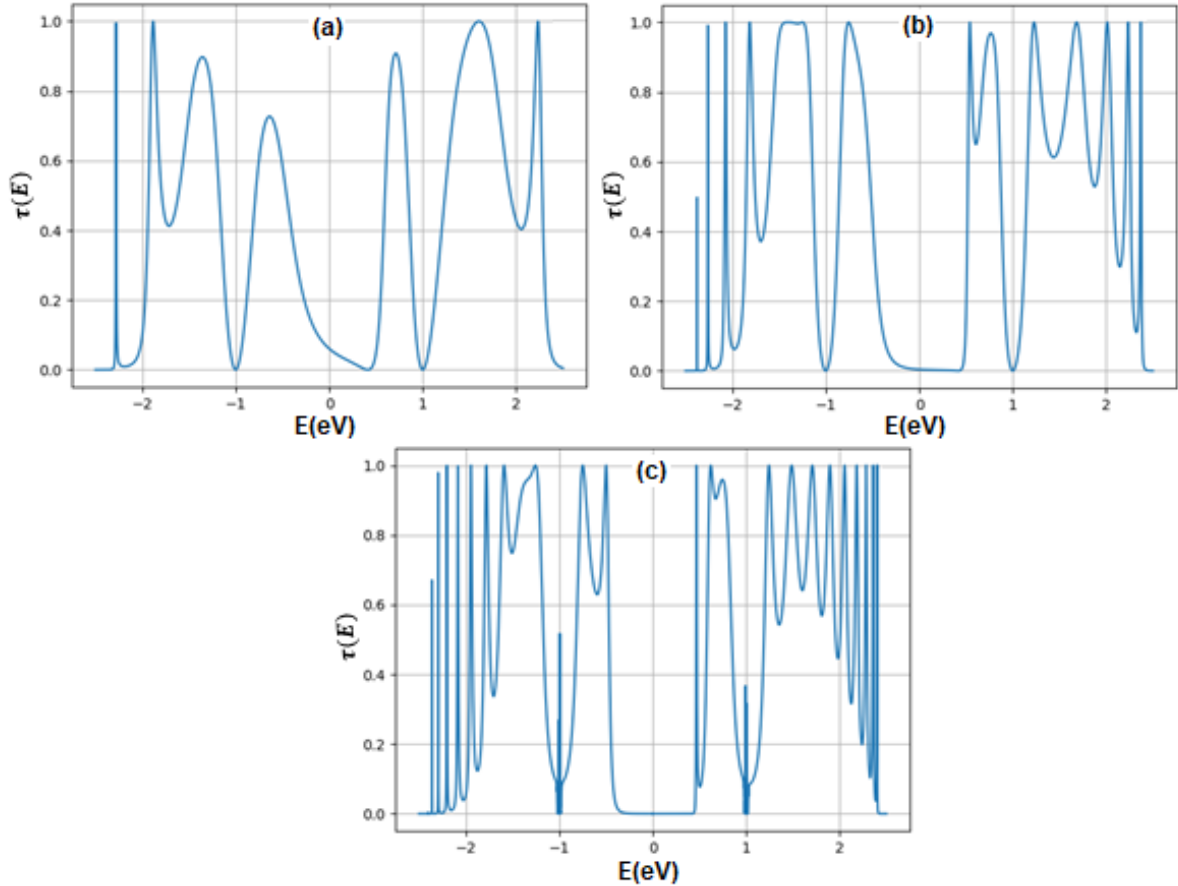


Figura 3-4.: Resultados de la probabilidad de transmisión en nanocintas de grafeno tipo brazo de silla para diferentes longitudes de anillos (a) dos, (b) cuatro y (c) siete anillos, con energías de acople de $1eV$.

Al variar la longitud de las nanocintas de grafeno tipo brazo de silla se encuentran cambios significativos en la probabilidad de transmisión de los electrones. Se observa la presencia de cuatro bandas de energía, las cuales se encuentran entre los rangos de energía de -2 , -1 , -1 , -0.4 , 0.4 , 1 y 1 , 2 eV para las tres diferentes longitudes analizadas. Al aumentar la longitud de las nanocintas se aprecia un incremento gradual en la probabilidad de transmisión para las bandas de energía, Esto sugiere la posibilidad de que para longitudes de 4 y 7 anillos, los electrones puedan potencialmente adquirir mayor libertad de movimiento a través de la nanocinta en rangos de energía que varían desde el intervalo de -2 , -0.4 hasta el intervalo de 0.4 , 2 eV. Este aumento de movilidad de los electrones indica mayor probabilidad de transporte electrónico en las regiones energéticas especificadas. Sin embargo, se identifica una brecha energética entre -0.8 y 0.8 eV, donde la probabilidad de transmisión es nula para todas las longitudes analizadas. Esta brecha energética sugiere que los electrones carecen

de energía suficiente para atravesar la nanocinta en este rango de energía, de ahí que la probabilidad de transmisión sea cero. Es interesante destacar que esta brecha disminuye en energía para una nanocinta con una longitud de dos anillos, lo que implica que cuanto mayor es la longitud de la nanocinta, mayor es la resistencia al paso de los electrones, lo que podría llevar a la reflexión o absorción de estos por parte de la nanocinta. Por otro parte, se puede evidenciar que no todos los picos son iguales, esto podría obedecer a efectos numéricos, los cuales pueden ser controlados al variar el paso haciéndolo mucho más fino.

3.1.1.2. Variación de los parámetros de acoplamiento Γ y V para una nanocinta de grafeno tipo brazo de silla de 7 anillos de longitud

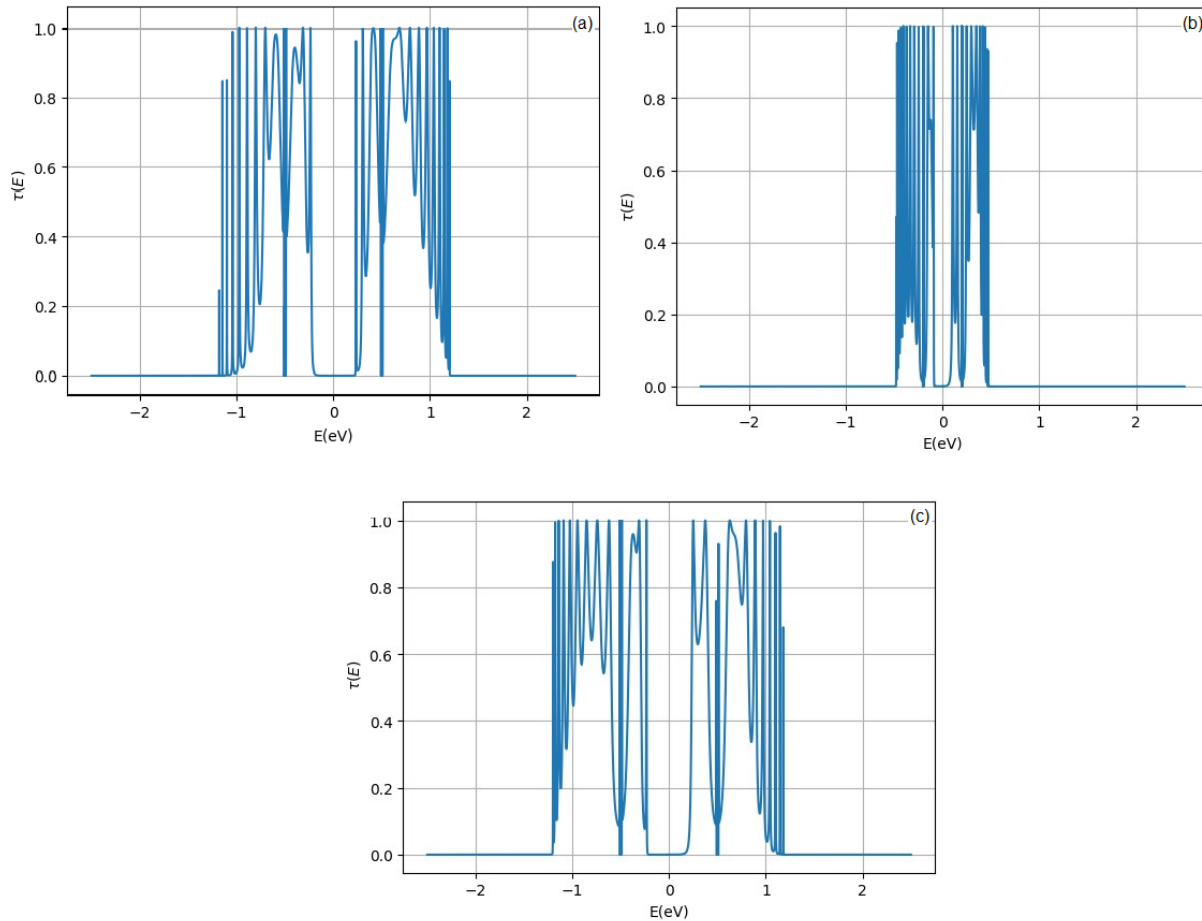


Figura 3-5.: Resultados al variar los parámetros de acoplamiento Γ y V para una nanocinta de grafeno tipo brazo de silla con siete anillos de longitud. (a) $\Gamma = -0,2eV$, $V = 0,5eV$, (b) $\Gamma = 0,5eV$, $V = -0,2eV$ y (c) $\Gamma = -0,5eV$, $V = -0,5eV$

Al reducir los parámetros de acoplamiento en una nanocinta de grafeno tipo brazo de silla compuesta por siete anillos de longitud, emergen patrones fascinantes y significativos. Al

disminuir la energía de acoplamiento, se observa una notable disminución en gap cerca del nivel de la energía de Fermi, lo que resulta en una reducción significativa de la separación entre las bandas de energía. Esta modificación conlleva a que las bandas de energía se vuelvan más estrechas.

3.1.2. Variación del ancho

Para comprender como varia el ancho en una nanocinta de grafeno tipo brazo de silla, usaremos una nanocinta de tres anillos longitud y un ancho de dos anillos, como se muestra en la figura 3-5. Posteriormente se incrementara el número de anillos verticalmente con la finalidad de variar el ancho y mantener su longitud fija.

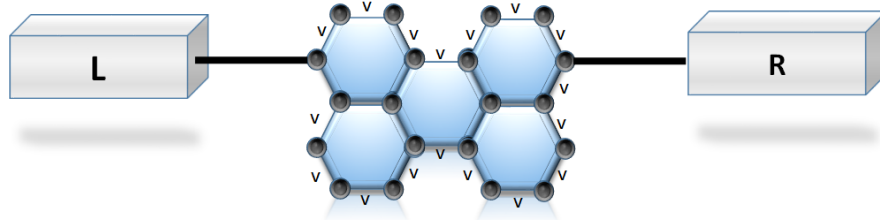


Figura 3-6.: Nanocinta de grafeno tipo brazo de silla con un ancho de dos anillos, largo de tres anillos y energías de acople V .

Se comienza haciendo la decimación de la nanocinta, para esto renombraremos los sitios tal como se hizo en la sección 3-1 quedando de la siguiente forma.

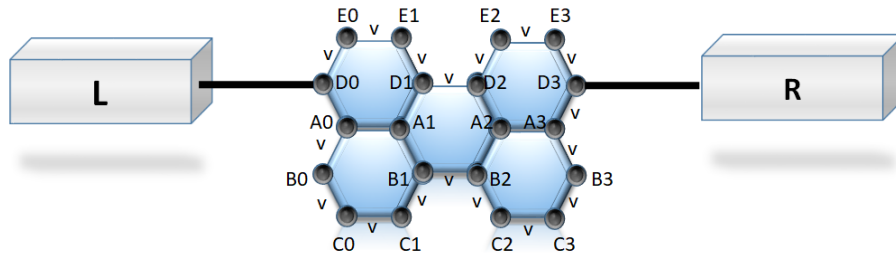


Figura 3-7.: Nanocinta de grafeno con los sitios renombrados.

Nuevamente, realizando un proceso análogo al de la sección 3-1 se obtienen las funciones G_{00}^B , G_{11}^B , G_{22}^B , G_{33}^B , G_{00}^D , G_{11}^D , G_{22}^D Y G_{33}^D .

$$G_{00}^B = g_1 + g_1 V_1 G_{01}^B + g_1 V_3 G_{00}^D, \quad (3-31)$$

$$G_{11}^B = g_1 + g_1 V_1 G_{10}^B + g_1 V_3 G_{11}^D + g_1 V_2 G_{12}^B, \quad (3-32)$$

$$G_{22}^B = g_1 + g_1 V_2 G_{21}^B + g_1 V_1 G_{23}^B + g_1 V_3 G_{22}^D, \quad (3-33)$$

$$G_{33}^B = g_1 + g_1 V_1 G_{32}^B + g_1 V_3 G_{33}^D, \quad (3-34)$$

$$G_{00}^D = g_1 + g_1 V_1 G_{01}^D + g_1 V_3 G_{00}^B, \quad (3-35)$$

$$G_{11}^D = g_1 + g_1 V_1 G_{10}^D + g_1 V_3 G_{11}^B + g_1 V_2 G_{12}^D, \quad (3-36)$$

$$G_{22}^D = g_1 + g_1 V_2 G_{21}^D + g_1 V_1 G_{23}^D + g_1 V_3 G_{22}^B, \quad (3-37)$$

$$G_{33}^D = g_1 + g_1 V_1 G_{32}^D + g_1 V_3 G_{33}^B, \quad (3-38)$$

donde g_1 es la nueva función de Green, V_1 , V_2 y V_3 son las nuevas energías de acople entre los nuevos sitios, sus expresiones correspondientes son:

$$g_1 = \frac{g_0 - g_0^3 V^2 + 2g_0^2 V}{1 - 3g_0^2 V^2}, \quad (3-39)$$

$$V_1 = \frac{2g_0^3 V^3}{g_0 - g_0^3 V^2 + 2g_0^2 V}, \quad (3-40)$$

$$V_2 = \frac{g_0 V - g_0^3 V^3}{g_0 - g_0^3 V^2 + 2g_0^2 V}, \quad (3-41)$$

$$V_3 = \frac{g_0^2 V^2}{g_0 - g_0^3 V^2 + 2g_0^2 V}, \quad (3-42)$$

realizada la primer decimación del sistema se obtiene la estructura de la figura 3-7.

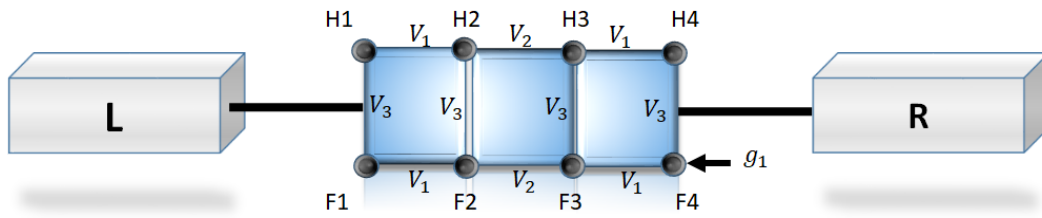


Figura 3-8.: Primera decimación de la nanocinta de grafeno tipo brazo de silla con sitios renombrados, sus nuevas energías de acople V_1 , V_2 , V_3 y su nueva función de Green g_1 .

Decimamos el sistema obtenido para encontrar las funciones G_{11}^H , G_{22}^H , G_{33}^H y G_{44}^H siguiendo el mismo proceso con el fin de obtener una cadena lineal.

$$G_{11}^H = g_2 + g_2 V_4 G_{12}^H, \quad (3-43)$$

$$G_{22}^H = g_2 + g_2 V_4 G_{21}^H + g_2 V_5 G_{23}^H, \quad (3-44)$$

$$G_{33}^H = g_2 + g_2 V_4 G_{34}^H + g_2 V_5 G_{32}^H, \quad (3-45)$$

$$G_{44}^H = g_2 + g_2 V_4 G_{43}^H, \quad (3-46)$$

donde

$$g_2 = \frac{g_1 + g_1^2 V_3}{1 - g_1^2 V_3^2}, \quad (3-47)$$

$$V_4 = \frac{g_1 V_1}{g_1 + g_1^2 V_3}, \quad (3-48)$$

$$V_5 = \frac{g_1 V_2}{g_1 + g_1^2 V_3}, \quad (3-49)$$

Finalmente tenemos nuestro sistema decimado representado en la figura 3-8 con nuevas energías de acople V_4 , V_5 y función de Green g_2 .

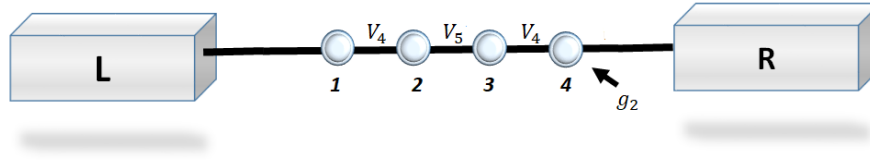


Figura 3-9.: Nanocinta decimada con nuevas energías efectivas de acople V_4 , V_5 y función de Green g_2 .

El proceso de decimación detallado puede consultarse en el anexo B. Por cada anillo agregado verticalmente saldrá una nueva función de Green y dos nuevos acoples. En otras palabras, si colocamos un anillo más tendremos una función de Green g_3 y acoples V_6 y V_7 .

Ahora, calculamos las funciones de Green G_{44} y G_{14} para encontrar la probabilidad de trasmisión, para esto seguiremos el proceso hecho en la sección 3,2 obteniendo.

$$G_{14} = \frac{V_4^2 V_5 g_2^4}{V_4^4 g_2^4 - 2V_4^2 g_2^2 - V_5^2 g_2^2 + 1}, \quad (3-50)$$

$$G_{44} = \frac{g_2(-V_4^2 g_2^2 - V_5^2 g_2^2 + 1)}{V_4^4 g_2^4 - 2V_4^2 g_2^2 - V_5^2 g_2^2 + 1}. \quad (3-51)$$

Al remplazar estas funciones en (3-23) encontramos la probabilidad de trasmisión para nuestra nanocinta de dos anillos de ancho. A continuación, se observan los resultados para anchos de 2, 7 y 11 anillos en la figura 3-9.

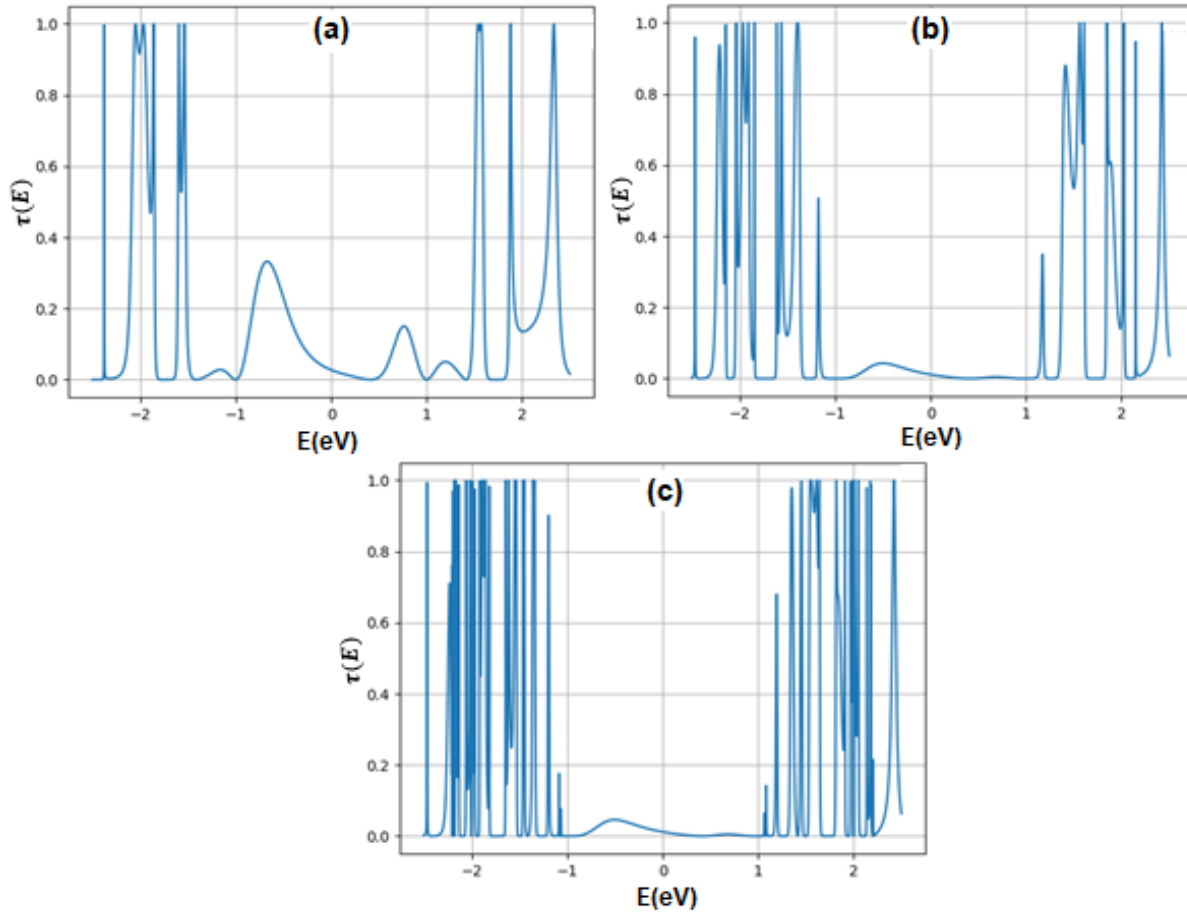


Figura 3-10.: Resultados de la probabilidad de transmisión en nanocintas de grafeno tipo brazo de silla para diferentes anchos de anillos (a) dos, (b) siete y (c) 11 anillos, con energías de acople de 1eV.

Al variar el ancho de las nanocintas de grafeno tipo brazo de silla. Se observan intervalos de alta probabilidad de transmisión para niveles de energía que abarcan desde el intervalo de -2.5, -1 eV hasta el intervalo 1, 2.5 eV en las nanocintas de 7 y 11 anillos. En estos rangos, podría haber un eficiente paso de electrones a través de las nanocintas, lo que podría sugerir la existencia de una movilidad significativa de electrones en esas regiones. Por otro lado, se observa una disminución en la probabilidad de transmisión en el rango de energía entre 0 y 1 eV en las nanocintas de 7 y 11 anillos. Esta disminución indica la presencia de una brecha energética que persiste de manera constante en las nanocintas más anchas, generando una probabilidad de transmisión de cero en ese rango energético específico. Sin embargo, en la nanocinta de dos anillos de ancho, se muestra una probabilidad de transmisión baja en este rango energético, la cual disminuye a medida que se incrementa el ancho de la nanocinta. También se pueden observar efectos del tamaño. A medida que aumenta el ancho de la nanocinta, se observa la transición de niveles de energía a la formación de bandas de energía.

Además, se aprecia una marcada diferencia entre los picos de probabilidad, posiblemente atribuibles a efectos numéricos del paso utilizado en la programación.

3.1.2.1. Variación de los parámetros de acoplamiento Γ y V para una nanocinta de grafeno tipo brazo de silla de 11 anillos de ancho

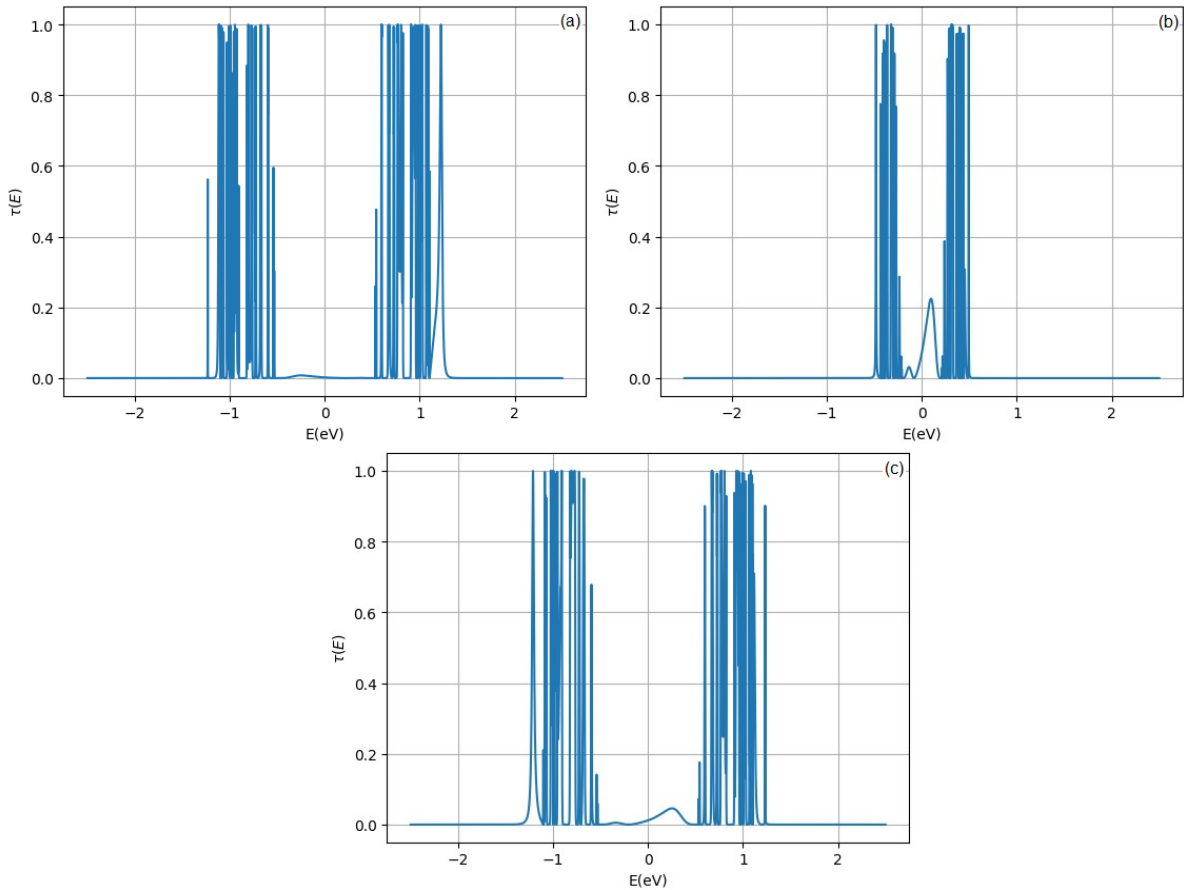


Figura 3-11.: Resultados al variar los parámetros de acoplamiento Γ y V para una nanocinta de grafeno tipo brazo de silla con 11 anillos de ancho. (a) $\Gamma = -0,2eV$, $V = 0,5eV$, (b) $\Gamma = 0,5eV$, $V = -0,2eV$ y (c) $\Gamma = -0,5eV$, $V = -0,5eV$

Al modificar las energías de acoplamiento en las nanocintas de grafeno tipo brazo de silla, compuestas por 11 anillos de ancho, se evidencia la aparición de dos niveles de energía cercanos a cero, lo que resulta en una brecha central prácticamente nula. Cabe señalar que esta observación podría deberse a posibles errores numéricos. Adicionalmente, se nota una reducción en el tamaño de las bandas de energía a medida que disminuyen los parámetros de acople.

3.2. Nanocinta de grafeno tipo Zig-Zag

3.2.1. Variación de su longitud

Para este sistema mantendremos fijo el ancho (1 anillo) de la nanocinta y variaremos su longitud agregando anillos, el Hamiltoniano correspondiente para nuestra nanocinta tipo zig-zag (ver figura 3-12) es el mismo del anterior sistema.

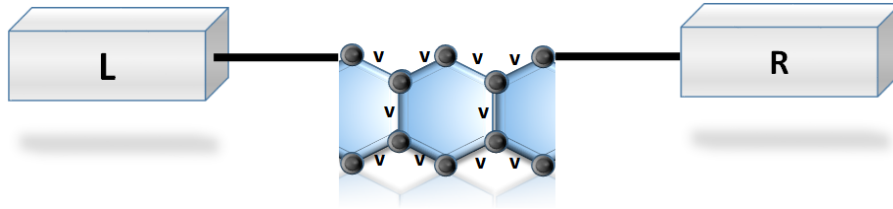


Figura 3-12.: Nanocinta de grafeno tipo zig-zag con un ancho de un anillo y dos anillos de longitud.

Para decimar este sistema se hace necesario hacer una doble decimación con el fin de llevarlo a una forma lineal, para esto usaremos un procedimiento análogo al que usamos para decimar la nanocinta tipo brazo de silla obteniendo los siguientes resultados en la primera decimación.

$$G_{22}^A = g_5 + g_5\tau G_{24}^A + g_5V G_{22}^B, \quad (3-52)$$

$$G_{22}^B = g_5 + g_5\tau G_{24}^B + g_5V G_{22}^A, \quad (3-53)$$

$$G_{44}^A = g_5 + g_5\tau G_{42}^A + g_5V G_{44}^B, \quad (3-54)$$

$$G_{44}^B = g_5 + g_5\tau G_{42}^B + g_5V G_{44}^A, \quad (3-55)$$

donde:

$$g_5 = \frac{g_0}{1 - 2g_0^2V^2}, \quad (3-56)$$

$$\tau = g_0V^2, \quad (3-57)$$

esta primera decimación reduce el sistema de la siguiente forma.

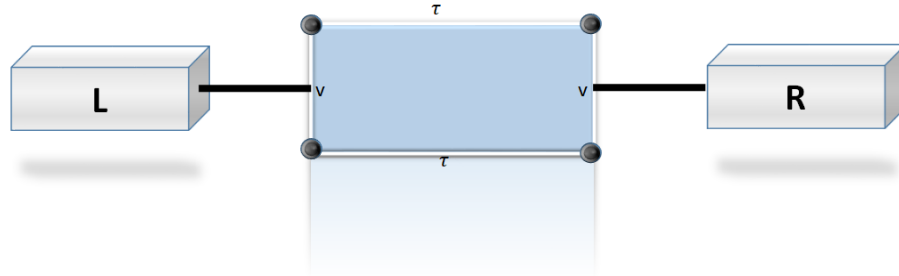


Figura 3-13.: Nanocinta de grafeno tipo zig-zag en su primera decimación, con nuevo acople τ y la función de Green g_5 .

Efectuando la segunda decimación del sistema se obtienen las siguientes expresiones:

$$G_{11}^C = g_6 + g_6 \tau_2 G_{12}^C, \quad (3-58)$$

$$G_{22}^C = g_6 + g_6 \tau_2 G_{21}^C, \quad (3-59)$$

con:

$$g_6 = \frac{g_5 + g_5^2 V}{1 - g_5^2 V^2}, \quad (3-60)$$

$$\tau_2 = \frac{g_5 \tau}{g_5 + g_5^2 V}, \quad (3-61)$$

Finalmente nuestro sistema lineal queda como se muestra en la figura (3-12)

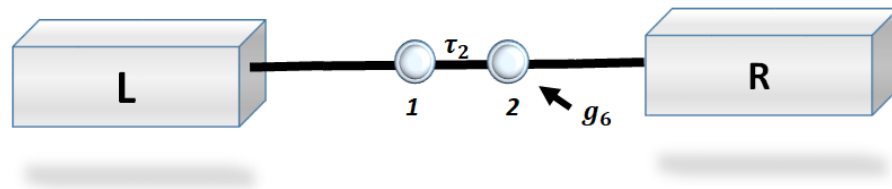


Figura 3-14.: Nanocinta de grafeno tipo zig-zag decimada con energía de acople τ y función de Green g_6 .

En el anexo C se presenta con detalle el procedimiento de decimación realizado. Para las funciones G_{12} y G_{22} considerando los procedimientos seguidos en la subsección (3.1.2) tenemos que

$$G_{12} = \frac{g_6^2 \tau_2}{1 - g_6^2 \tau_2^2}, \quad (3-62)$$

$$G_{22} = \frac{g_6^2}{1 - g_6^2 \tau_2^2}. \quad (3-63)$$

Reemplazando (3-62) y (3-63) en (2-104) encontramos la probabilidad de transmisión para una nanocinta de grafeno tipo zig-zag. Teniendo en cuenta lo anterior, los resultados para nanocintas con longitudes de 2, 4 y 6 anillos se muestran en la figura 3-15.

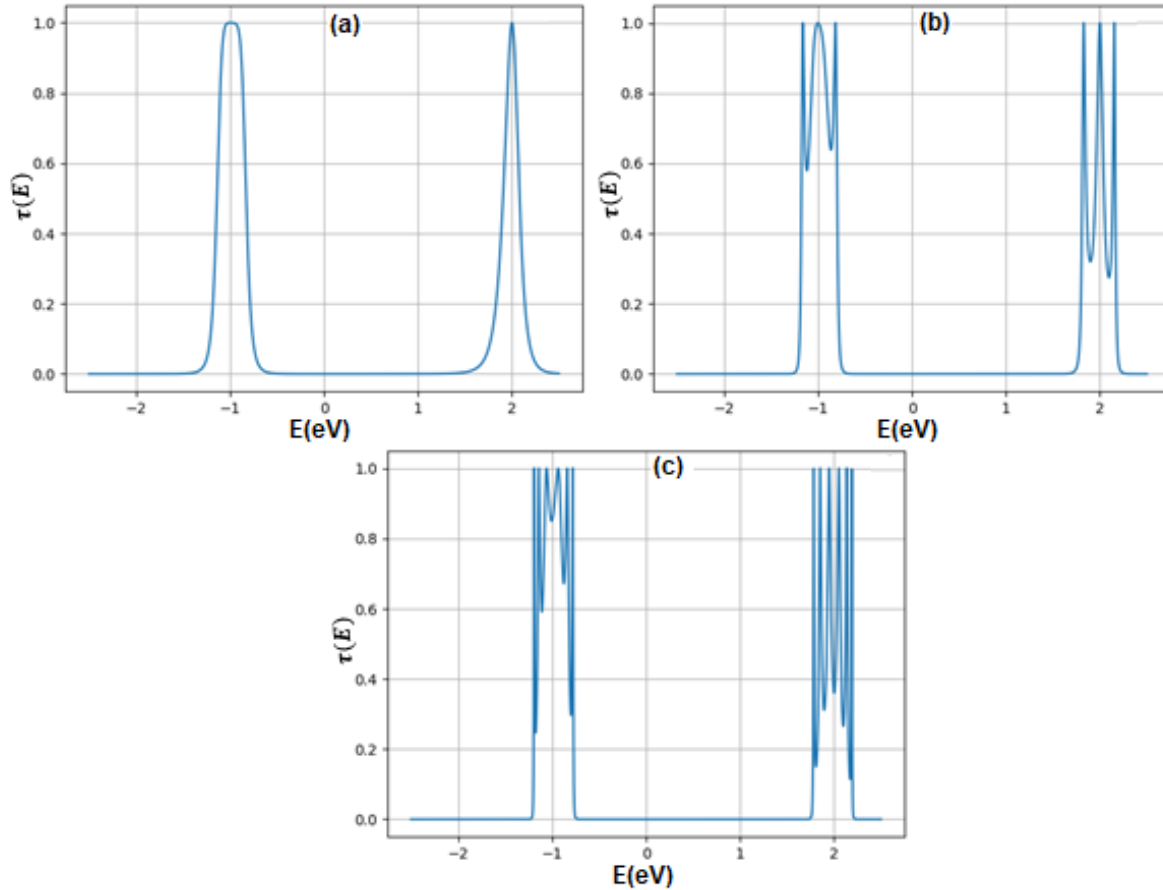


Figura 3-15.: Resultados de la probabilidad de transmisión en nanocintas de grafeno tipo Zig-Zag para diferentes longitudes de anillos (a) dos, (b) cuatro y (c) seis anillos, con energías de acople de 1eV.

Para la nanocinta de grafeno tipo zig-zag también se obtienen patrones significativos en sus niveles de energía al variar su longitud. Al analizar longitudes de dos, cuatro y seis anillos se identifican dos bandas de energía que se extienden entre niveles aproximados del intervalo -1.7, -0.8 y el intervalo de 1.8, 2.2 eV. En estas bandas, se observa una alta probabilidad de transmisión, lo que sugiere que los electrones pueden atravesar la nanocinta sin ser notablemente afectados. Estas áreas permiten un flujo libre de electrones a través de la nanocinta. Sin embargo, se detectan brechas energéticas en los niveles de -1.7, 1.8 eV, y entre -2.5, -1.7, y 2.2, 2.5 eV. Estas brechas indican una probabilidad nula de transmisión de electrones a

través de la nanocinta para esos rangos específicos de energía. Estas brechas impiden la movilidad de los electrones, generando barreras que evitan su paso a través del material en esas regiones. Es relevante observar cómo, al incrementar la longitud, los niveles de energía persisten y los picos de probabilidad varían para nanocintas con más de dos anillos de longitud. Estos cambios se vuelven cada vez más notorios a medida que la longitud aumenta.

3.2.1.1. Variación de los parámetros de acoplamiento Γ y V para una nanocinta de grafeno tipo zig-zag de 6 anillos de longitud

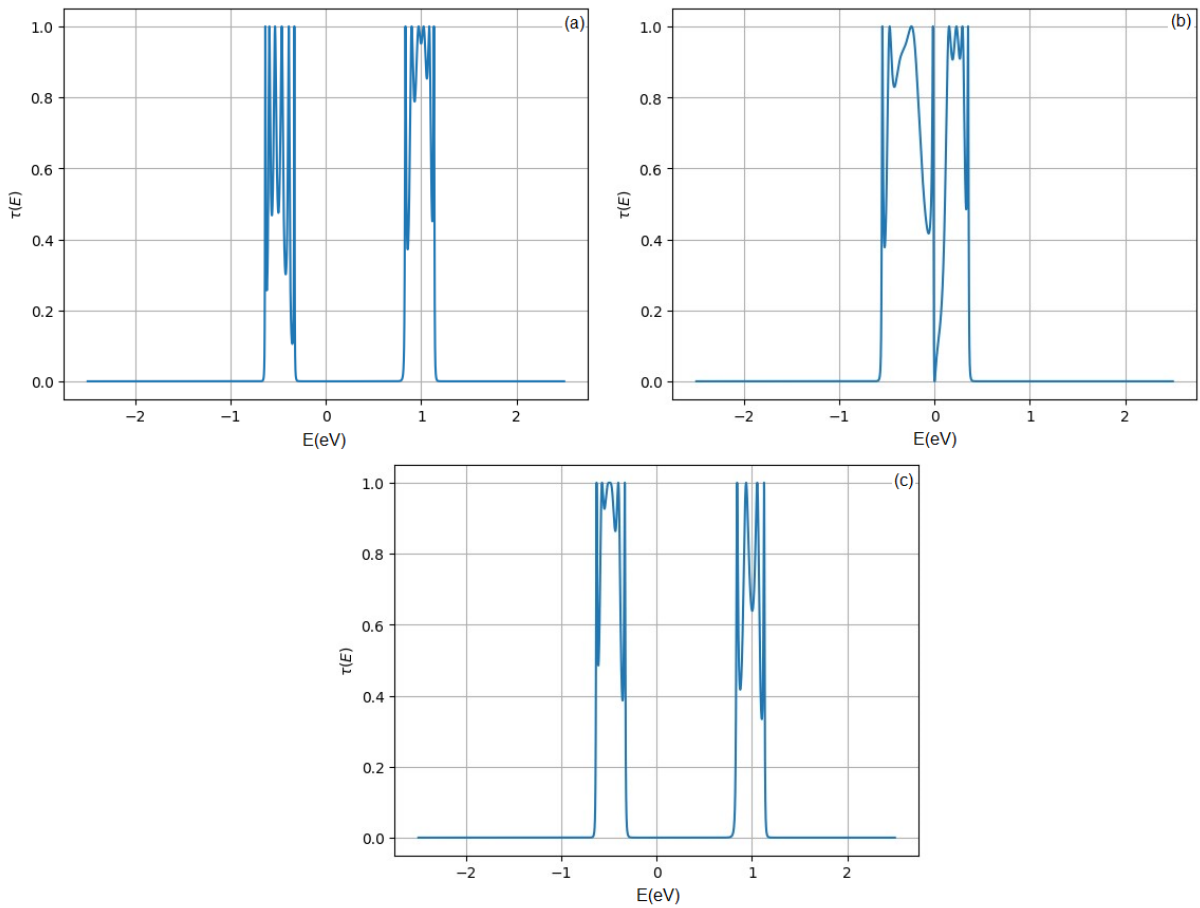


Figura 3-16.: Resultados al variar los parámetros de acoplamiento Γ y V para una nanocinta de grafeno tipo zig.zag con seis anillos de longitud. (a) $\Gamma = -0,2eV$, $V = 0,5eV$, (b) $\Gamma = 0,5eV$, $V = -0,2eV$ y (c) $\Gamma = -0,5eV$, $V = -0,5eV$

Ajustar los parámetros de acople de energía en una nanocinta de grafeno tipo zig-zag con una longitud de seis anillos revela patrones distintivos. Al disminuir la energía de acoplamiento, se observa una significativa reducción en la brecha entre las dos bandas de energía, lo que provoca una proximidad notoria entre ambas. Además, este ajuste conlleva al ensanchamiento de una de las bandas de energía.

3.2.1.2. Variación de los parámetros de acoplamiento Γ y V para una nanocinta tipo zig-zag de seis anillos de longitud

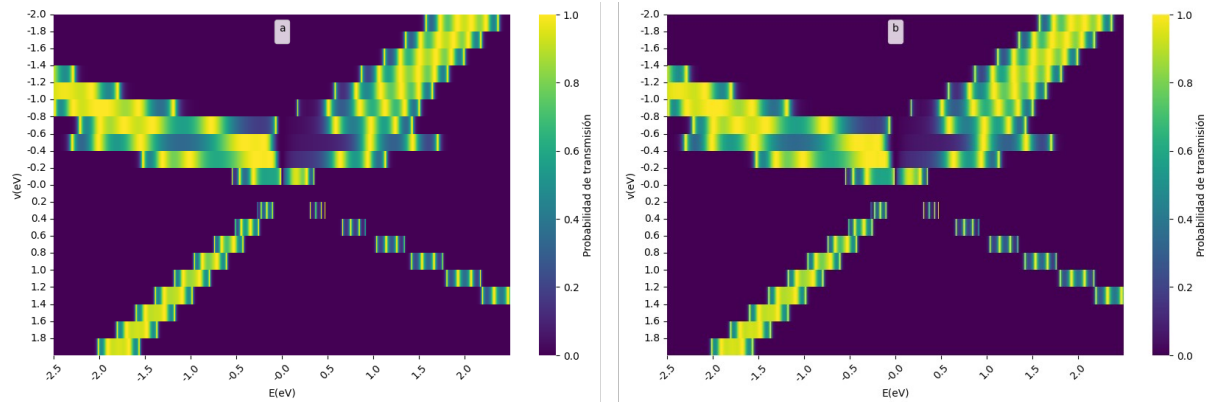


Figura 3-17.: Variación la energía de acople v , manteniendo constante la energía Γ (a) $\Gamma = 1$ eV y V varia en el rango de -2 a 2 eV (b) $\Gamma = -1$ y V varia entre -2 y 2 .

Al variar la energía de acople V mientras se mantiene constante la energía de acople (Γ) entre el contacto y el sistema. Se observa que, a medida que la energía de acople efectiva aumenta para valores positivos, las bandas experimentan una disminución en su anchura, mientras que el gap central entre ellas aumenta. Sin embargo, se identifica un punto en el cual la energía de acoplamiento correspondiente a 1.2 eV genera un gap tan extenso que una de las bandas se encuentra fuera de la ventana de interés, que se define entre -2.5 eV y 2.5 eV. La expansión de esta ventana vuelve a revelar la persistencia de dos bandas, destacando la influencia crucial de la energía de acoplamiento. Es relevante señalar que, al disminuir el ancho de la banda para valores de acoplamiento de alrededor de 0.2 eV, se observa una transición en el comportamiento de la banda hacia la formación de niveles de energía. La disminución en el ancho de la banda conlleva a una limitación de la libertad de movimiento de los electrones, los cuales, en lugar de ocupar la banda de manera uniforme, experimentan una mayor probabilidad de concentrarse en sitios específicos de la nano cinta, dando origen a niveles de energía localizados.

En el caso de energías de acoplamiento negativas, se evidencia que a medida que esta magnitud aumenta, el gap central disminuye y emerge una segunda banda de energía dentro de la zona de interés definida. Conforme la energía efectiva de acople aumenta, estas bandas adicionales se vuelven más anchas, llevando a una reducción gradual del gap central hasta aproximarse a la nulidad.

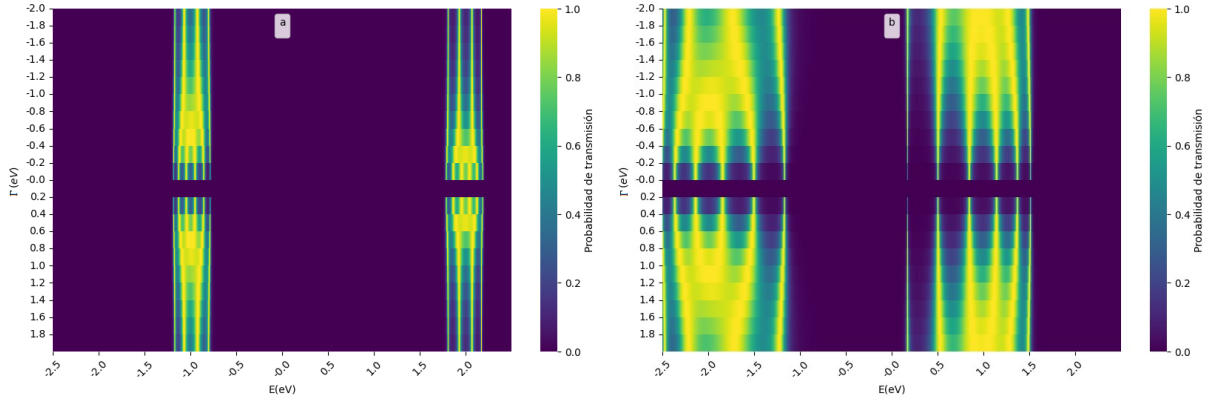


Figura 3-18.: Variación la energía de acople Γ , manteniendo constante la energía V (a) $V = 1$ eV y Γ varia en el rango de -2 a 2 eV (b) $v=-1$ y Γ varia entre -2 y 2 .

Al variar la energía de acoplamiento (Γ) entre los contactos y el sistema, mientras se mantiene constante la energía de acople V , tal como se muestra en las gráficas a y b, se destaca la influencia de la energía efectiva de acople v en la amplitud de las bandas. Se evidencia que, para valores positivos de v , las bandas exhiben una estrechez, mientras que, para valores negativos, su amplitud aumenta. Es importante notar que, durante este proceso, el gap central entre las bandas permanece constante. No obstante, se observa que el incremento en la energía Γ para valores positivos puede tener un impacto significativo en la dispersión de los electrones en la nanocinta. A medida que esta energía aumenta, se observa la posibilidad de una redistribución en la densidad de estados electrónicos. Este fenómeno conlleva a la formación de niveles de energía localizados, manteniendo constante el ancho de las bandas. Este resultado sugiere que la energía de acoplamiento puede modular no solo la amplitud sino también la distribución espacial de la densidad electrónica. Contrastando esta observación, al aumentar la energía Γ para valores negativos, se percibe un fenómeno opuesto. En este escenario, los niveles de energía tienden a desvanecerse, dando lugar a la formación más prominente de bandas de energía. Este comportamiento sugiere una respuesta asimétrica a las variaciones en la energía de acoplamiento, donde valores positivos favorecen la formación de niveles localizados, mientras que valores negativos promueven la configuración de bandas de energía más extensas.

3.2.2. Variación del ancho

En las nanocintas de grafeno tipo zig-zag, al momento de variar el ancho es necesario realizar múltiples decimaciones de acuerdo con la cantidad de anillos verticales que se tenga. A continuación, veremos la decimación para una nanocinta de longitud 3 anillos constante y ancho de 3 anillos, tal como lo muestra la figura (3-14)

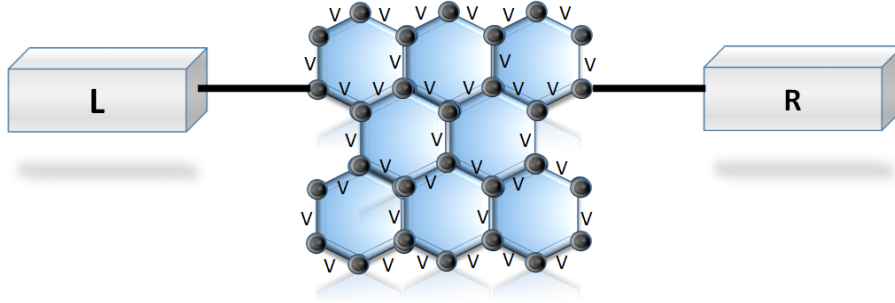


Figura 3-19.: Nanocinta de grafeno tipo zig-zag con acoples V, longitud y ancho de 3 anillos.

Renombramos los sitios tal como lo hicimos en las sesiones anteriores y realizamos la primera decimación del sistema, ver figura (3-15), se encuentra que los sitios G_{11}^A , G_{33}^A , G_{55}^A , G_{11}^B , G_{33}^B , G_{55}^B , G_{11}^C , G_{33}^C , G_{55}^C , G_{11}^D , G_{33}^D Y G_{55}^D , están dados por.

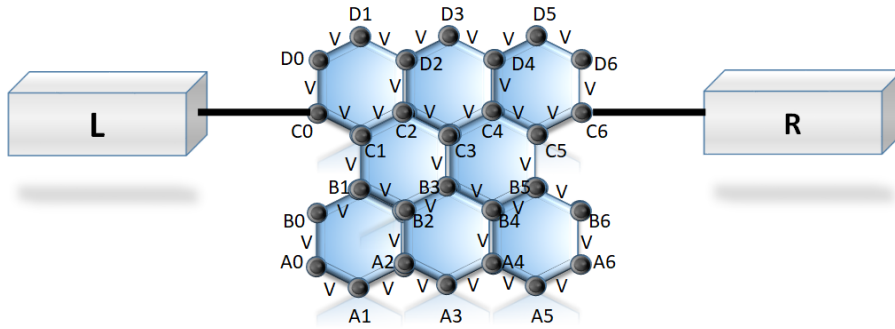


Figura 3-20.: Nanocinta de grafeno tipo zig-zag con sitios renombrados y energías efectivas V.

$$G_{11}^A = g_{10} + g_{10}\omega_1 G_{11}^B + g_{10}\omega_2 G_{13}^A, \quad (3-64)$$

$$G_{33}^A = g_{10} + g_{10}\omega_2 G_{31}^A + g_{10}\omega_2 G_{35}^A + g_{10}\omega_1 G_{33}^B, \quad (3-65)$$

$$G_{55}^A = g_{10} + g_{10}\omega_1 G_{55}^B + g_{10}\omega_2 G_{53}^B, \quad (3-66)$$

$$G_{11}^B = g_{10} + g_{10}\omega_1 G_{11}^A + g_{10}\omega_2 G_{13}^B + g_{10}\omega_3 G_{11}^C, \quad (3-67)$$

$$G_{33}^B = g_{10} + g_{10}\omega_2 G_{31}^B + g_{10}\omega_2 G_{35}^B + g_{10}\omega_1 G_{33}^A + g_{10}\omega_3 G_{33}^C, \quad (3-68)$$

$$G_{55}^B = g_{10} + g_{10}\omega_1 G_{55}^A + g_{10}\omega_2 G_{53}^B, \quad (3-69)$$

$$G_{11}^C = g_{10} + g_{10}\omega_1 G_{11}^D + g_{10}\omega_2 G_{13}^C + g_{10}\omega_3 G_{11}^D, \quad (3-70)$$

$$G_{33}^C = g_{10} + g_{10}\omega_2 G_{31}^C + g_{10}\omega_2 G_{35}^C + g_{10}\omega_1 G_{33}^D + g_{10}\omega_3 G_{33}^B, \quad (3-71)$$

$$G_{55}^C = g_{10} + g_{10}\omega_1 G_{55}^D + g_{10}\omega_2 G_{53}^C, \quad (3-72)$$

$$G_{11}^D = g_{10} + g_{10}\omega_1 G_{11}^C + g_{10}\omega_2 G_{13}^D, \quad (3-73)$$

$$G_{33}^D = g_{10} + g_{10}\omega_2 G_{31}^D + g_{10}\omega_2 G_{35}^D + g_{10}\omega_1 G_{33}^C, \quad (3-74)$$

$$G_{55}^D = g_{10} + g_{10}\omega_1 G_{55}^C + g_{10}\omega_2 G_{53}^D, \quad (3-75)$$

de lo anterior se destaca que:

$$g_{10} = \frac{g_0 - g_0^3 V^2}{1 - 3g_0^2 V^2}, \quad (3-76)$$

$$\omega_1 = \frac{2g_0^3 V^3}{g_0 - g_0^3 V^2}, \quad (3-77)$$

$$\omega_2 = \frac{g_0^2 V^2}{g_0 - g_0^3 V^2}, \quad (3-78)$$

$$\omega_3 = \frac{g_0 V - g_0^3 V^3}{g_0 - g_0^3 V^2}. \quad (3-79)$$

Terminada la decimación, nuestro sistema toma la siguiente forma.

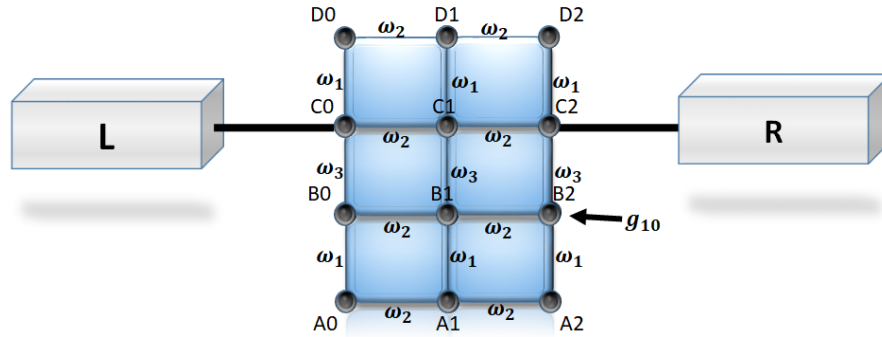


Figura 3-21.: primera decimación de la nanocinta de grafeno tipo zig-zag, sitios renombrados con nuevas energías de acople ω_1 , ω_2 , ω_3 y función de Green g_{10} .

Decimamos nuevamente encontrando que las nuevas funciones de los sitios B0, B1, B2, C0, C1 Y C2 están dadas por.

$$G_{00}^B = g_{11} + g_{11}\omega_5 G_{00}^C + g_{11}\omega_4 G_{01}^B, \quad (3-80)$$

$$G_{11}^B = g_{11} + g_{11}\omega_5 G_{11}^C + g_{11}\omega_4 G_{10}^B + g_{11}\omega_4 G_{12}^B, \quad (3-81)$$

$$G_{22}^B = g_{11} + g_{11}\omega_5 G_{22}^C + g_{11}\omega_4 G_{21}^B, \quad (3-82)$$

$$G_{00}^C = g_{11} + g_{11}\omega_5 G_{00}^B + g_{11}\omega_4 G_{01}^C, \quad (3-83)$$

$$G_{11}^C = g_{11} + g_{11}\omega_5 G_{11}^B + g_{11}\omega_4 G_{10}^C + g_{11}\omega_4 G_{12}^C, \quad (3-84)$$

$$G_{22}^C = g_{11} + g_{11}\omega_5 G_{22}^B + g_{11}\omega_4 G_{21}^C, \quad (3-85)$$

encontrando que

$$g_{11} = \frac{g_{10} + g_{10}^2 \omega_1}{1 - g_{10}^2 \omega_1^2}, \quad (3-86)$$

$$\omega_4 = \frac{g_{10}\omega_2}{g_{10} + g_{10}^2 \omega_1}, \quad (3-87)$$

$$\omega_5 = \frac{g_{10}\omega_3}{g_{10} + g_{10}^2 \omega_1}, \quad (3-88)$$

con esta segunda decimación nuestro sistema adquiere la siguiente forma.

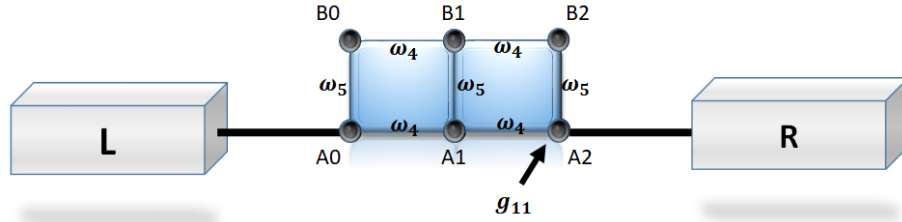


Figura 3-22.: segunda decimación de la nanocinta de grafeno tipo Zig - Zag, sitios renombrados con nuevas energías de acople ω_4 , ω_5 y función de Green g_{11} .

Para tener nuestro sistema totalmente lineal se necesita aplicar una tercera decimación en la cual las funciones de Green G_{00}^A , G_{11}^A y G_{22}^A para los sitios A0, A1 Y A2 son.

$$G_{00}^A = g_{12} + g_{12}\omega_6 G_{01}^A, \quad (3-89)$$

$$G_{11}^A = g_{12} + g_{12}\omega_6 G_{10}^A + g_{12}\omega_6 G_{12}^A, \quad (3-90)$$

$$G_{22}^A = g_{12} + g_{12}\omega_6 G_{21}^A, \quad (3-91)$$

donde.

$$g_{12} = \frac{g_{11} + g_{11}^2 \omega_5}{1 - g_{11}^2 \omega_5^2}, \quad (3-92)$$

$$\omega_6 = \frac{g_{11}\omega_4}{g_{11} + g_{11}^2 \omega_5}. \quad (3-93)$$

Finalmente tenemos nuestro sistema totalmente decimado, el cual adopta la siguiente forma.

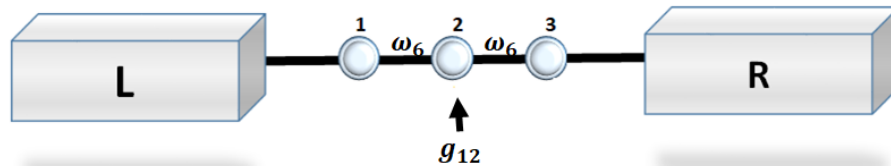


Figura 3-23.: Decimación final de la nanocinta de grafeno tipo zig-zag con nuevas energías efectivas de acople ω_6 y nueva función de Green g_{12} para cada sitio.

En el anexo D se presenta con detalle el procedimiento de decimación realizado. Por cada tira de anillos (de área 3×3) que se agregue verticalmente a la nanocinta saldrá una nueva función de Green y dos nuevos acoples. Ahora, se Calculan de las funciones de Green G_{33} y G_{13} para encontrar la probabilidad de trasmisión, para esto se sigue el procedimiento realizado en la sección 3,2 encontrando que.

$$G_{13} = \frac{g_{12}^3 \omega_6^2}{1 - 2g_{12}^2 \omega_6^2}, \quad (3-94)$$

$$G_{33} = \frac{g_{12} - g_{12}^3 \omega_6^2}{1 - 2g_{12}^2 \omega_6^2}, \quad (3-95)$$

Remplazando las ecuaciones (3-94) y (3-95) en (2-104) encontramos la probabilidad de trasmisión para la nanocinta de grafeno. A continuación, se muestran los resultados de la probabilidad de trasmisión para una nanocinta de 3, 6 y 10 anillos

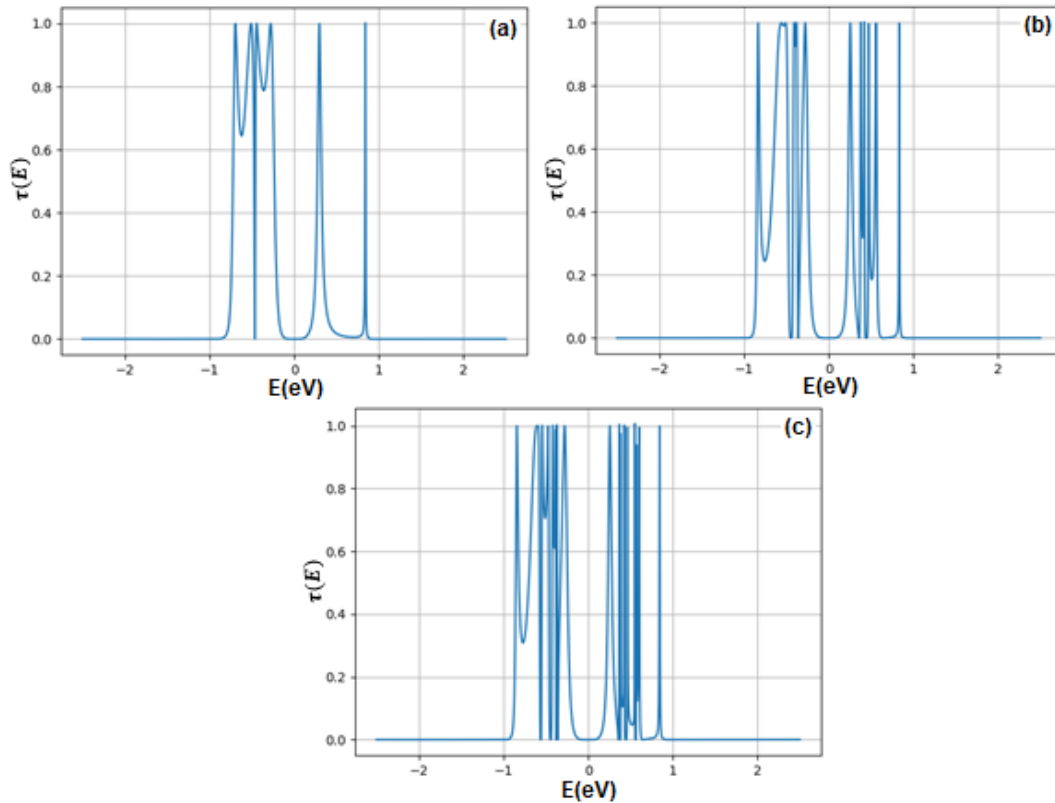


Figura 3-24.: Resultados de la probabilidad de trasmisión en nanocintas de grafeno tipo zig-zag para diferentes anchos de anillos (a) tres, (b) seis y (c) diez anillos, con energías de acople de 1eV.

Variar el ancho de las nanocintas de grafeno tipo zig-zag genera patrones significativos en sus niveles de energía. Se observan brechas energéticas notables en ciertos intervalos debido

a la probabilidad de transmisión nula para valores de energía que oscilan entre -2.5, -1.1, 1.1, y 2.5 eV. Estas brechas denotan una imposibilidad para la transmisión de electrones en esas regiones, sugiriendo que los electrones carecen de la energía necesaria para atravesar la nanocinta. Esto podría interpretarse como una alta probabilidad de absorción o reflexión de los electrones por parte de la nanocinta. Por otro lado, se identifican bandas de energía en intervalos que van desde -1.1, -0.8 hasta 0.8, 1.1 eV. En estas áreas, los electrones muestran una libertad de movimiento significativa, presentando una probabilidad del 100 % para atravesar la nanocinta. Esta facilidad de paso indica una ausencia de barreras energéticas considerables, permitiendo un flujo libre de electrones a través del material. En cuanto a los niveles de energía cercanos a -0.9 y 0.9 eV, se observa la presencia de una brecha, la cual resulta en una probabilidad de transmisión nula. Esta brecha evidencia una barrera energética que impide la movilidad de los electrones a través de la nanocinta en esos rangos específicos de energía.

3.2.2.1. Variación de los parámetros de acoplamiento Γ y V para una nanocinta de grafeno tipo zig-zag de diez anillos de ancho

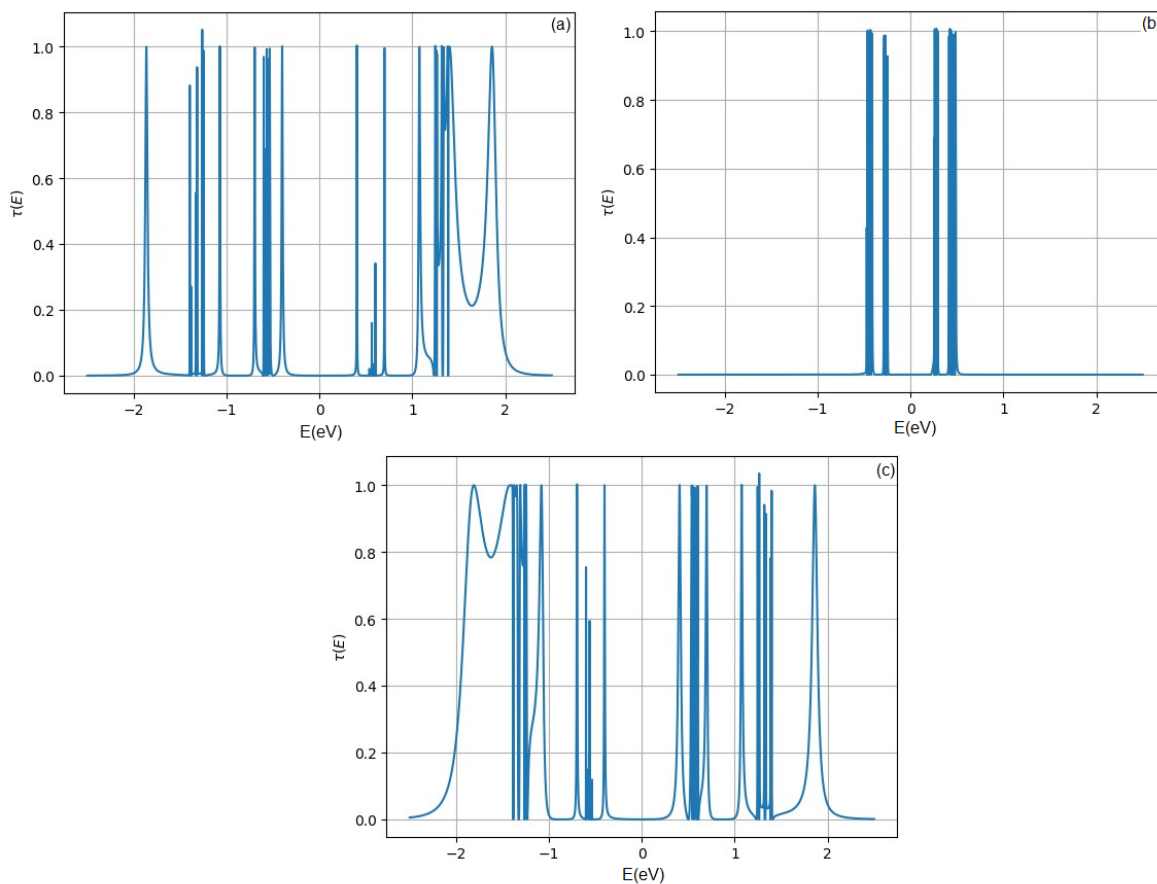


Figura 3-25.: Resultados de variar los parámetros de acoplamiento Γ y V para una nanocinta de grafeno tipo zig.zag con diez anillos de ancho. (a) $\Gamma = -0,2eV$, $V = 0,5eV$, (b) $\Gamma = 0,5eV$, $V = -0,2eV$ y (c) $\Gamma = -0,5eV$, $V = -0,5eV$

Al modificar los parámetros de acoplamiento de energía en una nanocinta de grafeno tipo zigzag de diez anillos de ancho, se observa un cambio significativo en las bandas de energía, las cuales se estrechan hasta el punto en que resulta difícil distinguir cuántas bandas están presentes. Además, se evidencia como al reducir los parámetros de acople, el gap entre las bandas se hace más pequeño.

4. CONCLUSIONES

1. Las nanocintas de grafeno tipo brazo de silla presentan un cambio en sus propiedades electrónicas que puede ser ajustado al modificar tanto su longitud como su ancho. Al ajustar la longitud de la nanocinta, se observa una transición en su comportamiento desde conductor a semiconductor, donde una menor cantidad de anillos en la longitud tiende a promover un comportamiento conductor. Por otro lado, al variar el ancho de la nanocinta, se induce una transición hacia un comportamiento aislante.
2. La implementación del lenguaje de programación Python permito evaluar el transporte electrónico en nanocintas de grafeno, facilitando la incorporación de procesos como la decimación y la consideración de efectos de bordes, destacando su eficacia como herramienta clave en la investigación de propiedades electrónicas del grafeno al estar conectado a una diferencia de potencial.
3. Se modelaron nanocintas de grafeno mediante un proceso de renormalización que consideró el efecto de los bordes, reduciendo los grados de libertad de los electrones y limitando su movimiento a un solo canal, aplicando la decimación de las funciones de Green permitió simular el comportamiento del sistema, convirtiéndole a un sistema 1-D, permitiendo una mejora en la comprensión de las propiedades electrónicas de las nanocintas de grafeno.
4. En las nanocintas de grafeno tipo brazo de silla, la probabilidad de transmisión de electrones es mayor en comparación con las nanocintas tipo zig-zag debido a que la brecha de energía entre la banda de valencia y la banda de conducción es menor. Esta menor brecha energética facilita la transición de los electrones entre las bandas, mejorando su movilidad.
5. En la nanocinta tipo zigzag, al variar la longitud la cantidad de bandas de energía permanece constante al igual que la probabilidad de transmisión, sin embargo, variar el ancho hace que aumente el número de bandas conservando la probabilidad de transmisión.
6. El efecto del tipo de borde en el transporte electrónico a través de nanocintas de grafeno se evidencia con mayor probabilidad de transmisión en las nanocintas con borde tipo brazo de silla gracias a la modelación realizada con Python. Esto se debe a un aumento en la existencia de bandas de energía que caracterizan la transmisión

de electrones a través del material y, por consiguiente, la movilidad de los electrones libres en el sistema.

7. La modificación de los parámetros de acoplamiento induce cambios en los niveles de energía y en la estructura de bandas de la nanocinta de grafeno, acercando las bandas entre sí y generando notables brechas de energía para valores específicos de energía.

A. Anexo: Decimación de una nanocinta de grafeno tipo brazo de silla con dos anillos de longitud y uno de ancho

A continuación, decimaremos una nanocinta de grafeno con tipo brazo de silla de dos anillos de longitud con energías de acople V entre cada átomo de carbono y una función de Green no perturbado $g_0 = \frac{1}{E-i\eta}$, como se muestra en la figura A-1.

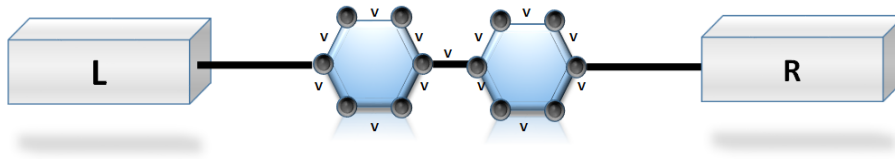


Figura A-1.: Nanocinta de grafeno tipo brazo de silla de Largo $L=4$ (dos anillos), conectada a dos electrodos (izquierdo (L) y derecho (R)). Los átomos de carbonó se encuentran unidos por una energía efectiva V .

Para realizar la decimación, primero se debe renombrar cada sitio donde se encuentran los átomos de carbono en filas y columnas. Para ello, se nombran las filas alfabéticamente y las columnas numéricamente, como se muestra en la figura A-2.

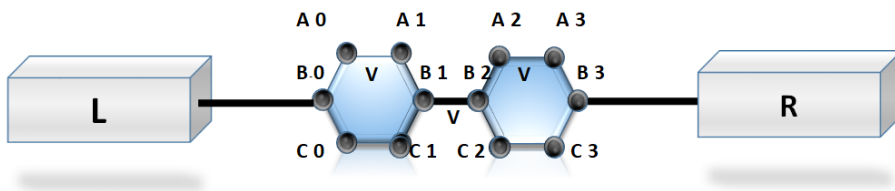


Figura A-2.: Nanocinta de grafeno con los sitios renombrados y energía de acople V entre ellos.

Empleamos la ecuación (2-90) para encontrar las nuevas funciones de los sitios (B0, B1, B2 Y B3) y así llevar toda la información a un solo sitio por cada columna. Se comienza con el sitio B0.

$$G_{00}^A = g_0 + g_0 V G_{00}^B + g_0 V G_{01}^A, \tag{A-1}$$

$$G_{00}^B = g_0 + g_0 V G_{00}^C + g_0 V G_{00}^A, \quad (\text{A-2})$$

$$G_{00}^C = g_0 + g_0 V G_{00}^B + g_0 V G_{01}^C. \quad (\text{A-3})$$

Aplicamos nuevamente la ecuación (2 – 90) para encontrar G_{01}^A, G_{01}^C .

$$G_{01}^A = g_0 V G_{00}^A + g_0 V G_{01}^B, \quad (\text{A-4})$$

$$G_{01}^C = g_0 V G_{00}^C + g_0 V G_{01}^B. \quad (\text{A-5})$$

Para enviar todo al sitio B0, es necesario encontrar la función de G_{00}^B y sus interacciones con los primeros vecinos. Para esto, reemplaza (A-4) y (A-5) en (A-1) y (A-3), respectivamente. Reemplazando (A-4) en (A-1).

$$G_{00}^A = g_0 + g_0 V G_{00}^B + g_0 V (g_0 V G_{01}^B + g_0 V G_{00}^A), \quad (\text{A-6})$$

$$G_{00}^A = g_0 + g_0 V G_{00}^B + g_0^2 V^2 G_{01}^B + g_0^2 V^2 G_{00}^A, \quad (\text{A-7})$$

$$G_{00}^A (1 - g_0^2 V^2) = g_0 + g_0 V G_{00}^B + g_0^2 V^2 G_{01}^B, \quad (\text{A-8})$$

$$G_{00}^A = \frac{g_0 + g_0 V G_{00}^B + g_0^2 V^2 G_{01}^B}{1 - g_0^2 V^2}, \quad (\text{A-9})$$

ahora (A-5) y (A-3)

$$G_{00}^C = g_0 + g_0 V (g_0 V G_{01}^B + g_0 V G_{00}^C) + g_0 V G_{00}^B, \quad (\text{A-10})$$

$$G_{00}^C = g_0 + g_0^2 V^2 G_{01}^B + g_0^2 V^2 G_{00}^C + g_0 V G_{00}^B, \quad (\text{A-11})$$

$$G_{00}^C (1 - g_0^2 V^2) = g_0 + g_0^2 V^2 G_{01}^B + g_0 V G_{00}^B, \quad (\text{A-12})$$

$$G_{00}^C = \frac{g_0 + g_0^2 V^2 G_{01}^B + g_0 V G_{00}^B}{1 - g_0^2 V^2}, \quad (\text{A-13})$$

Se observa que $G_{00}^A = G_{00}^C$. Esto permite reescribir la ecuación (A-2) de la siguiente manera.

$$G_{00}^B = g_0 + 2g_0 V G_{00}^C. \quad (\text{A-14})$$

En este paso, se sustituye la ecuación (A-13) dentro de la ecuación (A-14).

$$G_{00}^B = g_0 + 2g_0 V \left(\frac{g_0 + g_0^2 V^2 G_{01}^B + g_0 V G_{00}^B}{1 - g_0^2 V^2} \right), \quad (\text{A-15})$$

$$G_{00}^B = \frac{g_0 - g_0^3 V^2 + 2g_0^2 V + 2g_0^3 V^3 G_{01}^B + 2g_0^2 v^2 G_{00}^B}{1 - g_0^2 V^2}, \quad (\text{A-16})$$

$$G_{00}^B - g_0^2 V^2 G_{00}^B - 2g_0^2 v^2 G_{00}^B = g_0 - g_0^3 v^2 + 2g_0^2 v + 2g_0^3 v^3 G_{01}^B, \quad (\text{A-17})$$

$$G_{00}^B (1 - 3g_0^2 v^2) = g_0 - g_0^3 v^2 + 2g_0^2 v + 2g_0^3 v^3 G_{01}^B, \quad (\text{A-18})$$

$$G_{00}^B = \frac{g_0 - g_0^3 v^2 + 2g_0^2 v}{1 - 3g_0^2 v^2} + \frac{2g_0^3 v^3}{1 - 3g_0^2 v^2} G_{01}^B, \quad (\text{A-19})$$

Se multiplica y luego se divide la segunda fracción por: $g_0 - g_0^3 v^2 + 2g_0^2 v$

$$G_{00}^B = \frac{g_0 - g_0^3 v^2 + 2g_0^2 v}{1 - 3g_0^2 v^2} + \frac{g_0 - g_0^3 v^2 + 2g_0^2 v}{1 - 3g_0^2 v^2} \frac{2g_0^3 v^3}{g_0 - g_0^3 v^2 + 2g_0^2 v} G_{01}^B, \quad (\text{A-20})$$

donde.

$$g_1 = \frac{g_0 - g_0^3 V^2 + 2g_0^2 V}{1 - 3g_0^2 V^2}, \quad (\text{A-21})$$

$$\omega = \frac{2g_0^3 V^3}{g_0 - g_0^3 V^2 + 2g_0^2 V}. \quad (\text{A-22})$$

Finalmente, se obtiene que.

$$G_{00}^B = g_1 + g_1 \omega G_{01}^B. \quad (\text{A-23})$$

Donde g_1 es la nueva función de Green del sitio B0 y ω es la nueva energía de acople entre el sitio B0 y B1.

Sitio B1 Se aplica la ecuación (2-90) en el sitio B1 y queda.

$$G_{11}^A = g_0 + g_0 V G_{11}^B + g_0 V G_{10}^A, \quad (\text{A-24})$$

$$G_{11}^B = g_0 + g_0 V G_{11}^C + g_0 V G_{11}^A + g_0 V G_{12}^B, \quad (\text{A-25})$$

$$G_{11}^C = g_0 + g_0 V G_{11}^B + g_0 V G_{10}^C. \quad (\text{A-26})$$

Volvemos a utilizar la ecuación (2 - 90) para encontrar G_{10}^A , G_{10}^C .

$$G_{10}^A = g_0 V G_{11}^A + g_0 V G_{10}^B, \quad (\text{A-27})$$

$$G_{10}^C = g_0 V G_{11}^C + g_0 V G_{10}^B. \quad (\text{A-28})$$

Se reemplaza (A-27) en (A-24).

$$G_{11}^A = g_0 + g_0 V (g_0 V G_{11}^A + g_0 V G_{10}^B) + g_0 V G_{11}^B, \quad (\text{A-29})$$

$$G_{11}^A = g_0 + g_0^2 V^2 G_{11}^A + g_0^2 V^2 G_{10}^B + g_0 V G_{11}^B, \quad (\text{A-30})$$

$$G_{11}^A (1 - g_0^2 V^2) = g_0 + g_0^2 V^2 G_{10}^B + g_0 V G_{11}^B, \quad (\text{A-31})$$

$$G_{11}^A = \frac{g_0 + g_0^2 V^2 G_{10}^B + g_0 V G_{11}^B}{1 - g_0^2 V^2}. \quad (\text{A-32})$$

Ahora (A-28) en (A-26).

$$G_{11}^C = g_0 + g_0V (g_0VG_{11}^C + g_0VG_{10}^B) + g_0VG_{11}^B \quad (\text{A-33})$$

$$G_{11}^C = g_0 + g_0^2V^2G_{11}^C + g_0^2V^2G_{10}^B + g_0VG_{11}^B \quad (\text{A-34})$$

$$G_{11}^C (1 - g_0^2V^2) = g_0 + g_0^2V^2G_{10}^B + g_0VG_{11}^B \quad (\text{A-35})$$

$$G_{11}^C = \frac{g_0 + g_0^2V^2G_{10}^B + g_0VG_{11}^B}{1 - g_0^2V^2} \quad (\text{A-36})$$

La igualdad entre G_{11}^A y G_{11}^C permite que la ecuación (A-25) sea reescrita de esa forma.

$$G_{11}^B = g_0 + 2g_0VG_{11}^C + g_0VG_{12}^B. \quad (\text{A-37})$$

Se sustituye (A-36) en (A-37).

$$G_{11}^B = g_0 + 2g_0v \left(\frac{g_0 + g_0^2v^2G_{10}^B + g_0vG_{11}^B}{1 - g_0^2v^2} \right) + g_0vG_{12}^B, \quad (\text{A-38})$$

$$G_{11}^B = \frac{g_0 - g_0^3v^2 + 2g_0^2v + 2g_0^3v^3G_{10}^B + 2g_0^2v^2G_{11}^B + (g_0v - g_0^3v^3)G_{12}^B}{1 - g_0^2v^2}, \quad (\text{A-39})$$

$$G_{11}^B - g_0^2v^2G_{11}^B = g_0 - g_0^3v^2 + 2g_0^2v + 2g_0^3v^3G_{10}^B + 2g_0^2v^2G_{11}^B + (g_0v - g_0^3v^3)G_{12}^B, \quad (\text{A-40})$$

$$G_{11}^B - g_0^2v^2G_{11}^B - 2g_0^2V^2G_{11}^B = g_0 - g_0^3v^2 + 2g_0^2V + 2g_0^3v^3G_{10}^B + (g_0v - g_0^3v^3)G_{12}^B, \quad (\text{A-41})$$

$$G_{11}^B (1 - 3g_0^2V^2) = g_0 - g_0^3v^2 + 2g_0^2v + 2g_0^3v^3G_{10}^B + (g_0v - g_0^3V^3)G_{12}^B, \quad (\text{A-42})$$

$$G_{11}^B = \frac{g_0 - g_0^3V^2 + 2g_0^2V}{1 - 3g_0^2V^2} + \frac{2g_0^3V^3G_{10}^B}{1 - 3g_0^2V^2} + \frac{(g_0v - g_0^3V^3)G_{12}^B}{1 - 3g_0^2V^2}, \quad (\text{A-43})$$

Se realiza la multiplicación y división de la segunda y tercera fracción por la expresión: $g_0 - g_0^3v^2 + 2g_0^2v$, para integrarla en el cálculo.

$$G_{11}^B = \frac{g_0 - g_0^3v^2 + 2g_0^2v}{1 - 3g_0^2v^2} + \frac{g_0 - g_0^3v^2 + 2g_0^2v}{1 - 3g_0^2v^2} \frac{2g_0^3v^3}{g_0 - g_0^3v^2 + 2g_0^2v} G_{10}^B + \frac{g_0 - g_0^3v^2 + 2g_0^2v}{1 - 3g_0^2v^2} \frac{(g_0v - g_0^3V^3)}{g_0 - g_0^3v^2 + 2g_0^2v} G_{12}^B, \quad (\text{A-44})$$

donde.

$$\beta = \frac{g_0v - g_0^3V^3}{g_0 - g_0^3V^2 + 2g_0^2V}. \quad (\text{A-45})$$

Finalmente, se obtiene que.

$$G_{11}^B = g_1 + g_1\omega G_{10}^B + g_1\beta G_{12}^B \quad (\text{A-46})$$

Acá se ve como se obtiene una nueva energía de acople entre los sitios B1 y B2.

Sitio B2. Se aplica la ecuación (2-90) en el sitio B2 y queda.

$$G_{22}^A = g_0 + g_0 V G_{22}^B + g_0 V G_{23}^A, \quad (\text{A-47})$$

$$G_{22}^B = g_0 + g_0 V G_{22}^C + g_0 V G_{22}^A + g_0 V G_{21}^B, \quad (\text{A-48})$$

$$G_{22}^C = g_0 + g_0 V G_{22}^B + g_0 V G_{23}^C. \quad (\text{A-49})$$

Volvemos a utilizar la ecuación (2 – 90) para encontrar G_{23}^A , G_{23}^C .

$$G_{23}^A = g_0 V G_{22}^A + g_0 V G_{23}^B, \quad (\text{A-50})$$

$$G_{23}^C = g_0 V G_{22}^C + g_0 V G_{23}^B. \quad (\text{A-51})$$

Se reemplaza (A-50) en (A-47).

$$G_{22}^A = g_0 + g_0 V (g_0 V G_{22}^A + g_0 V G_{23}^B) + g_0 V G_{22}^B, \quad (\text{A-52})$$

$$G_{22}^A = g_0 + g_0^2 V^2 G_{22}^A + g_0^2 V^2 G_{23}^B + g_0 V G_{22}^B, \quad (\text{A-53})$$

$$G_{22}^A (1 - g_0^2 V^2) = g_0 + g_0^2 V^2 G_{23}^B + g_0 V G_{22}^B, \quad (\text{A-54})$$

$$G_{22}^A = \frac{g_0 + g_0^2 V^2 G_{23}^B + g_0 V G_{22}^B}{1 - g_0^2 V^2}. \quad (\text{A-55})$$

Ahora (A-51) en (A-49).

$$G_{22}^C = g_0 + g_0 V (g_0 V G_{22}^C + g_0 V G_{23}^B) + g_0 V G_{22}^B \quad (\text{A-56})$$

$$G_{22}^C = g_0 + g_0^2 V^2 G_{22}^C + g_0^2 V^2 G_{23}^B + g_0 V G_{22}^B \quad (\text{A-57})$$

$$G_{22}^C (1 - g_0^2 V^2) = g_0 + g_0^2 V^2 G_{23}^B + g_0 V G_{22}^B \quad (\text{A-58})$$

$$G_{22}^C = \frac{g_0 + g_0^2 V^2 G_{23}^B + g_0 V G_{22}^B}{1 - g_0^2 V^2} \quad (\text{A-59})$$

La igualdad entre G_{22}^A y G_{22}^C permite que la ecuación (A-48) sea reescrita de esa forma.

$$G_{22}^B = g_0 + 2g_0 V G_{22}^C + g_0 V G_{21}^B. \quad (\text{A-60})$$

Se sustituye (A-59) en (A-60).

$$G_{22}^B = g_0 + 2g_0 v \left(\frac{g_0 + g_0^2 v^2 G_{23}^B + g_0 v G_{22}^B}{1 - g_0^2 v^2} \right) + g_0 v G_{21}^B, \quad (\text{A-61})$$

$$G_{22}^B = \frac{g_0 - g_0^3 v^2 + 2g_0^2 v + 2g_0^3 v^3 G_{23}^B + 2g_0^2 v^2 G_{22}^B + (g_0 v - g_0^3 v^3) G_{21}^B}{1 - g_0^2 v^2}, \quad (\text{A-62})$$

$$G_{22}^B - g_0^2 v^2 G_{22}^B = g_0 - g_0^3 v^2 + 2g_0^2 v + 2g_0^3 v^3 G_{23}^B + 2g_0^2 v^2 G_{22}^B + (g_0 v - g_0^3 v^3) G_{21}^B, \quad (\text{A-63})$$

$$G_{22}^B - g_0^2 v^2 G_{22}^B - 2g_0^2 V^2 G_{22}^B = g_0 - g_0^3 v^2 + 2g_0^2 V + 2g_0^3 v^3 G_{23}^B + (g_0 v - g_0^3 v^3) G_{21}^B, \quad (\text{A-64})$$

$$G_{22}^B (1 - 3g_0^2 V^2) = g_0 - g_0^3 v^2 + 2g_0^2 v + 2g_0^3 v^3 G_{23}^B + (g_0 v - g_0^3 V^3) G_{21}^B, \quad (\text{A-65})$$

$$G_{22}^B = \frac{g_0 - g_0^3 V^2 + 2g_0^2 V}{1 - 3g_0^2 V^2} + \frac{2g_0^3 V^3 G_{23}^B}{1 - 3g_0^2 V^2} + \frac{(g_0 v - g_0^3 V^3) G_{21}^B}{1 - 3g_0^2 V^2}, \quad (\text{A-66})$$

Se realiza la multiplicación y división de la segunda y tercera fracción por la expresión: $g_0 - g_0^3 v^2 + 2g_0^2 v$, para integrarla en el cálculo.

$$G_{22}^B = \frac{g_0 - g_0^3 v^2 + 2g_0^2 v}{1 - 3g_0^2 v^2} + \frac{g_0 - g_0^3 v^2 + 2g_0^2 v}{1 - 3g_0^2 v^2} \frac{2g_0^3 v^3}{g_0 - g_0^3 v^2 + 2g_0^2 v} G_{23}^B + \frac{g_0 - g_0^3 v^2 + 2g_0^2 v}{1 - 3g_0^2 v^2} \frac{(g_0 V - g_0^3 V^3)}{g_0 - g_0^3 v^2 + 2g_0^2 v} G_{21}^B, \quad (\text{A-67})$$

Finalmente, se obtiene que.

$$G_{22}^B = g_1 + g_1 \omega G_{23}^B + g_1 \beta G_{21}^B \quad (\text{A-68})$$

sitio B3. Se emplea (2-90)

$$G_{33}^A = g_0 + g_0 V G_{33}^B + g_0 V G_{32}^A, \quad (\text{A-69})$$

$$G_{33}^B = g_0 + g_0 V G_{33}^C + g_0 V G_{33}^A, \quad (\text{A-70})$$

$$G_{33}^C = g_0 + g_0 V G_{33}^B + g_0 V G_{32}^C. \quad (\text{A-71})$$

Aplicamos nuevamente la ecuación (2 - 90) para encontrar G_{32}^A, G_{32}^C .

$$G_{32}^A = g_0 V G_{33}^A + g_0 V G_{32}^B, \quad (\text{A-72})$$

$$G_{32}^C = g_0 V G_{33}^C + g_0 V G_{32}^B. \quad (\text{A-73})$$

Para enviar todo al sitio B3, es necesario encontrar la función de G_{33}^B y sus interacciones con los primeros vecinos. Para esto, reemplaza (A-72) y (A-73) en (A-69) y (A-71), respectivamente. Reemplazando (A-72) en (A-69).

$$G_{33}^A = g_0 + g_0 V G_{33}^B + g_0 V (g_0 V G_{32}^B + g_0 V G_{33}^A), \quad (\text{A-74})$$

$$G_{33}^A = g_0 + g_0 V G_{33}^B + g_0^2 V^2 G_{32}^B + g_0^2 V^2 G_{33}^A, \quad (\text{A-75})$$

$$G_{33}^A (1 - g_0^2 V^2) = g_0 + g_0 V G_{33}^B + g_0^2 V^2 G_{32}^B, \quad (\text{A-76})$$

$$G_{33}^A = \frac{g_0 + g_0 V G_{33}^B + g_0^2 V^2 G_{32}^B}{1 - g_0^2 V^2}, \quad (\text{A-77})$$

ahora (A-73) y (A-71)

$$G_{33}^C = g_0 + g_0 V (g_0 V G_{32}^B + g_0 V G_{33}^C) + g_0 V G_{33}^B, \quad (\text{A-78})$$

$$G_{33}^C = g_0 + g_0^2 V^2 G_{32}^B + g_0^2 V^2 G_{33}^C + g_0 V G_{33}^B, \quad (\text{A-79})$$

$$G_{33}^C (1 - g_0^2 V^2) = g_0 + g_0^2 V^2 G_{32}^B + g_0 V G_{33}^B, \quad (\text{A-80})$$

$$G_{33}^C = \frac{g_0 + g_0^2 V^2 G_{32}^B + g_0 V G_{33}^B}{1 - g_0^2 V^2}, \quad (\text{A-81})$$

Se observa que $G_{33}^A = G_{33}^C$. Esto permite reescribir la ecuación (A-70) de la siguiente manera.

$$G_{33}^B = g_0 + 2g_0V G_{33}^C. \quad (\text{A-82})$$

En este paso, se sustituye la ecuación (A-81) dentro de la ecuación (A-82).

$$G_{33}^B = g_0 + 2g_0V \left(\frac{g_0 + g_0^2V^2G_{32}^B + g_0VG_{33}^3}{1 - g_0^2V^2} \right), \quad (\text{A-83})$$

$$G_{33}^B = \frac{g_0 - g_0^3V^2 + 2g_0^2V + 2g_0^3V^3G_{32}^B + 2g_0^2v^2G_{33}^B}{1 - g_0^2V^2}, \quad (\text{A-84})$$

$$G_{33}^B - g_0^2V^2G_{33}^B - 2g_0^2v^2G_{33}^B = g_0 - g_0^3v^2 + 2g_0^2v + 2g_0^3v^3G_{32}^B, \quad (\text{A-85})$$

$$G_{33}^B (1 - 3g_0^2v^2) = g_0 - g_0^3v^2 + 2g_0^2v + 2g_0^3v^3G_{32}^B, \quad (\text{A-86})$$

$$G_{33}^B = \frac{g_0 - g_0^3v^2 + 2g_0^2v}{1 - 3g_0^2v^2} + \frac{2g_0^3v^3}{1 - 3g_0^2v^2} G_{32}^B, \quad (\text{A-87})$$

Se multiplica y luego se divide la segunda fracción por: $g_0 - g_0^3v^2 + 2g_0^2v$

$$G_{33}^B = \frac{g_0 - g_0^3v^2 + 2g_0^2v}{1 - 3g_0^2v^2} + \frac{g_0 - g_0^3v^2 + 2g_0^2v}{1 - 3g_0^2v^2} \frac{2g_0^3v^3}{g_0 - g_0^3v^2 + 2g_0^2v} G_{32}^B, \quad (\text{A-88})$$

Finalmente, se obtiene que.

$$G_{33}^B = g_1 + g_1\omega G_{32}^B, \quad (\text{A-89})$$

Por lo cual nuestro sistema decimado queda de la siguiente forma:

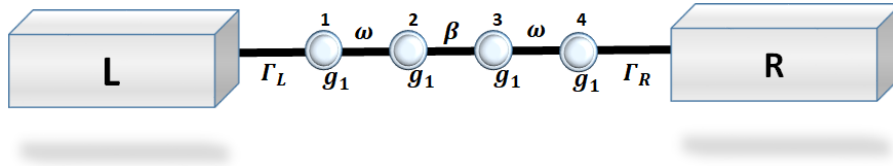


Figura A-3.: Nanocinta de grafeno decimada con nuevas energías efectivas de acople ω , β y nueva función de Green g_1 .

La figura **A-3** muestra la forma lineal, correspondiente a la decimación de una nanocinta de grafeno tipo brazo de silla con dos anillos de longitud y uno de ancho.

B. Anexo: Decimación de una nanocinta de grafeno tipo brazo de silla con dos anillos de ancho y tres de longitud

A continuación, se llevará a cabo la reducción de una nanocinta de grafeno con una estructura tipo brazo de silla que consta de dos anillos de longitud. Se considerarán las energías de acople V entre cada átomo de carbono y se analizará una función de Green no perturbada $g_0 = \frac{1}{E-i\eta}$, tal como se ilustra en la figura B-1

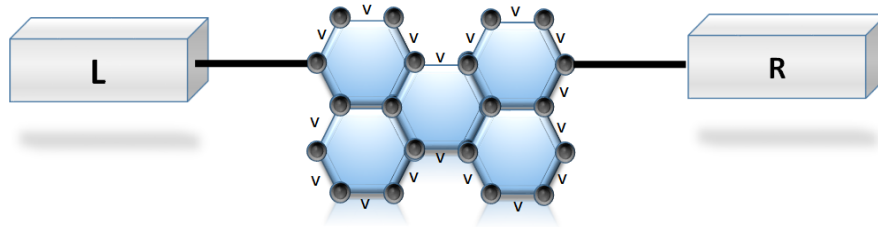


Figura B-1.: Nanocinta de grafeno tipo brazo de silla con un ancho de dos anillos y energías de acople V

Se renombran los sitios de manera análoga como en el anexo A.

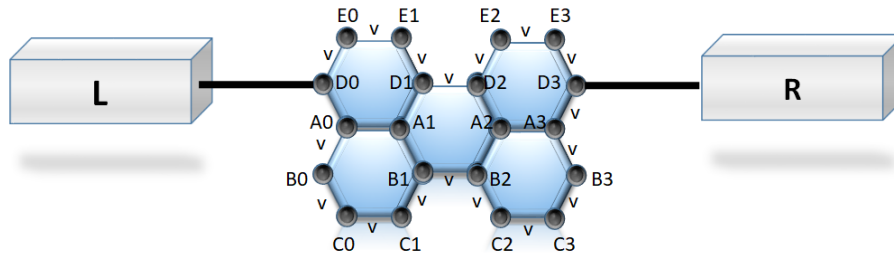


Figura B-2.: Nanocinta de grafeno con los sitios renombrados

Se procede a determinar las funciones de los sitios $B_0, B_1, B_2, B_3, D_0, D_1, D_2$ y D_3 . Esto se realizará utilizando la ecuación (2-20).

Sitio B_0

$$G_{00}^A = g_0 + g_0 V G_{00}^B + g_0 V G_{01}^A + g_0 V G_{00}^D, \quad (\text{B-1})$$

$$G_{00}^B = g_0 + g_0 V G_{00}^C + g_0 V G_{00}^A, \quad (\text{B-2})$$

$$G_{00}^C = g_0 + g_0 V G_{00}^B + g_0 V G_{01}^C. \quad (\text{B-3})$$

su usa nuevamente la ecuación (2 – 90) para encontrar G_{01}^A , G_{01}^C .

$$G_{01}^A = g_0 V G_{00}^A + g_0 V G_{01}^B, \quad (\text{B-4})$$

$$G_{01}^C = g_0 V G_{00}^C + g_0 V G_{01}^B. \quad (\text{B-5})$$

Para enviar todo al sitio B0, es necesario encontrar la función de G_{00}^B y sus interacciones con los primeros vecinos. Para esto, reemplaza (B-4) y (B-5) en (B-1) y (B-3), respectivamente. Reemplazando (B-4) en (B-1).

$$G_{00}^A = g_0 + g_0 V G_{00}^B + g_0 V (g_0 V G_{01}^B + g_0 V G_{00}^A) + g_0 V G_{00}^D, \quad (\text{B-6})$$

$$G_{00}^A = g_0 + g_0 V G_{00}^B + g_0^2 V^2 G_{01}^B + g_0^2 V^2 G_{00}^A + g_0 V G_{00}^D, \quad (\text{B-7})$$

$$G_{00}^A (1 - g_0^2 V^2) = g_0 + g_0 V G_{00}^B + g_0^2 V^2 G_{01}^B + g_0 V G_{00}^D, \quad (\text{B-8})$$

$$G_{00}^A = \frac{g_0 + g_0 V G_{00}^B + g_0^2 V^2 G_{01}^B + g_0 V G_{00}^D}{1 - g_0^2 V^2}, \quad (\text{B-9})$$

ahora (B-5) y (B-3)

$$G_{00}^C = g_0 + g_0 V (g_0 V G_{01}^B + g_0 V G_{00}^C) + g_0 V G_{00}^B, \quad (\text{B-10})$$

$$G_{00}^C = g_0 + g_0^2 V^2 G_{01}^B + g_0^2 V^2 G_{00}^C + g_0 V G_{00}^B, \quad (\text{B-11})$$

$$G_{00}^C (1 - g_0^2 V^2) = g_0 + g_0^2 V^2 G_{01}^B + g_0 V G_{00}^B, \quad (\text{B-12})$$

$$G_{00}^C = \frac{g_0 + g_0^2 V^2 G_{01}^B + g_0 V G_{00}^B}{1 - g_0^2 V^2}, \quad (\text{B-13})$$

Se reemplaza (B-13) y (B-9) en (B-2)

$$G_{00}^B = g_0 + g_0 V \left(\frac{g_0 + g_0^2 V^2 G_{01}^B + g_0 V G_{00}^B + g_0 V G_{00}^D}{1 - g_0^2 V^2} \right) + g_0 V \left(\frac{g_0 + g_0^2 V^2 G_{01}^B + g_0 V G_{00}^B}{1 - g_0^2 V^2} \right), \quad (\text{B-14})$$

$$G_{00}^B = \frac{g_0 - g_0^3 V^2 + 2g_0^2 V + 2g_0^2 V^2 G_{00}^B + 2g_0^3 V^3 G_{01}^B + g_0^2 V^2 G_{00}^D}{1 - g_0^2 V^2}, \quad (\text{B-15})$$

$$G_{00}^B - g_0^2 V^2 G_{00}^B - 2g_0^2 V^2 G_{00}^B = g_0 - g_0^3 V^2 + 2g_0^2 V + 2g_0^3 V^3 G_{01}^B + g_0^2 V^2 G_{00}^D, \quad (\text{B-16})$$

$$G_{00}^B (1 - 3g_0^2 V^2) = g_0 - g_0^3 V^2 + 2g_0^2 V + 2g_0^3 V^3 G_{01}^B + g_0^2 V^2 G_{00}^D, \quad (\text{B-17})$$

$$G_{00}^B = \frac{g_0 - g_0^3 V^2 + 2g_0^2 V}{1 - 3g_0^2 V^2} + \frac{2g_0^3 V^3 G_{01}^B}{1 - 3g_0^2 V^2} + \frac{g_0^2 V^2 G_{00}^D}{1 - 3g_0^2 V^2}, \quad (\text{B-18})$$

Se multiplica y divide la segunda y tercera fracción por: $g_0 - g_0^3 V^2 + 2g_0^2 V$.

$$G_{00}^B = \frac{g_0 - g_0^3 V^2 + 2g_0^2 V}{1 - 3g_0^2 V^2} + \frac{g_0 - g_0^3 V^2 + 2g_0^2 V}{1 - 3g_0^2 V^2} \frac{2g_0^3 V^3 G_{01}^B}{g_0 - g_0^3 V^2 + 2g_0 V} + \frac{g_0 - g_0^3 V^2 + 2g_0^2 V}{1 - 3g_0^2 V^2} \frac{g_0^2 V^2 G_{00}^D}{g_0^3 - g_0^3 V^2 + 2g_0^2 V}, \quad (\text{B-19})$$

donde:

$$\frac{g_0 - g_0^3 V^2 + 2g_0^2 V}{1 - 3g_0^2 V^2} = g_1, \quad (\text{B-20})$$

$$\frac{2g_0^3 V^3}{g_0 - g_0^3 V^2 + 2g_0^2 V} = V_1 \quad (\text{B-21})$$

$$\frac{g_0^2 V^2}{g_0 - g_0^3 V^2 + 2g_0^2 V} = V_3, \quad (\text{B-22})$$

entonces:

$$G_{00}^B = g_1 + g_1 V_1 G_{01}^B + g_1 V_3 G_{00}^D, \quad (\text{B-23})$$

donde g_1 es la nueva función de Green de cada sitio, V_1 y V_3 son las nuevas energías efectivas de acople ente los sitios B0, B1 y B0, D0

Sitio B1

$$G_{11}^A = g_0 + g_0 V G_{11}^B + g_0 V G_{10}^A + g_0 V G_{11}^D, \quad (\text{B-24})$$

$$G_{11}^B = g_0 + g_0 V G_{11}^C + g_0 V G_{11}^A + g_0 V G_{12}^B, \quad (\text{B-25})$$

$$G_{11}^C = g_0 + g_0 V G_{11}^B + g_0 V G_{10}^C. \quad (\text{B-26})$$

Volvemos a utilizar la ecuación (2 - 90) para encontrar G_{10}^A , G_{10}^C .

$$G_{10}^A = g_0 V G_{11}^A + g_0 V G_{10}^B, \quad (\text{B-27})$$

$$G_{10}^C = g_0 V G_{11}^C + g_0 V G_{10}^B. \quad (\text{B-28})$$

Se reemplaza (B-27) en (B-24).

$$G_{11}^A = g_0 + g_0 V (g V G_{11}^A + g_0 V G_{10}^B) + g_0 V G_{11}^B + g_0 V G_{11}^D, \quad (\text{B-29})$$

$$G_{11}^A = g_0 + g_0^2 V^2 G_{11}^A + g_0^2 V^2 G_{10}^B + g_0 V G_{11}^B + g_0 V G_{11}^D, \quad (\text{B-30})$$

$$G_{11}^A (1 - g_0^2 V^2) = g_0 + g_0^2 V^2 G_{10}^B + g_0 V G_{11}^B + g_0 V G_{11}^D, \quad (\text{B-31})$$

$$G_{11}^A = \frac{g_0 + g_0^2 V^2 G_{10}^B + g_0 V G_{11}^B + g_0 V G_{11}^D}{1 - g_0^2 V^2}. \quad (\text{B-32})$$

Ahora (B-28) en (B-26).

$$G_{11}^C = g_0 + g_0V (g_0VG_{11}^C + g_0VG_{10}^B) + g_0VG_{11}^B \quad (\text{B-33})$$

$$G_{11}^C = g_0 + g_0^2V^2G_{11}^C + g_0^2V^2G_{10}^B + g_0VG_{11}^B \quad (\text{B-34})$$

$$G_{11}^C (1 - g_0^2V^2) = g_0 + g_0^2V^2G_{10}^B + g_0VG_{11}^B \quad (\text{B-35})$$

$$G_{11}^C = \frac{g_0 + g_0^2V^2G_{10}^B + g_0VG_{11}^B}{1 - g_0^2V^2} \quad (\text{B-36})$$

se sustituye (B-32) y (B-36) en (B-25)

$$G_{11}^B = g_0 + g_0V \left(\frac{g_0 + g_0^2V^2G_{10}^B + g_0VG_{11}^B + g_0VG_{11}^D}{1 - g_0^2V^2} \right) + g_0V \left(\frac{g_0 + g_0^2V^2G_{10}^B + g_0VG_{11}^B}{1 - g_0^2V^2} \right) + g_0VG_{12}^B, \quad (\text{B-37})$$

$$G_{11}^B = \frac{g_0 - g_0^3V^2 + 2g_0^2V + 2g_0^2V^2G_{11}^B + 2g_0^3V^3G_{10}^B + g_0^2V^2G_{11}^D + g_0VG_{12}^B - g_0^3V^3G_{12}^B}{1 - g_0^2V^2}, \quad (\text{B-38})$$

$$G_{11}^B - g_0^2V^2G_{11}^B - 2g_0^2V^2G_{11}^B = g_0 - g_0^3V^2 + 2g_0^2V + 2g_0^3V^3G_{10}^B + g_0^2V^2G_{11}^D + g_0VG_{12}^B - g_0^3V^3G_{12}^B, \quad (\text{B-39})$$

$$G_{11}^B (1 - 3g_0^2V^2) = g_0 - g_0^3V^2 + 2g_0^2V + 2g_0^3V^3G_{10}^B + g_0^2V^2G_{11}^D + g_0VG_{12}^B - g_0^3V^3G_{12}^B, \quad (\text{B-40})$$

$$G_{11}^B = \frac{g_0 - g_0^3V^2 + 2g_0^2V}{1 - 3g_0^2V^2} + \frac{2g_0^3V^3G_{10}^B}{1 - 3g_0^2V^2} + \frac{g_0^2V^2G_{11}^D}{1 - 3g_0^2V^2} + \frac{(g_0V - g_0^3V^3)G_{12}^B}{1 - 3g_0^2V^2}, \quad (\text{B-41})$$

Se multiplica y divide la segunda y tercera fracción por: $g_0 - g_0^3V^2 + 2g_0^2V$.

$$G_{11}^B = \frac{g_0 - g_0^3V^2 + 2g_0^2V}{1 - 3g_0^2V^2} + \frac{g_0 - g_0^3V^2 + 2g_0^2V}{1 - 3g_0^2V^2} \frac{2g_0^3V^3G_{10}^B}{g_0 - g_0^3V^2 + 2g_0^2V} + \frac{g_0 - g_0^3V^2 + 2g_0^2V}{1 - 3g_0^2V^2} \frac{g_0^2V^2G_{11}^D}{g_0 - g_0^3V^2 + 2g_0^2V} + \frac{g_0 - g_0^3V^2 + 2g_0^2V}{1 - 3g_0^2V^2} \frac{(g_0V - g_0^3V^3)G_{12}^B}{1 - 3g_0^2V^2}, \quad (\text{B-42})$$

con

$$V_2 = \frac{g_0V - g_0^3V^3}{1 - 3g_0^2V^2} \quad (\text{B-43})$$

entonces

$$G_{11}^B = g_1 + g_1V_1G_{10}^B + g_1V_3G_{11}^D + g_1V_2G_{12}^B \quad (\text{B-44})$$

siendo V_2 la energía de acople entre los sitios B1 y B2.

Sitio 2

$$G_{22}^A = g_0 + g_0 V G_{22}^B + g_0 V G_{23}^A + g_0 V G_{22}^D, \quad (\text{B-45})$$

$$G_{22}^B = g_0 + g_0 V G_{22}^C + g_0 V G_{22}^A + g_0 V G_{21}^B, \quad (\text{B-46})$$

$$G_{22}^C = g_0 + g_0 V G_{22}^B + g_0 V G_{23}^C. \quad (\text{B-47})$$

Volvemos a utilizar la ecuación (2 – 90) para encontrar G_{23}^A , G_{23}^C .

$$G_{23}^A = g_0 V G_{22}^A + g_0 V G_{23}^B, \quad (\text{B-48})$$

$$G_{23}^C = g_0 V G_{22}^C + g_0 V G_{23}^B. \quad (\text{B-49})$$

Se reemplaza (B-48) en (B-45).

$$G_{22}^A = g_0 + g_0 V (g_0 V G_{22}^A + g_0 V G_{23}^B) + g_0 V G_{22}^B + g_0 V G_{22}^D, \quad (\text{B-50})$$

$$G_{22}^A = g_0 + g_0^2 V^2 G_{22}^A + g_0^2 V^2 G_{23}^B + g_0 V G_{22}^B + g_0 V G_{22}^D, \quad (\text{B-51})$$

$$G_{22}^A (1 - g_0^2 V^2) = g_0 + g_0^2 V^2 G_{23}^B + g_0 V G_{22}^B + g_0 V G_{22}^D, \quad (\text{B-52})$$

$$G_{22}^A = \frac{g_0 + g_0^2 V^2 G_{23}^B + g_0 V G_{22}^B + g_0 V G_{22}^D}{1 - g_0^2 V^2}. \quad (\text{B-53})$$

Ahora (B-49) en (B-47).

$$G_{22}^C = g_0 + g_0 V (g_0 V G_{22}^C + g_0 V G_{23}^B) + g_0 V G_{22}^B \quad (\text{B-54})$$

$$G_{22}^C = g_0 + g_0^2 V^2 G_{22}^C + g_0^2 V^2 G_{23}^B + g_0 V G_{22}^B \quad (\text{B-55})$$

$$G_{22}^C (1 - g_0^2 V^2) = g_0 + g_0^2 V^2 G_{23}^B + g_0 V G_{22}^B \quad (\text{B-56})$$

$$G_{22}^C = \frac{g_0 + g_0^2 V^2 G_{23}^B + g_0 V G_{22}^B}{1 - g_0^2 V^2} \quad (\text{B-57})$$

se sustituye (B-57) y (B-53) en (B-46)

$$G_{22}^B = g_0 + g_0 V \left(\frac{g_0 + g_0^2 V^2 G_{23}^B + g_0 V G_{22}^B + g_0 V G_{22}^D}{1 - g_0^2 V^2} \right) + g_0 V \left(\frac{g_0 + g_0^2 V^2 G_{23}^B + g_0 V G_{22}^B}{1 - g_0^2 V^2} \right) + g_0 V G_{21}^B, \quad (\text{B-58})$$

$$G_{22}^B = \frac{g_0 - g_0^3 V^2 + 2g_0^2 V + 2g_0^2 V^2 G_{22}^B + 2g_0^3 V^3 G_{23}^B + g_0^2 V^2 G_{22}^D + g_0 V G_{21}^B - g_0^3 V^3 G_{21}^B}{1 - g_0^2 V^2}, \quad (\text{B-59})$$

$$G_{22}^B - g_0^2 V^2 G_{11}^B - 2g_0^2 V^2 G_{22}^B = g_0 - g_0^3 V^2 + 2g_0^2 V + 2g_0^3 V^3 G_{23}^B + g_0^2 V^2 G_{22}^D + g_0 V G_{21}^B - g_0^3 V^3 G_{21}^B, \quad (\text{B-60})$$

$$G_{22}^B (1 - 3g_0^2 v^2) = g_0 - g_0^3 v^2 + 2g_0^2 V + 2g_0^3 V^3 G_{23}^B + g_0^2 V^2 G_{22}^D + g_0 V G_{21}^B - g_0^3 V^3 G_{12}^B, \quad (\text{B-61})$$

$$G_{22}^B = \frac{g_0 - g_0^3 V^2 + 2g_0^2 V}{1 - 3g_0^2 V^2} + \frac{2g_0^3 V^3 G_{23}^B}{1 - 3g_0^2 V^2} + \frac{g_0^2 V^2 G_{22}^D}{1 - 3g_0^2 V^2} + \frac{(g_0 V - g_0^3 V^3) G_{21}^B}{1 - 3g_0^2 V^2}, \quad (\text{B-62})$$

Se multiplica y divide la segunda y tercera fracción por: $g_0 - g_0^3 V^2 + 2g_0^2 V$.

$$G_{22}^B = \frac{g_0 - g_0^3 V^2 + 2g_0^2 V}{1 - 3g_0^2 V^2} + \frac{g_0 - g_0^3 V^2 + 2g_0^2 V}{1 - 3g_0^2 V^2} \frac{2g_0^3 V^3 G_{23}^B}{g_0 - g_0^3 V^2 + 2g_0^2 V} + \frac{g_0 - g_0^3 V^2 + 2g_0^2 V}{1 - 3g_0^2 V^2} \frac{g_0^2 V^2 G_{22}^D}{g_0 - g_0^3 V^2 + 2g_0^2 V} + \frac{g_0 - g_0^3 V^2 + 2g_0^2 V}{1 - 3g_0^2 V^2} \frac{(g_0 V - g_0^3 V^3) G_{21}^B}{1 - 3g_0^2 V^2}, \quad (\text{B-63})$$

con

$$V_2 = \frac{g_0 V - g_0^3 V^3}{1 - 3g_0^2 V^2} \quad (\text{B-64})$$

entonces

$$G_{22}^B = g_1 + g_1 V_1 G_{23}^B + g_1 V_3 G_{22}^D + g_1 V_2 G_{21}^B \quad (\text{B-65})$$

Sitio B3

$$G_{33}^A = g_0 + g_0 V G_{33}^B + g_0 V G_{32}^A + g_0 V G_{33}^D, \quad (\text{B-66})$$

$$G_{33}^B = g_0 + g_0 V G_{33}^C + g_0 V G_{33}^A, \quad (\text{B-67})$$

$$G_{33}^C = g_0 + g_0 V G_{33}^B + g_0 V G_{32}^C. \quad (\text{B-68})$$

su usa nuevamente la ecuación (2 - 90) para encontrar G_{32}^A , G_{32}^C .

$$G_{32}^A = g_0 V G_{33}^A + g_0 V G_{32}^B, \quad (\text{B-69})$$

$$G_{32}^C = g_0 V G_{33}^C + g_0 V G_{32}^B. \quad (\text{B-70})$$

Para enviar todo al sitio B3, es necesario encontrar la función de G_{33}^B y sus interacciones con los primeros vecinos. Para esto, reemplaza (B-69) y (B-70) en (B-66) y (B-68), respectivamente. Reemplazando (B-69) en (B-66).

$$G_{33}^A = g_0 + g_0 V G_{33}^B + g_0 V (g_0 V G_{32}^B + g_0 V G_{33}^A) + g_0 V G_{33}^D, \quad (\text{B-71})$$

$$G_{33}^A = g_0 + g_0 V G_{33}^B + g_0^2 V^2 G_{32}^B + g_0^2 V^2 G_{33}^A + g_0 V G_{33}^D, \quad (\text{B-72})$$

$$G_{33}^A (1 - g_0^2 V^2) = g_0 + g_0 V G_{33}^B + g_0^2 V^2 G_{32}^B + g_0 V G_{33}^D, \quad (\text{B-73})$$

$$G_{33}^A = \frac{g_0 + g_0 V G_{33}^B + g_0^2 V^2 G_{32}^B + g_0 V G_{33}^D}{1 - g_0^2 V^2}, \quad (\text{B-74})$$

ahora (B-70) y (B-68)

$$G_{33}^C = g_0 + g_0V (g_0VG_{32}^B + g_0VG_{33}^c) + g_0VG_{33}^B, \quad (\text{B-75})$$

$$G_{33}^C = g_0 + g_0^2V^2G_{32}^B + g_0^2V^2G_{33}^C + g_0VG_{33}^B, \quad (\text{B-76})$$

$$G_{33}^c (1 - g_0^2V^2) = g_0 + g_0^2V^2G_{32}^B + g_0VG_{33}^B, \quad (\text{B-77})$$

$$G_{33}^C = \frac{g_0 + g_0^2V^2G_{32}^B + g_0VG_{33}^B}{1 - g_0^2V^2}, \quad (\text{B-78})$$

Se reemplaza (B-79) y (B-74) en (B-67)

$$G_{33}^B = g_0 + g_0V \left(\frac{g_0 + g_0^2V^2G_{32}^B + g_0VG_{33}^B + g_0VG_{33}^D}{1 - g_0^2V^2} \right) + g_0V \left(\frac{g_0 + g_0^2V^2G_{32}^B + g_0VG_{33}^B}{1 - g_0^2V^2} \right), \quad (\text{B-79})$$

$$G_{33}^B = \frac{g_0 - g_0^3V^2 + 2g_0^2V + 2g_0^2V^2G_{33}^B + 2g_0^3V^3G_{32}^B + g_0^2V^2G_{33}^D}{1 - g_0^2V^2}, \quad (\text{B-80})$$

$$G_{33}^B - g_0^2V^2G_{33}^B - 2g_0^2V^2G_{33}^B = g_0 - g_0^3V^2 + 2g_0^2V + 2g_0^3V^3G_{32}^B + g_0^2V^2G_{33}^D, \quad (\text{B-81})$$

$$G_{33}^B (1 - 3g_0^2V^2) = g_0 - g_0^3V^2 + 2g_0^2V + 2g_0^3V^3G_{32}^B + g_0^2V^2G_{33}^D, \quad (\text{B-82})$$

$$G_{33}^B = \frac{g_0 - g_0^3V^2 + 2g_0^2V}{1 - 3g_0^2V^2} + \frac{2g_0^3V^3G_{32}^B}{1 - 3g_0^2V^2} + \frac{g_0^2V^2G_{33}^D}{1 - 3g_0^2V^2}, \quad (\text{B-83})$$

Se multiplica y divide la segunda y tercera fracción por: $g_0 - g_0^3V^2 + 2g_0^2V$.

$$G_{33}^B = \frac{g_0 - g_0^3V^2 + 2g_0^2V}{1 - 3g_0^2V^2} + \frac{g_0 - g_0^3V^2 + 2g_0^2V}{1 - 3g_0^2V^2} \frac{2g_0^3V^3G_{32}^B}{g_0 - g_0^3V^2 + 2g_0^2V} + \frac{g_0 - g_0^3V^2 + 2g_0^2V}{1 - 3g_0^2V^2} \frac{g_0^2V^2G_{33}^D}{g_0 - g_0^3V^2 + 2g_0^2V}, \quad (\text{B-84})$$

entonces:

$$G_{33}^B = g_1 + g_1V_1G_{32}^B + g_1V_3G_{33}^D, \quad (\text{B-85})$$

Sitio B0

$$G_{00}^A = g_0 + g_0VG_{00}^D + g_0VG_{01}^A + g_0VG_{00}^B, \quad (\text{B-86})$$

$$G_{00}^D = g_0 + g_0VG_{00}^E + g_0VG_{00}^A, \quad (\text{B-87})$$

$$G_{00}^E = g_0 + g_0VG_{00}^D + g_0VG_{01}^C. \quad (\text{B-88})$$

su usa nuevamente la ecuación (2 - 90) para encontrar G_{01}^A , G_{01}^E .

$$G_{01}^A = g_0VG_{00}^A + g_0VG_{01}^D, \quad (\text{B-89})$$

$$G_{01}^E = g_0 V G_{00}^E + g_0 V G_{01}^D. \quad (\text{B-90})$$

Para enviar todo al sitio D0, es necesario encontrar la función de G_{00}^D y sus interacciones con los primeros vecinos. Para esto, reemplaza (B-89) y (B-90) en (B-86) y (B-88), respectivamente. Reemplazando (B-89) en (B-86).

$$G_{00}^A = g_0 + g_0 V G_{00}^D + g_0 V (g_0 V G_{01}^D + g_0 V G_{00}^A) + g_0 V G_{00}^B, \quad (\text{B-91})$$

$$G_{00}^A = g_0 + g_0 V G_{00}^D + g_0^2 V^2 G_{01}^D + g_0^2 V^2 G_{00}^A + g_0 V G_{00}^B, \quad (\text{B-92})$$

$$G_{00}^A (1 - g_0^2 V^2) = g_0 + g_0 V G_{00}^D + g_0^2 V^2 G_{01}^D + g_0 V G_{00}^B, \quad (\text{B-93})$$

$$G_{00}^A = \frac{g_0 + g_0 V G_{00}^D + g_0^2 V^2 G_{01}^D + g_0 V G_{00}^B}{1 - g_0^2 V^2}, \quad (\text{B-94})$$

ahora (B-90) y (B-88)

$$G_{00}^E = g_0 + g_0 V (g_0 V G_{01}^D + g_0 V G_{00}^E) + g_0 V G_{00}^D, \quad (\text{B-95})$$

$$G_{00}^E = g_0 + g_0^2 V^2 G_{01}^D + g_0^2 V^2 G_{00}^E + g_0 V G_{00}^D, \quad (\text{B-96})$$

$$G_{00}^E (1 - g_0^2 V^2) = g_0 + g_0^2 V^2 G_{01}^D + g_0 V G_{00}^D, \quad (\text{B-97})$$

$$G_{00}^E = \frac{g_0 + g_0^2 V^2 G_{01}^D + g_0 V G_{00}^D}{1 - g_0^2 V^2}, \quad (\text{B-98})$$

Se reemplaza (B-98) y (B-94) en (B-87)

$$G_{00}^D = g_0 + g_0 V \left(\frac{g_0 + g_0^2 V^2 G_{01}^D + g_0 V G_{00}^D + g_0 V G_{00}^B}{1 - g_0^2 V^2} \right) + g_0 V \left(\frac{g_0 + g_0^2 V^2 G_{01}^D + g_0 V G_{00}^D}{1 - g_0^2 V^2} \right), \quad (\text{B-99})$$

$$G_{00}^D = \frac{g_0 - g_0^3 V^2 + 2g_0^2 V + 2g_0^2 V^2 G_{00}^D + 2g_0^3 V^3 G_{01}^D + g_0^2 V^2 G_{00}^B}{1 - g_0^2 V^2}, \quad (\text{B-100})$$

$$G_{00}^D - g_0^2 V^2 G_{00}^D - 2g_0^2 V^2 G_{00}^D = g_0 - g_0^3 V^2 + 2g_0^2 V + 2g_0^3 V^3 G_{01}^D + g_0^2 V^2 G_{00}^B, \quad (\text{B-101})$$

$$G_{00}^D (1 - 3g_0^2 V^2) = g_0 - g_0^3 V^2 + 2g_0^2 V + 2g_0^3 V^3 G_{01}^D + g_0^2 V^2 G_{00}^B, \quad (\text{B-102})$$

$$G_{00}^D = \frac{g_0 - g_0^3 V^2 + 2g_0^2 V}{1 - 3g_0^2 V^2} + \frac{2g_0^3 V^3 G_{01}^D}{1 - 3g_0^2 V^2} + \frac{g_0^2 V^2 G_{00}^B}{1 - 3g_0^2 V^2}, \quad (\text{B-103})$$

Se multiplica y divide la segunda y tercera fracción por: $g_0 - g_0^3 V^2 + 2g_0^2 V$.

$$G_{00}^D = \frac{g_0 - g_0^3 V^2 + 2g_0^2 V}{1 - 3g_0^2 V^2} + \frac{g_0 - g_0^3 V^2 + 2g_0^2 V}{1 - 3g_0^2 V^2} \frac{2g_0^3 V^3 G_{01}^D}{g_0 - g_0^3 V^2 + 2g_0^2 V} + \frac{g_0 - g_0^3 V^2 + 2g_0^2 V}{1 - 3g_0^2 V^2} \frac{g_0^2 V^2 G_{00}^B}{g_0^3 - g_0^3 V^2 + 2g_0^2 V}, \quad (\text{B-104})$$

entonces:

$$G_{00}^D = g_1 + g_1 V_1 G_{01}^D + g_1 V_3 G_{00}^B, \quad (\text{B-105})$$

Sitio B1

$$G_{11}^A = g_0 + g_0 V G_{11}^D + g_0 V G_{10}^A + g_0 V G_{11}^B, \quad (\text{B-106})$$

$$G_{11}^D = g_0 + g_0 V G_{11}^E + g_0 V G_{11}^A + g_0 V G_{12}^D, \quad (\text{B-107})$$

$$G_{11}^E = g_0 + g_0 V G_{11}^D + g_0 V G_{10}^E. \quad (\text{B-108})$$

Volvemos a utilizar la ecuación (2 – 90) para encontrar G_{10}^A , G_{10}^E .

$$G_{10}^A = g_0 V G_{11}^A + g_0 V G_{10}^D, \quad (\text{B-109})$$

$$G_{10}^E = g_0 V G_{11}^E + g_0 V G_{10}^D. \quad (\text{B-110})$$

Se reemplaza (B-109) en (B-106).

$$G_{11}^A = g_0 + g_0 V (g_0 V G_{11}^A + g_0 V G_{10}^D) + g_0 V G_{11}^D + g_0 V G_{11}^B, \quad (\text{B-111})$$

$$G_{11}^A = g_0 + g_0^2 V^2 G_{11}^A + g_0^2 V^2 G_{10}^D + g_0 V G_{11}^D + g_0 V G_{11}^B, \quad (\text{B-112})$$

$$G_{11}^A (1 - g_0^2 V^2) = g_0 + g_0^2 V^2 G_{10}^D + g_0 V G_{11}^D + g_0 V G_{11}^B, \quad (\text{B-113})$$

$$G_{11}^A = \frac{g_0 + g_0^2 V^2 G_{10}^D + g_0 V G_{11}^D + g_0 V G_{11}^B}{1 - g_0^2 V^2}. \quad (\text{B-114})$$

Ahora (B-110) en (B-108).

$$G_{11}^E = g_0 + g_0 V (g_0 V G_{11}^E + g_0 V G_{10}^D) + g_0 V G_{11}^D \quad (\text{B-115})$$

$$G_{11}^E = g_0 + g_0^2 V^2 G_{11}^E + g_0^2 V^2 G_{10}^D + g_0 V G_{11}^D \quad (\text{B-116})$$

$$G_{11}^E (1 - g_0^2 V^2) = g_0 + g_0^2 V^2 G_{10}^D + g_0 V G_{11}^D \quad (\text{B-117})$$

$$G_{11}^E = \frac{g_0 + g_0^2 V^2 G_{10}^D + g_0 V G_{11}^D}{1 - g_0^2 V^2} \quad (\text{B-118})$$

se sustituye (B-114) y (B-118) en (B-107)

$$G_{11}^D = g_0 + g_0 V \left(\frac{g_0 + g_0^2 V^2 G_{10}^D + g_0 V G_{11}^D + g_0 V G_{11}^B}{1 - g_0^2 V^2} \right) + g_0 V \left(\frac{g_0 + g_0^2 V^2 G_{10}^D + g_0 V G_{11}^D}{1 - g_0^2 V^2} \right) + g_0 V G_{12}^D, \quad (\text{B-119})$$

$$G_{11}^D = \frac{g_0 - g_0^3 V^2 + 2g_0^2 V + 2g_0^2 V^2 G_{11}^D + 2g_0^3 V^3 G_{10}^D + g_0^2 V^2 G_{11}^B + g_0 V G_{12}^D - g_0^3 V^3 G_{12}^D}{1 - g_0^2 V^2}, \quad (\text{B-120})$$

$$G_{11}^D - g_0^2 V^2 G_{11}^D - 2g_0^2 V^2 G_{11}^D = g_0 - g_0^3 V^2 + 2g_0^2 V + 2g_0^3 V^3 G_{10}^D + g_0^2 V^2 G_{11}^B + g_0 V G_{12}^D - g_0^3 V^3 G_{12}^D, \quad (\text{B-121})$$

$$G_{11}^D (1 - 3g_0^2 v^2) = g_0 - g_0^3 v^2 + 2g_0^2 V + 2g_0^3 V^3 G_{10}^D + g_0^2 V^2 G_{11}^B + g_0 V G_{12}^D - g_0^3 V^3 G_{12}^D, \quad (\text{B-122})$$

$$G_{11}^D = \frac{g_0 - g_0^3 V^2 + 2g_0^2 V}{1 - 3g_0^2 V^2} + \frac{2g_0^3 V^3 G_{10}^D}{1 - 3g_0^2 V^2} + \frac{g_0^2 V^2 G_{11}^B}{1 - 3g_0^2 V^2} + \frac{(g_0 V - g_0^3 V^3) G_{12}^D}{1 - 3g_0^2 V^2}, \quad (\text{B-123})$$

Se multiplica y divide la segunda y tercera fracción por: $g_0 - g_0^3 V^2 + 2g_0^2 V$.

$$G_{11}^D = \frac{g_0 - g_0^3 V^2 + 2g_0^2 V}{1 - 3g_0^2 V^2} + \frac{g_0 - g_0^3 V^2 + 2g_0^2 V}{1 - 3g_0^2 V^2} \frac{2g_0^3 V^3 G_{10}^C}{g_0 - g_0^3 V^2 + 2g_0 V} + \frac{g_0 - g_0^3 V^2 + 2g_0^2 V}{1 - 3g_0^2 V^2} \frac{g_0^2 V^2 G_{11}^B}{g_0^3 - g_0^3 V^2 + 2g_0^2 V} + \frac{g_0 - g_0^3 V^2 + 2g_0^2 V}{1 - 3g_0^2 V^2} \frac{(g_0 V - g_0^3 V^3) G_{12}^D}{1 - 3g_0^2 V^2}, \quad (\text{B-124})$$

entonces

$$G_{11}^D = g_1 + g_1 V_1 G_{10}^D + g_1 V_3 G_{11}^B + g_1 V_2 G_{12}^D \quad (\text{B-125})$$

Sitio 2

$$G_{22}^A = g_0 + g_0 V G_{22}^D + g_0 V G_{23}^A + g_0 V G_{22}^B, \quad (\text{B-126})$$

$$G_{22}^D = g_0 + g_0 V G_{22}^E + g_0 V G_{22}^A + g_0 V G_{21}^D, \quad (\text{B-127})$$

$$G_{22}^E = g_0 + g_0 V G_{22}^D + g_0 V G_{23}^E. \quad (\text{B-128})$$

Volvemos a utilizar la ecuación (2 – 90) para encontrar G_{23}^A , G_{23}^E .

$$G_{23}^A = g_0 V G_{22}^A + g_0 V G_{23}^D, \quad (\text{B-129})$$

$$G_{23}^E = g_0 V G_{22}^E + g_0 V G_{23}^D. \quad (\text{B-130})$$

Se reemplaza (B-129) en (B-126).

$$G_{22}^A = g_0 + g_0 V (g_0 V G_{22}^A + g_0 V G_{23}^D) + g_0 V G_{22}^D + g_0 V G_{22}^B, \quad (\text{B-131})$$

$$G_{22}^A = g_0 + g_0^2 V^2 G_{22}^A + g_0^2 V^2 G_{23}^D + g_0 V G_{22}^D + g_0 V G_{22}^B, \quad (\text{B-132})$$

$$G_{22}^A (1 - g_0^2 V^2) = g_0 + g_0^2 V^2 G_{23}^D + g_0 V G_{22}^D + g_0 V G_{22}^B, \quad (\text{B-133})$$

$$G_{22}^A = \frac{g_0 + g_0^2 V^2 G_{23}^D + g_0 V G_{22}^D + g_0 V G_{22}^B}{1 - g_0^2 V^2}. \quad (\text{B-134})$$

Ahora (B-130) en (B-128).

$$G_{22}^E = g_0 + g_0 V (g_0 V G_{22}^E + g_0 V G_{23}^D) + g_0 V G_{22}^D \quad (\text{B-135})$$

$$G_{22}^E = g_0 + g_0^2 V^2 G_{22}^E + g_0^2 V^2 G_{23}^D + g_0 V G_{22}^D \quad (\text{B-136})$$

$$G_{22}^E (1 - g_0^2 V^2) = g_0 + g_0^2 V^2 G_{23}^D + g_0 V G_{22}^D \quad (\text{B-137})$$

$$G_{22}^E = \frac{g_0 + g_0^2 V^2 G_{23}^D + g_0 V G_{22}^D}{1 - g_0^2 V^2} \quad (\text{B-138})$$

se sustituye (B-138) y (B-134) en (B-127)

$$G_{22}^D = g_0 + g_0 V \left(\frac{g_0 + g_0^2 V^2 G_{23}^D + g_0 V G_{22}^D + g_0 V G_{22}^B}{1 - g_0^2 V^2} \right) + g_0 V \left(\frac{g_0 + g_0^2 V^2 G_{23}^D + g_0 V G_{22}^D}{1 - g_0^2 V^2} \right) + g_0 V G_{21}^D, \quad (\text{B-139})$$

$$G_{22}^D = \frac{g_0 - g_0^3 V^2 + 2g_0^2 V + 2g_0^2 V^2 G_{22}^D + 2g_0^3 V^3 G_{23}^D + g_0^2 V^2 G_{22}^B + g_0 V G_{21}^D - g_0^3 V^3 G_{21}^D}{1 - g_0^2 V^2}, \quad (\text{B-140})$$

$$G_{22}^D - g_0^2 V^2 G_{11}^D - 2g_0^2 V^2 G_{22}^D = g_0 - g_0^3 V^2 + 2g_0^2 V + 2g_0^3 V^3 G_{23}^D + g_0^2 V^2 G_{22}^B + g_0 V G_{21}^B - g_0^3 V^3 G_{21}^D, \quad (\text{B-141})$$

$$G_{22}^D (1 - 3g_0^2 V^2) = g_0 - g_0^3 V^2 + 2g_0^2 V + 2g_0^3 V^3 G_{23}^D + g_0^2 V^2 G_{22}^B + g_0 V G_{21}^D - g_0^3 V^3 G_{12}^D, \quad (\text{B-142})$$

$$G_{22}^D = \frac{g_0 - g_0^3 V^2 + 2g_0^2 V}{1 - 3g_0^2 V^2} + \frac{2g_0^3 V^3 G_{23}^D}{1 - 3g_0^2 V^2} + \frac{g_0^2 V^2 G_{22}^B}{1 - 3g_0^2 V^2} + \frac{(g_0 V - g_0^3 V^3) G_{21}^D}{1 - 3g_0^2 V^2}, \quad (\text{B-143})$$

Se multiplica y divide la segunda y tercera fracción por: $g_0 - g_0^3 V^2 + 2g_0^2 V$.

$$G_{22}^D = \frac{g_0 - g_0^3 V^2 + 2g_0^2 V}{1 - 3g_0^2 V^2} + \frac{g_0 - g_0^3 V^2 + 2g_0^2 V}{1 - 3g_0^2 V^2} \frac{2g_0^3 V^3 G_{23}^D}{g_0 - g_0^3 V^2 + 2g_0^2 V} + \frac{g_0 - g_0^3 V^2 + 2g_0^2 V}{1 - 3g_0^2 V^2} \frac{g_0^2 V^2 G_{22}^B}{g_0^3 - g_0^3 V^2 + 2g_0^2 V} + \frac{g_0 - g_0^3 V^2 + 2g_0^2 V}{1 - 3g_0^2 V^2} \frac{(g_0 V - g_0^3 V^3) G_{21}^D}{1 - 3g_0^2 V^2}, \quad (\text{B-144})$$

entonces

$$G_{22}^D = g_1 + g_1 V_1 G_{23}^D + g_1 V_3 G_{22}^B + g_1 V_2 G_{21}^D \quad (\text{B-145})$$

Sitio B3

$$G_{33}^A = g_0 + g_0 V G_{33}^D + g_0 V G_{32}^A + g_0 V G_{33}^B, \quad (\text{B-146})$$

$$G_{33}^D = g_0 + g_0 V G_{33}^E + g_0 V G_{33}^A, \quad (\text{B-147})$$

$$G_{33}^E = g_0 + g_0 V G_{33}^D + g_0 V G_{32}^E. \quad (\text{B-148})$$

su usa nuevamente la ecuación (2 - 90) para encontrar G_{32}^A, G_{32}^E .

$$G_{32}^A = g_0 V G_{33}^A + g_0 V G_{32}^D, \quad (\text{B-149})$$

$$G_{32}^E = g_0 V G_{33}^E + g_0 V G_{32}^D. \quad (\text{B-150})$$

Para enviar todo al sitio B3, es necesario encontrar la función de G_{33}^B y sus interacciones con los primeros vecinos. Para esto, reemplaza (B-149) y (B-150) en (B-146) y (B-148), respectivamente. Reemplazando (B-149) en (B-146).

$$G_{33}^A = g_0 + g_0V G_{33}^D + g_0V (g_0V G_{32}^D + g_0V G_{33}^A) + g_0V G_{33}^B, \quad (\text{B-151})$$

$$G_{33}^A = g_0 + g_0V G_{33}^D + g_0^2V^2 G_{32}^D + g_0^2V^2 G_{33}^A + g_0V G_{33}^B, \quad (\text{B-152})$$

$$G_{33}^A (1 - g_0^2V^2) = g_0 + g_0V G_{33}^D + g_0^2V^2 G_{32}^D + g_0V G_{33}^B, \quad (\text{B-153})$$

$$G_{33}^A = \frac{g_0 + g_0V G_{33}^D + g_0^2V^2 G_{32}^D + g_0V G_{33}^B}{1 - g_0^2V^2}, \quad (\text{B-154})$$

ahora (B-150) y (B-148)

$$G_{33}^E = g_0 + g_0V (g_0V G_{32}^D + g_0V G_{33}^E) + g_0V G_{33}^D, \quad (\text{B-155})$$

$$G_{33}^E = g_0 + g_0^2V^2 G_{32}^D + g_0^2V^2 G_{33}^E + g_0V G_{33}^D, \quad (\text{B-156})$$

$$G_{33}^E (1 - g_0^2V^2) = g_0 + g_0^2V^2 G_{32}^D + g_0V G_{33}^D, \quad (\text{B-157})$$

$$G_{33}^E = \frac{g_0 + g_0^2V^2 G_{32}^D + g_0V G_{33}^D}{1 - g_0^2V^2}, \quad (\text{B-158})$$

Se reemplaza (B-158) y (B-154) en (B-147)

$$G_{33}^D = g_0 + g_0V \left(\frac{g_0 + g_0^2V^2 G_{32}^D + g_0V G_{33}^D + g_0V G_{33}^B}{1 - g_0^2V^2} \right) + g_0V \left(\frac{g_0 + g_0^2V^2 G_{32}^D + g_0V G_{33}^D}{1 - g_0^2V^2} \right), \quad (\text{B-159})$$

$$G_{33}^D = \frac{g_0 - g_0^3V^2 + 2g_0^2V + 2g_0^2V^2 G_{33}^D + 2g_0^3V^3 G_{32}^D + g_0^2V^2 G_{33}^B}{1 - g_0^2V^2}, \quad (\text{B-160})$$

$$G_{33}^D - g_0^2V^2 G_{33}^D - 2g_0^2V^2 G_{33}^D = g_0 - g_0^3V^2 + 2g_0^2V + 2g_0^3V^3 G_{32}^D + g_0^2V^2 G_{33}^B, \quad (\text{B-161})$$

$$G_{33}^D (1 - 3g_0^2V^2) = g_0 - g_0^3V^2 + 2g_0^2V + 2g_0^3V^3 G_{32}^D + g_0^2V^2 G_{33}^B, \quad (\text{B-162})$$

$$G_{33}^D = \frac{g_0 - g_0^3V^2 + 2g_0^2V}{1 - 3g_0^2V^2} + \frac{2g_0^3V^3 G_{32}^D}{1 - 3g_0^2V^2} + \frac{g_0^2V^2 G_{33}^B}{1 - 3g_0^2V^2}, \quad (\text{B-163})$$

Se multiplica y divide la segunda y tercera fracción por: $g_0 - g_0^3V^2 + 2g_0^2V$.

$$G_{33}^D = \frac{g_0 - g_0^3V^2 + 2g_0^2V}{1 - 3g_0^2V^2} + \frac{g_0 - g_0^3V^2 + 2g_0^2V}{1 - 3g_0^2V^2} \frac{2g_0^3V^3 G_{32}^D}{g_0 - g_0^3V^2 + 2g_0^2V} + \frac{g_0 - g_0^3V^2 + 2g_0^2V}{1 - 3g_0^2V^2} \frac{g_0^2V^2 G_{33}^B}{g_0 - g_0^3V^2 + 2g_0^2V}, \quad (\text{B-164})$$

entonces:

$$G_{33}^D = g_1 + g_1V_1 G_{32}^D + g_1V_3 G_{33}^B, \quad (\text{B-165})$$

Terminada la primer decimación el sistema se reduce a la siguiente forma.

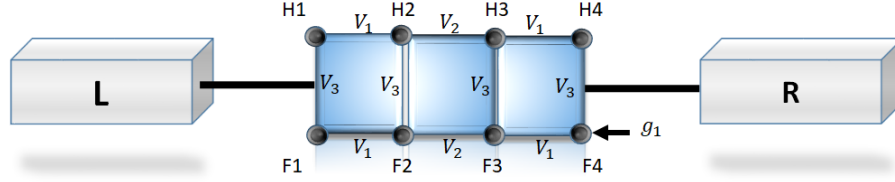


Figura B-3.: Primera decimación de la nanocinta de grafeno tipo brazo de silla con sitios renombrados y sus nuevas energías de acople V_1 , V_2 , V_3 y su nueva función de Green g_1

Realizamos una segunda decimación, para esta llevaremos la información de los sitios F1, F2, F3 y F4 a los sitios H1, H2, H3 y H4 respectivamente.

Se recurre nuevamente a la ecuación (2-90) para encontrar las funciones de los nuevos sitios.

Sitio H1

$$G_{11}^H = g_1 + g_1 V_3 (g_1 + g_1 V_3 G_{11}^H) + g_1 V_1 G_{12}^H, \quad (\text{B-166})$$

$$G_{11}^H = g_1 + g_1^2 V_3 + g_1^2 V_3^2 G_{11}^H + g_1 V_1 G_{12}^H, \quad (\text{B-167})$$

$$G_{11}^H - g_1^2 V_3^2 = g_1 + g_1^2 V_3 + g_1 V_1 G_{12}^H, \quad (\text{B-168})$$

$$G_{11}^H (1 - g_1^2 V_3^2) = g_1 + g_1^2 V_3 + g_1 V_1 G_{12}^H, \quad (\text{B-169})$$

$$G_{11}^H = \frac{g_1 + g_1^2 V_3}{1 - g_1^2 V_3^2} + \frac{g_1 V_1 G_{12}^H}{1 - g_1^2 V_3^2}, \quad (\text{B-170})$$

donde

$$\frac{g_1 + g_1^2 V_3}{1 - g_1^2 V_3^2} = g_2, \quad (\text{B-171})$$

por lo cual

$$G_{11}^H = g_2 + \frac{g_1 V_1 G_{12}^H}{1 - g_1^2 V_3^2}, \quad (\text{B-172})$$

Multiplicamos y dividimos la segunda fracción por, $g_1 + g_1^2 V_3$

$$G_{11}^H = g_2 + \frac{g_1 + g_1^2 V_3}{1 - g_1^2 V_3^2} \frac{g_1 V_1 G_{12}^H}{g_1 + g_1^2 V_3}, \quad (\text{B-173})$$

con

$$\frac{g_1 V_1}{g_1 + g_1^2 V_3} = V_4, \quad (\text{B-174})$$

entonces

$$G_{11}^H = g_2 + g_2 V_4 G_{12}^H \quad (\text{B-175})$$

Sitio H2

$$G_{22}^H = g_1 + g_1 V_1 G_{2\pi}^H + g_1 V_2 G_{23}^H + g_1 V_3 G_{22}^F, \quad (\text{B-176})$$

$$G_{22}^F = g_1 + g_1 V_3 G_{22}^H, \quad (\text{B-177})$$

$$G_{22}^H = g_1 + g_1 V_1 G_{21}^H + g_1 V_2 G_{23}^H + g_1 V_3 (g_1 + g_1 V_3 G_{22}^H), \quad (\text{B-178})$$

$$G_{22}^H = g_1 + g_1 V_1 G_{21}^H + g_1 V_2 G_{23}^H + g_1^2 V_3 + g_1^2 V_3^2 G_{22}^H, \quad (\text{B-179})$$

$$G_{22}^H - g_1^2 V_3^2 G_{22}^H = g_1 + g_1 V_1 G_{21}^H + g_1 V_2 G_{23}^H + g_1^2 V_3, \quad (\text{B-180})$$

$$G_{22}^H (1 - g_1^2 V_3^2) = g_1 + g_1^2 V_3 + g_1 V_1 G_{21}^H + g_1 V_2 G_{23}^H, \quad (\text{B-181})$$

$$G_{22}^H = \frac{g_1 + g_1^2 V_3}{1 - g_1^2 V_3^2} + \frac{g_1 + g_1^2 V_3}{1 - g_1^2 V_3^2} \cdot \frac{g_1 V_1}{g_1 + g_1^2 V_3} G_{21}^H + \frac{g_1 + g_1^2 V_3}{1 - g_1^2 V_3^2} \cdot \frac{g_1 V_2}{g_1 + g_1^2 V_3^H} G_{23}^H, \quad (\text{B-182})$$

donde

$$\frac{g_1 V_2}{g_1 + g_1^2 V_3} = V_5, \quad (\text{B-183})$$

entonces

$$G_{22}^H = g_2 + g_2 V_4 G_{21}^H + g_2 V_5 G_{23}^H. \quad (\text{B-184})$$

Sitio H3

$$G_{33}^H = g_1 + g_1 V_3 G_{33}^F + g_1 V_2 G_{32}^H + g_1 V_1 G_{31}^H \quad (\text{B-185})$$

$$G_{33}^F = g_1 + g_1 V_3 G_{33}^H \quad (\text{B-186})$$

$$G_{33}^H = g_1 + g_1 V_3 (g_1 + g_1 V_3 G_{33}^H) + g_1 V_2 G_{32}^H + g_1 V_1 G_{34}^H \quad (\text{B-187})$$

$$G_{33}^H = g_1 + g_1^2 V_3 + g_1^2 V_3^2 G_{33}^H + g_1 V_2 G_{32}^H + g_1 V_1 G_{34}^H \quad (\text{B-188})$$

$$G_{33}^H - g_1^2 V_3^2 G_{33}^H = g_1 + g_1^2 V_3 + g_1 V_2 G_{32}^H + g_1 V_1 G_{34}^H \quad (\text{B-189})$$

$$G_{33}^H (1 - g_1^2 V_3^2) = g_1 + g_1^2 V_3 + g_1 V_2 G_{32}^H + g_1 V_1 G_{34}^H \quad (\text{B-190})$$

$$G_{33}^H = \frac{g_1 + g_1^2 V_3}{1 - g_1^2 V_3^2} + \frac{g_1 + g_1^2 V_3}{1 - g_1^2 V_3^2} \frac{g_1 V_2}{g_1 + g_1^2 V_3} G_{32}^H + \frac{g_1 + g_1^2 V_3}{1 - g_1^2 V_3^2} \frac{g_1 V_1}{g_1 + g_1^2 V_3} G_{34}^H \quad (\text{B-191})$$

$$G_{33}^H = g_2 + g_2 V_5 G_{32}^H + g_2 V_4 G_{34}^H \quad (\text{B-192})$$

Sitio H4

$$G_{44}^H = g_1 + g_1 V_1 G_{43}^H + g_1 V_3 G_{41}^F, \quad (\text{B-193})$$

$$G_{44}^F = g_1 + g_1 V_3 G_{44}^H, \quad (\text{B-194})$$

$$G_{44}^H = g_1 + g_1 V_1 G_{43}^H + g_1 V_3 (g_1 + g_1 V_3 G_{44}^H), \quad (\text{B-195})$$

$$G_{44}^H = g_1 + g_1 V_1 G_{43}^H + g_1^2 V_3 + g_1^2 V_3^2 G_{44}^H, \quad (\text{B-196})$$

$$G_{44}^H - g_1^2 V_3^2 G_{44}^H = g_1 + g_1 V_1 G_{43}^H + g_1^2 V_3, \quad (\text{B-197})$$

$$G_{44}^H (1 - g_1^2 V_3^2) = g_1 + g_1 V_1 G_{43}^H + g_1^2 V_3, \quad (\text{B-198})$$

$$G_{44}^H = \frac{g_1 + g_1^2 V_3}{1 - g_1^2 V_3^2} + \frac{g_1 + g_1^2 V_3}{1 - g_1^2 V_3^2} \cdot \frac{g_1 V_1}{g_1 + g_1^2 V_3} G_{43}^H, \quad (\text{B-199})$$

$$G_{44}^H = g_2 + g_2 V_4 G_{43}^H. \quad (\text{B-200})$$

Finalmente tendremos el sistema decimado de la siguiente forma.

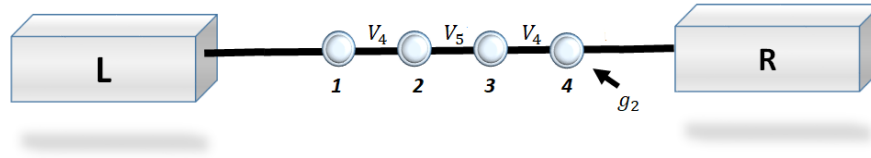


Figura B-4.: Nanocinta decimada con nuevas energías efectivas de acople V_4 , V_5 y función de Green g_2

La figura **B-4** muestra la forma lineal, correspondiente a la decimación de una nanocinta de grafeno tipo brazo de silla con dos anillos de longitud y uno de ancho.

C. Anexo: Decimación de una nanocinta de grafeno tipo Zig - Zag con dos anillo de ancho y tres de longitud

A continuación, se realiza el proceso de decimación para una nanocinta de grafeno tipo zig-zag, la cual presenta una longitud de dos anillos y uno de ancho que consta de dos anillos de longitud, tal como se ilustra en la figura C-1

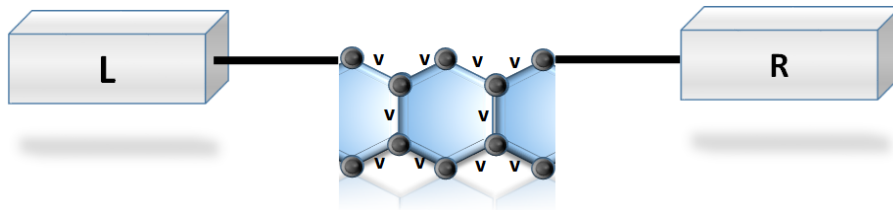


Figura C-1.: Nanocinta de grafeno tipo Zig Zag con un ancho de un anillo y dos de longitud.

Renombramos los sitios como en los anexos anteriores.

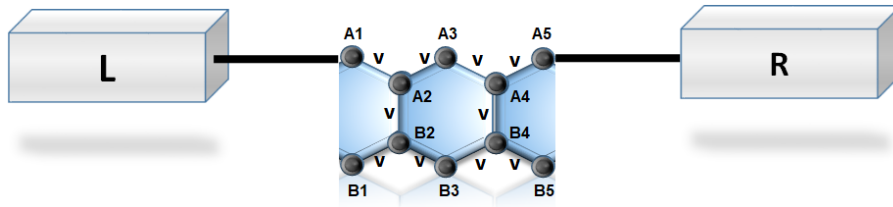


Figura C-2.: Nanocinta de grafeno tipo zig-zag con los sitios renombrados .

Ahora usaremos la ecuación (2-90) para encontrar las funciones de los sitios A2, A4, B2 y B4.

Sitio A2

$$G_{22}^A = g_0 + g_0 V G_{21}^A + g_0 V G_{23}^A + g_0 V G_{22}^B, \quad (C-1)$$

$$G_{21}^A = g_0 V G_{22}^A, \quad (C-2)$$

$$G_{23}^A = g_0 V G_{22}^A + g_0 V G_{24}^A. \quad (C-3)$$

Reemplazando (C-2) y (C-3) en (C-1).

$$G_{22}^A = g_0 + g_0 V (g_0 V G_{22}^A) + g_0 V (g_0 V G_{22}^A + g_0 V G_{24}^A) + g_0 V G_{22}^B, \quad (C-4)$$

$$G_{22}^A = g_0 + g_0^2 V^2 G_{22}^A + g_0^2 V^2 G_{22}^A + g_0^2 V^2 G_{24}^A + g_0 V G_{22}^B, \quad (C-5)$$

$$G_{22}^A = g_0 + 2g_0^2 V^2 G_{22}^A + g_0^2 V^2 G_{24}^A + g_0 V G_{22}^B, \quad (C-6)$$

$$G_{22}^A - 2g_0^2 V^2 G_{22}^A = g_0 + g_0^2 V^2 G_{24}^A + g_0 V G_{22}^B, \quad (C-7)$$

$$G_{22}^A (1 - 2g_0^2 V^2) = g_0 + g_0^2 V^2 G_{24}^A + g_0 V G_{22}^B, \quad (C-8)$$

$$G_{22}^A = \frac{g_0}{1 - 2g_0^2 V^2} + \frac{g_0}{1 - 2g_0^2 V^2} g_0 V^2 G_{24}^A + \frac{g_0}{1 - 2g_0^2 V^2} V G_{22}^B, \quad (C-9)$$

donde

$$g_0 V^2 = \tau, \quad (C-10)$$

$$\frac{g_0}{1 - 2g_0^2 V^2} = g_5, \quad (C-11)$$

entonces

$$G_{22}^A = g_5 + g_5 \tau G_{24}^A + g_5 V G_{22}^B. \quad (C-12)$$

Sitio A4

$$G_{44}^A = g_0 + g_0 V G_{43}^A + g_0 V G_{45}^A + g_0 V G_{44}^B, \quad (C-13)$$

$$G_{43}^A = g_0 V G_{44}^A, \quad (C-14)$$

$$G_{45}^A = g_0 V G_{44}^A + g_0 V G_{44}^A. \quad (C-15)$$

Reemplazando (C-14) y (C-15) en (C-13).

$$G_{44}^A = g_0 + g_0 V (g_0 V G_{44}^A) + g_0 V (g_0 V G_{44}^A + g_0 V G_{42}^A) + g_0 V G_{44}^B, \quad (C-16)$$

$$G_{44}^A = g_0 + g_0^2 V^2 G_{44}^A + g_0^2 V^2 G_{44}^A + g_0^2 V^2 G_{42}^A + g_0 V G_{44}^B, \quad (C-17)$$

$$G_{44}^A = g_0 + 2g_0^2 V^2 G_{44}^A + g_0^2 V^2 G_{42}^A + g_0 V G_{44}^B, \quad (C-18)$$

$$G_{44}^A - 2g_0^2 V^2 G_{44}^A = g_0 + g_0^2 V^2 G_{42}^A + g_0 V G_{44}^B, \quad (C-19)$$

$$G_{44}^A (1 - 2g_0^2 V^2) = g_0 + g_0^2 V^2 G_{42}^A + g_0 V G_{44}^B, \quad (C-20)$$

$$G_{44}^A = \frac{g_0}{1 - 2g_0^2 V^2} + \frac{g_0}{1 - 2g_0^2 V^2} g_0 V^2 G_{42}^A + \frac{g_0}{1 - 2g_0^2 V^2} V G_{44}^B, \quad (C-21)$$

entonces

$$G_{44}^A = g_5 + g_5 \tau G_{42}^A + g_5 V G_{44}^B. \quad (C-22)$$

Sitio B2

$$G_{22}^B = g_0 + g_0 V G_{21}^B + g_0 V G_{23}^B + g_0 V G_{22}^A, \quad (C-23)$$

$$G_{21}^B = g_0 V G_{22}^B, \quad (C-24)$$

$$G_{23}^B = g_0 V G_{22}^B + g_0 V G_{24}^B. \quad (C-25)$$

Reemplazando (C-2) y (C-3) en (C-1).

$$G_{22}^B = g_0 + g_0V (g_0VG_{22}^B) + g_0V (g_0VG_{22}^B + g_0VG_{24}^B) + g_0VG_{22}^A, \quad (C-26)$$

$$G_{22}^B = g_0 + g_0^2V^2G_{22}^B + g_0^2V^2G_{22}^B + g_0^2V^2G_{24}^B + g_0VG_{22}^A, \quad (C-27)$$

$$G_{22}^B = g_0 + 2g_0^2V^2G_{22}^B + g_0^2V^2G_{24}^B + g_0VG_{22}^A, \quad (C-28)$$

$$G_{22}^B - 2g_0^2V^2G_{22}^B = g_0 + g_0^2V^2G_{24}^B + g_0VG_{22}^A, \quad (C-29)$$

$$G_{22}^B (1 - 2g_0^2V^2) = g_0 + g_0^2V^2G_{24}^B + g_0VG_{22}^A, \quad (C-30)$$

$$G_{22}^B = \frac{g_0}{1 - 2g_0^2V^2} + \frac{g_0}{1 - 2g_0^2V^2}g_0V^2G_{24}^B + \frac{g_0}{1 - 2g_0^2V^2}VG_{22}^A, \quad (C-31)$$

entonces

$$G_{22}^B = g_5 + g_5\tau G_{24}^B + g_5VG_{22}^A. \quad (C-32)$$

Sitio A4

$$G_{44}^B = g_0 + g_0VG_{43}^B + g_0VG_{45}^B + g_0VG_{44}^A, \quad (C-33)$$

$$G_{43}^B = g_0VG_{44}^B, \quad (C-34)$$

$$G_{45}^B = g_0VG_{44}^B + g_0VG_{44}^A. \quad (C-35)$$

Reemplazando (C-14) y (C-15) en (C-13).

$$G_{44}^B = g_0 + g_0V (g_0VG_{44}^B) + g_0V (g_0VG_{44}^B + g_0VG_{42}^B) + g_0VG_{44}^A, \quad (C-36)$$

$$G_{44}^B = g_0 + g_0^2V^2G_{44}^B + g_0^2V^2G_{44}^B + g_0^2V^2G_{42}^B + g_0VG_{44}^A, \quad (C-37)$$

$$G_{44}^B = g_0 + 2g_0^2V^2G_{44}^B + g_0^2V^2G_{42}^B + g_0VG_{44}^A, \quad (C-38)$$

$$G_{44}^B - 2g_0^2V^2G_{44}^B = g_0 + g_0^2V^2G_{42}^B + g_0VG_{44}^A, \quad (C-39)$$

$$G_{44}^B (1 - 2g_0^2V^2) = g_0 + g_0^2V^2G_{42}^B + g_0VG_{44}^A, \quad (C-40)$$

$$G_{44}^B = \frac{g_0}{1 - 2g_0^2V^2} + \frac{g_0}{1 - 2g_0^2V^2}g_0V^2G_{42}^B + \frac{g_0}{1 - 2g_0^2V^2}VG_{44}^A, \quad (C-41)$$

entonces

$$G_{44}^B = g_5 + g_5\tau G_{42}^B + g_5VG_{44}^A. \quad (C-42)$$

Terminada la primer decimación de nuestro sistema, adquiere la siguiente forma.

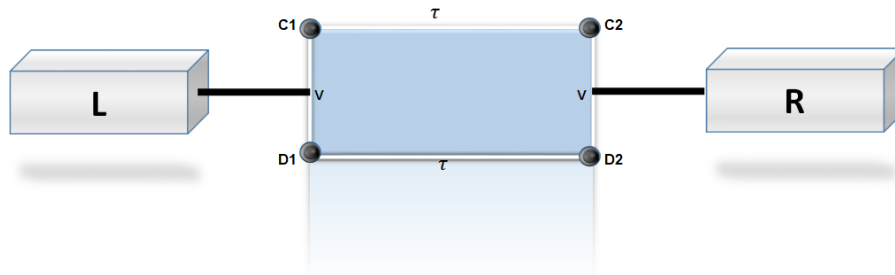


Figura C-3.: Nanocinta de grafeno tipo Zigzag en su primera decimación, con nuevo acople τ , función de Green g_5 y sitios renombrados.

Ahora se procederá a decimar el nuevo sistema obtenido, para esto se seguirá usando la ecuación (2-90) en los sitios C1, C2, D1 y D2.

Sitio C1

$$G_{11}^C = g_5 + g_5 V G_{11}^D + g_5 \tau G_{12}^C, \quad (\text{C-43})$$

$$G_{11}^D = g_5 V G_{11}^C + g_5, \quad (\text{C-44})$$

reemplazando (C-44) en (C-43)

$$G_{11}^C = g_5 + g_5 V (g_5 + g_5 V G_{11}^C) + g_5 \tau G_{12}^C, \quad (\text{C-45})$$

$$G_{11}^C = g_5 + g_5^2 V + g_5^2 v^2 G_{11}^C + g_5 \tau G_{12}^C, \quad (\text{C-46})$$

$$G_{11}^C (1 - g_5^2 V^2) = g_5 + g_5^2 V + g_5 \tau G_{12}^C, \quad (\text{C-47})$$

$$G_{11}^C = \frac{g_5 + g_5^2 V}{1 - g_5^2 V^2} + \frac{g_5 \tau G_{12}^C}{1 - g_5^2 V^2}, \quad (\text{C-48})$$

$$G_{11}^C = \frac{g_5 + g_5^2 V}{1 - g_5^2 V^2} + \frac{g_5 + g_5^2 V}{1 - g_5^2 V^2} \frac{g_5 \tau G_{12}^C}{g_5 + g_5^2 V}, \quad (\text{C-49})$$

donde

$$\frac{g_5 + g_5^2 V}{1 - g_5^2 V^2} = g_6, \quad (\text{C-50})$$

$$\frac{g_5 \tau}{g_5 + g_5^2 V} = \tau_2, \quad (\text{C-51})$$

entonces

$$G_{11}^C = g_6 + g_6 \tau_2 G_{12}^C \quad (\text{C-52})$$

Sitio C2

$$G_{22}^C = g_5 + g_5 V G_{22}^D + g_5 \tau G_{21}^C, \quad (\text{C-53})$$

$$G_{22}^D = g_5 V G_{22}^C + g_5, \quad (\text{C-54})$$

reemplazando (C-54) en (C-53)

$$G_{22}^C = g_5 + g_5 V (g_5 + g_5 V G_{22}^C) + g_5 \tau G_{21}^C, \quad (\text{C-55})$$

$$G_{22}^C = g_5 + g_5^2 V + g_5^2 v^2 G_{22}^C + g_5 \tau G_{21}^C, \quad (\text{C-56})$$

$$G_{22}^C (1 - g_5^2 V^2) = g_5 + g_5^2 V + g_5 \tau G_{21}^C, \quad (\text{C-57})$$

$$G_{22}^C = \frac{g_5 + g_5^2 V}{1 - g_5^2 V^2} + \frac{g_5 \tau G_{21}^C}{1 - g_5^2 V^2}, \quad (\text{C-58})$$

$$G_{22}^C = \frac{g_5 + g_5^2 V}{1 - g_5^2 V^2} + \frac{g_5 + g_5^2 V}{1 - g_5^2 V^2} \frac{g_5 \tau G_{21}^C}{g_5 + g_5^2 V}, \quad (\text{C-59})$$

entonces

$$G_{22}^C = g_6 + g_6 \tau_2 G_{21}^C. \quad (\text{C-60})$$

El sistema decimado totalmente queda de la siguiente manera.

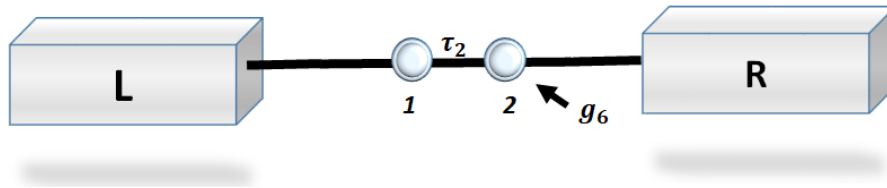


Figura C-4.: Nanocinta de grafeno tipo Zig - Zag decimada con energía de acople τ y función de Green g_6 .

D. Anexo: Decimación de una nanocinta de grafeno tipo Zig - Zag con tres anillos de ancho

A continuación, se efectuará la decimación para una nanocinta de grafeno tipo zig-zag, con una longitud y ancho de 3 anillos, tal como se ilustra en la figura D-1

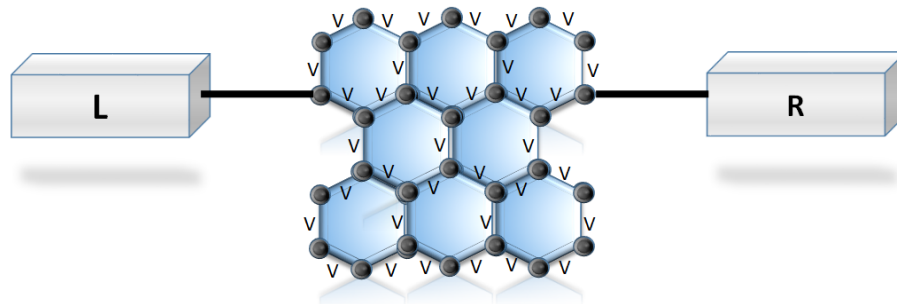


Figura D-1.: Nanocinta de grafeno tipo Zig - Zag con acoples V, longitud y ancho de 3 anillos

Para facilitar el proceso de decimación, se renombrarán los sitios tal como se ve en la figura D-2

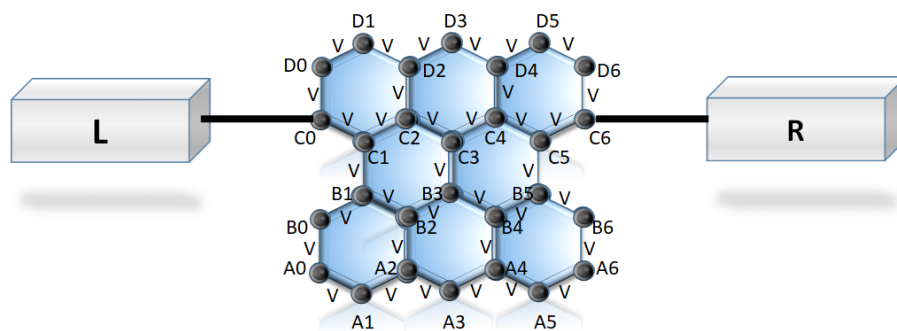


Figura D-2.: Nanocinta de grafeno tipo zig-zag con sitios renombrados y energías efectivas V

Se emplea la ecuación (2-90) para encontrar las funciones de los sitios A1, A3, A5, B1, B3,

B5, C1, C3, C5, D1, D3 Y D5.

Sitios A1

$$G_{11}^A = g_0 + g_0 V G_{10}^A + g_0 V G_{12}^A, \quad (D-1)$$

$$G_{10}^A = g_0 + g_0 V G_{11}^A + g_0 V G_{10}^B, \quad (D-2)$$

$$G_{12}^A = g_0 V G_{11}^A + g_0 V G_{12}^B + g_0 V G_{13}^A, \quad (D-3)$$

$$G_{10}^B = g_0 V G_{10}^A + g_0 V G_{11}^B, \quad (D-4)$$

$$G_{12}^B = g_0 V G_{11}^B + g_0 V G_{12}^A, \quad (D-5)$$

reemplazamos (D-4) en (D-2)

$$G_{10}^A = g_0 V G_{11}^A + g_0 V (g_0 V G_{10}^A + g_0 V G_{11}^B), \quad (D-6)$$

$$G_{10}^A = g_0 V G_{11}^A + g_0^2 V^2 G_{10}^A + g_0^2 V^2 G_{11}^B, \quad (D-7)$$

$$G_{10}^A - g_0^2 V^2 G_{10}^A = g_0 V G_{11}^A + g_0^2 V^2 G_{11}^B, \quad (D-8)$$

$$G_{10}^A = \frac{g_0 V G_{11}^A}{1 - g_0^2 V^2} + \frac{g_0^2 V^2 G_{11}^B}{1 - g_0^2 V^2}, \quad (D-9)$$

ahora reemplazamos (D-5) en (D-3).

$$G_{12}^A = g_0 V G_{11}^A + g_0 V (g_0 V G_{11}^B + g_0 V G_{12}^A) + g_0 V G_{13}^A, \quad (D-10)$$

$$G_{12}^A = g_0 V G_{11}^A + g_0^2 V^2 G_{11}^B + g_0^2 V^2 G_{12}^A + g_0 V G_{13}^A, \quad (D-11)$$

$$G_{12}^A - g_0^2 V^2 G_{12}^A = g_0 V G_{11}^A + g_0^2 V^2 G_{11}^B + g_0 V G_{13}^A, \quad (D-12)$$

$$G_{12}^A = \frac{g_0 V G_{11}^A + g_0^2 V^2 G_{11}^B + g_0 V G_{13}^A}{1 - g_0^2 V^2}, \quad (D-13)$$

Reemplazamos (D-9) y (D-13) en (D-1)

$$G_{11}^A = g_0 + g_0 V \left(\frac{g_0 V G_{11}^A + g_0^2 V^2 G_{11}^B}{1 - g_0^2 V^2} \right) + g_0 V \left(\frac{g_0 V G_{11}^A + g_0^2 V^2 G_{11}^B + g_0 V G_{13}^A}{1 - g_0^2 V^2} \right), \quad (D-14)$$

$$G_{11}^A - g_0^2 V^2 G_{11}^A = g_0 = g_0^3 V^2 + 2g_0^2 V^2 G_{11}^A + 2g_0^3 V^3 G_{11}^B + g_0^2 V^2 G_{13}^A, \quad (D-15)$$

$$G_{11}^A - 3g_0^2 V^2 G_{11}^A = g_0 - g_0^3 V^2 + 2g_0^3 V^3 G_{11}^B + g_0^2 V^2 G_{13}^A, \quad (D-16)$$

$$G_{11}^A = \frac{g_0 - g_0^3 V^2}{1 - 3g_0^2 V^2} + \frac{g_0 - g_0^3 V^2}{1 - 3g_0^2 V^2} \cdot \frac{2g_0^3 V^3}{g_0 - g_0^3 V^2} G_{11}^B + \frac{g_0 - g_0^3 V^2}{1 - 3g_0^2 V^2} \cdot \frac{g_0^2 V^2}{g_0 - g_0^3 V^2} G_{13}^A, \quad (D-17)$$

donde

$$\frac{g_0 - g_0^3 V^2}{1 - 3g_0^2 V^2} = g_{10}, \quad (D-18)$$

$$\frac{2g_0^3 V^3}{g_0 - g_0^3 V^2} = \omega_1, \quad (D-19)$$

$$\frac{g_0^2 V^2}{g_0 - g_0^3 V^2} = \omega_2, \quad (D-20)$$

por lo cual,

$$G_{11}^A = g_{10} + g_{10}\omega_1 G_{11}^B + g_{10}\omega_2 G_{13}^A. \quad (\text{D-21})$$

Sitio A3

$$G_{33}^A = g_0 + g_0 V G_{32}^A + g_0 V G_{34}^A, \quad (\text{D-22})$$

$$G_{32}^A = g_0 V G_{33}^A + g_0 V G_{33}^B + g_0 V G_{31}^A, \quad (\text{D-23})$$

$$G_{34}^A = g_0 V G_{33}^A + g_0 V G_{34}^B + g_0 V G_{35}^A, \quad (\text{D-24})$$

$$G_{32}^B = g_0 V G_{32}^A + g_0 V G_{33}^B, \quad (\text{D-25})$$

$$G_{34}^B = g_0 V G_{34}^A + g_0 V G_{33}^B, \quad (\text{D-26})$$

Sustituyendo (D-25) en (D-23)

$$G_{32}^A = g_0 V G_{33}^A + g_0 V (g_0 V G_{32}^A + g_0 V G_{33}^B) + g_0 V G_{31}^A, \quad (\text{D-27})$$

$$G_{32}^A = g_0 V G_{33}^A + g_0^2 V^2 G_{32}^A + g_0^2 V^2 G_{33}^B + g_0 V G_{31}^A, \quad (\text{D-28})$$

$$G_{32}^A - g_0^2 V^2 G_{32}^A = g_0 V G_{33}^A + g_0^2 V^2 G_{33}^B + g_0 V G_{31}^A, \quad (\text{D-29})$$

$$G_{32}^A (1 - g_0^2 V^2) = g_0 V G_{33}^A + g_0^2 V^2 G_{33}^B + g_0 V G_{31}^A, \quad (\text{D-30})$$

$$G_{32}^A = \frac{g_0 V G_{33}^A + g_0^2 V^2 G_{33}^B + g_0 V G_{31}^A}{1 - g_0^2 V^2}, \quad (\text{D-31})$$

reemplazando (D-26) en (D-24)

$$G_{34}^A = g_0 V G_{33}^A + g_0 V (g_0 V G_{34}^A + g_0 V G_{33}^B) + g_0 V G_{35}^A, \quad (\text{D-32})$$

$$G_{34}^A = g_0 V G_{33}^A + g_0^2 V^2 G_{34}^A + g_0^2 V^2 G_{33}^B + g_0 V G_{35}^A, \quad (\text{D-33})$$

$$G_{34}^A - g_0^2 V^2 G_{34}^A = g_0 V G_{33}^A + g_0^2 V^2 G_{33}^B + g_0 V G_{35}^A, \quad (\text{D-34})$$

$$G_{34}^A (1 - g_0^2 V^2) = g_0 V G_{33}^A + g_0^2 V^2 G_{33}^B + g_0 V G_{35}^A, \quad (\text{D-35})$$

$$G_{34}^A = \frac{g_0 V G_{33}^A + g_0^2 V^2 G_{33}^B + g_0 V G_{35}^A}{1 - g_0^2 V^2}, \quad (\text{D-36})$$

ahora se reemplaza (D-31) y (D-26) en (D-22)

$$G_{33}^A = g_0 + g_0 V \left(\frac{g_0 V G_{33}^A + g_0^2 V^2 G_{33}^B + g_0 V G_{31}^A}{1 - g_0^2 V^2} \right) + g_0 V \left(\frac{g_0 V G_{33}^A + g_0^2 V^2 G_{33}^B + g_0 V G_{35}^A}{1 - g_0^2 V^2} \right), \quad (\text{D-37})$$

$$G_{33}^A (1 - g_0^2 V^2) = g_0 - g_0^3 V^2 + g_0^2 V^2 G_{33}^A + g_0^3 V^3 G_{33}^B + g_0^2 V^2 G_{31}^A + g_0^2 V^2 G_{35}^A + g_0^3 V_{33}^B G_{33}^B + g_0^2 V^2 G_{35}^A, \quad (\text{D-38})$$

$$G_{33}^A (1 - 3g_0^2 V^2) = g_0 - g_0^3 v^2 + 2g_0^3 v^3 G_{33}^B + g_0^2 v^2 G_{31}^A + g_0^2 V^2 G_{35}^A \quad (D-39)$$

Se multiplica y divide par $g_0 - g_0^3 V^2$

$$G_{33}^A = \frac{g_0 - g_0^3 V^2}{1 - 3g_0^2 V^2} + \frac{g_0 - g_0^3 V^2}{1 - 3g_0^2 V^2} \cdot \frac{2g_0^3 V^3}{g_0 - g_0^3 V^2} G_{33}^B + \frac{g_0 - g_0^3 V^2}{1 - 3g_0^2 V^2} \cdot \frac{g_0^2 V^2}{g_0^2 - g_0^3 V^2} G_{31}^A + \frac{g_0 - g_0^3 V^2}{1 - 3g_0^2 V^2} \cdot \frac{g_0^2 V^2}{g_0 - g_0^3 V^2} G_{35}^A, \quad (D-40)$$

entonces:

$$G_{33}^A = g_{10} + g_{10}\omega_1 G_{33}^B + g_{10}\omega_2 G_{31}^A + g_{10}w_2 G_{35}^A. \quad (D-41)$$

Sitio A5

$$G_{55}^A = g_0 + g_0 V G_{56}^A + g_0 V G_{54}^A, \quad (D-42)$$

$$G_{56}^A = g_0 + g_0 V G_{55}^A + g_0 V G_{56}^B, \quad (D-43)$$

$$G_{54}^A = g_0 V G_{55}^A + g_0 V G_{54}^B + g_0 V G_{53}^A, \quad (D-44)$$

$$G_{56}^B = g_0 V G_{56}^A + g_0 V G_{55}^B, \quad (D-45)$$

$$G_{54}^B = g_0 V G_{55}^B + g_0 V G_{54}^A, \quad (D-46)$$

reemplazamos (D-45) en (D-43)

$$G_{56}^A = g_0 V G_{55}^A + g_0 V (g_0 V G_{56}^A + g_0 V G_{55}^B), \quad (D-47)$$

$$G_{56}^A = g_0 V G_{55}^A + g_0^2 V^2 G_{56}^A + g_0^2 V^2 G_{55}^B, \quad (D-48)$$

$$G_{56}^A - g_0^2 V^2 G_{56}^A = g_0 V G_{55}^A + g_0^2 V^2 G_{55}^B, \quad (D-49)$$

$$G_{56}^A = \frac{g_0 V G_{55}^A}{1 - g_0^2 V^2} + \frac{g_0^2 V^2 G_{55}^B}{1 - g_0^2 V^2}, \quad (D-50)$$

ahora reemplazamos (D-46) en (D-44).

$$G_{54}^A = g_0 V G_{55}^A + g_0 V (g_0 V G_{55}^B + g_0 V G_{54}^A) + g_0 V G_{53}^A, \quad (D-51)$$

$$G_{54}^A = g_0 V G_{55}^A + g_0^2 V^2 G_{55}^B + g_0^2 V^2 G_{54}^A + g_0 V G_{53}^A, \quad (D-52)$$

$$G_{54}^A - g_0^2 V^2 G_{54}^A = g_0 V G_{55}^A + g_0^2 V^2 G_{55}^B + g_0 V G_{53}^A, \quad (D-53)$$

$$G_{54}^A = \frac{g_0 V G_{55}^A + g_0^2 V^2 G_{55}^B + g_0 V G_{53}^A}{1 - g_0^2 V^2}, \quad (D-54)$$

Reemplazamos (D-50) y (D-54) en (D-42)

$$G_{55}^A = g_0 + g_0 V \left(\frac{g_0 V G_{55}^A + g_0^2 V^2 G_{55}^B}{1 - g_0^2 V^2} \right) + g_0 V \left(\frac{g_0 V G_{55}^A + g_0^2 V^2 G_{55}^B + g_0 V G_{53}^A}{1 - g_0^2 V^2} \right), \quad (D-55)$$

$$G_{55}^A - g_0^2 V^2 G_{55}^A = g_0^2 = g_0^3 V^2 + 2g_0^2 V^2 G_{44}^A + 2g_0^3 V^3 G_{55}^B + g_0^2 V^2 G_{53}^A, \quad (D-56)$$

$$G_{55}^A - 3g_0^2 V^2 G_{55}^A = g_0 - g_0^3 V^2 + 2g_0^3 V^3 G_{55}^B + g_0^2 V^2 G_{53}^A, \quad (D-57)$$

$$G_{55}^A = \frac{g_0 - g_0^3 V^2}{1 - 3g_0^2 V^2} + \frac{g_0 - g_0^3 V^2}{1 - 3g_0^2 V^2} \cdot \frac{2g_0^3 V^3}{g_0 - g_0^3 V^2} G_{55}^B + \frac{g_0 - g_0^3 V^2}{1 - 3g_0^2 V^2} \cdot \frac{g_0^2 V^2}{g_0 - g_0^3 V^2} G_{53}^A, \quad (D-58)$$

entonces,

$$G_{55}^A = g_{10} + g_{10}\omega_1 G_{55}^B + g_{10}\omega_2 G_{53}^A. \quad (\text{D-59})$$

Sitio B1

$$G_{11}^B = g_0 + g_0 V G_{11}^C + g_0 V G_{10}^B + g_0 V G_{12}^B, \quad (\text{D-60})$$

$$G_{10}^B = g_0 V G_{11}^B + g_0 V G_{10}^A, \quad (\text{D-61})$$

$$G_{12}^B = g_0 V G_{11}^B + g_0 V G_{12}^A, \quad (\text{D-62})$$

$$G_{10}^A = g_0 V G_{11}^A + g_0 V G_{10}^B, \quad (\text{D-63})$$

$$G_{12}^A = g_0 V G_{11}^A + g_0 V G_{12}^B, \quad (\text{D-64})$$

reemplazando (D-64) en (D-62)

$$G_{12}^B = g_0 V G_{11}^B + g_0 V (g_0 V G_{11}^A + g_0 V G_{12}^B) + \frac{g_0 V G_{13}^B}{1 - g_0^2 V^2}, \quad (\text{D-65})$$

$$G_{12}^B = g_0 V G_{11}^B + g_0^2 V^2 G_{11}^A + g_0^2 V^2 G_{12}^B + \frac{g_0 V G_{13}^B}{1 - g_0^2 V^2}, \quad (\text{D-66})$$

$$G_{12}^B (1 - g_0^2 V^2) = g_0 V G_{11}^B + g_0^2 V^2 G_{11}^A + \frac{g_0 V G_{13}^B}{1 - g_0^2 V^2}, \quad (\text{D-67})$$

$$G_{12}^B = \frac{g_0 V G_{11}^B + g_0^2 V^2 G_{11}^A}{1 - g_0^2 V^2} + \frac{g_0 V G_{13}^B}{1 - g_0^2 V^2}, \quad (\text{D-68})$$

ahora (D-63) en (D-61)

$$G_{10}^B = g_0 V G_{11}^B + g_0 V (g_0 V G_{11}^A + g_0 V G_{10}^B), \quad (\text{D-69})$$

$$G_{10}^B = g_0 V G_{11}^B + g_0^2 V^2 G_{11}^A + g_0^2 V^2 G_{10}^B, \quad (\text{D-70})$$

$$G_{10}^B (1 - g_0^2 V^2) = g_0 V G_{11}^B + g_0^2 V^2 G_{11}^A, \quad (\text{D-71})$$

$$G_{10}^B = \frac{g_0 V G_{11}^B + g_0^2 V^2 G_{11}^A}{1 - g_0^2 V^2}, \quad (\text{D-72})$$

reemplazando (D-68) y (D-72) en (D-60)

$$G_{11}^B = g_0 + g_0 V G_{11}^C + g_0 V \left(\frac{g_0 V G_{11}^B + g_0^2 V^2 G_{11}^A}{1 - g_0^2 V^2} \right) + g_0 V \left(\left(\frac{g_0 V G_{11}^B + g_0^2 V^2 G_{11}^A}{1 - g_0^2 V^2} \right) + \left(\frac{g_0 V G_{13}^B}{1 - g_0^2 V^2} \right) \right), \quad (\text{D-73})$$

$$G_{11}^B - g_0^2 V^2 G_{11}^B = g_0 - g_0^3 V^2 + g_0 V_{11}^C - g_0^3 V^3 G_{11}^C + g_0^2 V^2 G_{11}^B + g_0^3 V^3 G_{11}^A + g_0^2 V^2 G_{11}^B + g_0^3 V^3 G_{11}^A + g_0^2 V^2 G_{13}^B, \quad (\text{D-74})$$

$$G_{11}^B (1 - 3g_0^2V^2) = g_0^- g_0^3V^2 + (g_0V - g_0^3V^3) G_{11}^C + 2g_0^3V^3 G_{11}^A g_0^2V^2 G_{13}^B, \quad (D-75)$$

Se multiplica y divide por $g_0 - g_0^3V^2$

$$G_{11}^B = \frac{g_0 - g_0^3V^2}{1 - 3g_0^2V^2} + \frac{g_0 - g_0^3V^2}{1 - 3g_0^2V^2} \cdot \frac{g_0V - g_0^3V^3}{g_0 - g_0^3V^2} G_{11}^C + \frac{g_0 - g_0^3V^2}{1 - 3g_0^2V^2} \cdot \frac{2g_0^3V^3}{g_0 - g_0^3V^2} G_{11}^A + \frac{g_0^2V^2 G_{13}^B}{g_0 - g_0^3V^2}, \quad (D-76)$$

donde

$$\frac{g_0V - g_0^3V^3}{g_0 - g_0^3V^2} = \omega_3 \quad (D-77)$$

entonces

$$G_{11}^B = g_{10} + g_{10}\omega_3 G_{11}^C + g_{10}\omega_1 G_{11}^A + g_{10}\omega_2 G_{13}^B \quad (D-78)$$

Sitio B3

$$G_{33}^B = g_0 + g_0V G_{32}^B + g_0V G_{34}^B + g_0V G_{33}^C, \quad (D-79)$$

$$G_{32}^B = g_0V G_{33}^B + g_0V G_{31}^B + g_0V G_{32}^A, \quad (D-80)$$

$$G_{32}^A = g_0V G_{32}^B + g_0V G_{33}^A, \quad (D-81)$$

$$G_{34}^B = g_0V G_{33}^B + g_0V G_{35}^B + g_0V G_{34}^A, \quad (D-82)$$

$$G_{34}^A = g_0V G_{34}^B + g_0V G_{33}^A, \quad (D-83)$$

reemplazamos (D-83) en (D-82)

$$G_{34}^B = g_0V G_{33}^B + g_0V G_{35}^B + g_0V (g_0V G_{34}^B + g_0V G_{33}^A), \quad (D-84)$$

$$G_{34}^B = g_0V G_{33}^B + g_0V G_{35}^B + g_0^2V^2 G_{31}^B + g_0^2V^2 G_{33}^A, \quad (D-85)$$

$$G_{34}^B - g_0^2V^2 G_{31}^B = g_0V G_{33}^B + g_0V G_{35}^B + g_0^2V^2 G_{33}^A, \quad (D-86)$$

$$G_{34}^B = \frac{g_0V G_{33}^B + g_0V G_{35}^B + g_0^2V^2 G_{33}^A}{1 - g_0^2V^2}, \quad (D-87)$$

reemplazamos (D-81) en (D-80)

$$G_{32}^B = g_0V G_{33}^B + g_0V G_{31}^B + g_0V (g_0V G_{32}^B + g_0V G_{33}^A), \quad (D-88)$$

$$G_{32}^B = g_0V G_{33}^B + g_0V G_{31}^B + g_0^2V^2 G_{32}^B + g_0^2V^2 G_{33}^A, \quad (D-89)$$

$$G_{32}^B - g_0^2V^2 G_{32}^B = g_0V G_{33}^B + g_0V G_{31}^B + g_0^2V^2 G_{33}^A, \quad (D-90)$$

$$G_{32}^B = \frac{g_0V G_{33}^B + g_0V G_{31}^B + g_0^2V^2 G_{33}^A}{1 - g_0^2V^2}, \quad (D-91)$$

Reemplazamos (D-87) y (D-91) en (D-79)

$$G_{33}^B = g_0 + g_0 V \left(\frac{g_0 V G_{33}^B + g_0 V G_{31}^B + g_0^2 V^2 G_{33}^A}{1 - g_0^2 V^2} \right) + g_0 V \left(\frac{g_0 V G_{33}^B + g_0 V G_{35}^B + g_0^2 V^2 G_{33}^A}{1 - g_0^2 V^2} \right) + g_0 V G_{33}^C, \quad (\text{D-92})$$

$$G_{33}^B - g_0^2 V^2 G_{33}^B = g_0 - g_0^3 V^2 + g_0^2 V^2 G_{33}^B + g_0^2 V^2 G_{31}^B + g_0^3 V^3 G_{33}^A + g_0^2 V^2 G_{33}^B + g_0^2 V^2 G_{35}^B + g_0^3 V^3 G_{35}^A + g_0 V G_{33}^C - g_0^3 V^3 G_{33}^C, \quad (\text{D-93})$$

$$G_{33}^B - 3g_0^2 V^2 G_{33}^B = g_0 - g_0^3 V^2 + g_0^2 V^2 G_{34}^B + 2g_0^3 V^3 G_{33}^A + g_0^2 V^2 (G_{35}^B + (g_0 V - g_0^3 V^3) G_{33}^C), \quad (\text{D-94})$$

$$G_{33}^B = \frac{g_0 - g_0^3 V^2}{1 - 3g_0^2 V^2} + \frac{g_0 - g_0^3 V^2}{1 - 3g_0^2 V^2} \cdot \frac{g_0^2 V^2}{g_0 - g_0^3 V^2} G_{31}^B + \frac{g_0 - g_0^3 V^2}{1 - 3g_0^2 V^2} \cdot \frac{2g_0^3 V^3 G_{33}^A}{g_0 - g_0^3 V^2} + \frac{g_0 - g_0^3 V^2}{1 - 3g_0^2 V^2} \cdot \frac{g_0^2 V^2 G_{35}^B}{g_0 - g_0^3 V^2} + \frac{g_0 - g_0^3 V^2}{1 - 3g_0^2 V^2} \cdot \frac{g_0 V - g_0^3 V^3}{g_0 - g_0^3 V^2} G_{33}^C, \quad (\text{D-95})$$

entonces

$$G_{33}B = g_{10} + g_{10}\omega_2 g_{31}B + g_{10}\omega_1 G_{33}D + g_{10}\omega_2 G_{33}B + g_{10}\omega_3 G_{33}C \quad (\text{D-96})$$

Sitio B5

$$G_{55}^B = g_0 + g_0 V G_{55}^C + g_0 V G_{56}^B + g_0 V G_{54}^B, \quad (\text{D-97})$$

$$G_{56}^B = g_0 V G_{55}^B + g_0 V G_{56}^A, \quad (\text{D-98})$$

$$G_{54}^B = g_0 V G_{55}^B + g_0 V G_{54}^A + g_0 V G_{53}^B, \quad (\text{D-99})$$

$$G_{56}^A = g_0 V G_{55}^A + g_0 V G_{56}^B, \quad (\text{D-100})$$

$$G_{54}^A = g_0 V G_{55}^A + g_0 V G_{54}^B, \quad (\text{D-101})$$

reemplazando (D-101) en (D-99)

$$G_{54}^B = g_0 V G_{55}^B + g_0 V (g_0 V G_{55}^A + g_0 V G_{54}^B) + g_0 V G_{53}^B, \quad (\text{D-102})$$

$$G_{54}^B = g_0 V G_{55}^B + g_0^2 V^2 G_{55}^A + g_0^2 V^2 G_{54}^B + g_0 V G_{53}^B, \quad (\text{D-103})$$

$$G_{54}^B (1 - g_0^2 V^2) = g_0 V G_{55}^B + g_0^2 V^2 G_{55}^A + g_0 V G_{53}^B, \quad (\text{D-104})$$

$$G_{54}^B = \frac{g_0 V G_{55}^B + g_0^2 V^2 G_{55}^A + g_0 V G_{53}^B}{1 - g_0^2 V^2}, \quad (\text{D-105})$$

ahora (D-100) en (D-98)

$$G_{56}^B = g_0 V G_{55}^B + g_0 V (g_0 V G_{55}^A + g_0 V G_{56}^B), \quad (\text{D-106})$$

$$G_{56}^B = g_0 V G_{55}^B + g_0^2 V^2 G_{55}^A + g_0^2 V^2 G_{56}^B, \quad (\text{D-107})$$

$$G_{56}^B (1 - g_0^2 V^2) = g_0 V G_{55}^B + g_0^2 V^2 G_{55}^A, \quad (\text{D-108})$$

$$G_{56}^B = \frac{g_0 V G_{55}^B + g_0^2 V^2 G_{55}^A}{1 - g_0^2 V^2}, \quad (\text{D-109})$$

reemplazando (D-105) y (D-109) en (D-97)

$$G_{55}^B = g_0 + g_0 V G_{55}^C + g_0 V \left(\frac{g_0 V G_{55}^B + g_0^2 V^2 G_{55}^A}{1 - g_0^2 V^2} \right) + g_0 V \left(\frac{g_0 V G_{55}^B + g_0^2 V^2 G_{55}^A + g_0 V G_{53}^B}{1 - g_0^2 V^2} \right), \quad (\text{D-110})$$

$$G_{55}^B - g_0^2 V^2 G_{55}^B = g_0 - g_0^3 V^2 + g_0 V^2 - g_0^3 V^3 G_{55}^C + g_0^2 V^2 G_{55}^B + g_0^3 V^3 G_{55}^A + g_0^2 V^2 G_{55}^B + g_0^3 V^3 G_{55}^A + g_0^2 V^2 G_{53}^B, \quad (\text{D-111})$$

$$G_{55}^B (1 - 3g_0^2 V^2) = g_0 - g_0^3 V^2 + (g_0 V - g_0^3 V^3) G_{55}^C + 2g_0^3 V^3 G_{55}^A + g_0^2 V^2 G_{53}^B, \quad (\text{D-112})$$

Se multiplica y divide por $g_0 - g_0^3 V^2$

$$G_{55}^B = \frac{g_0 - g_0^3 V^2}{1 - 3g_0^2 V^2} + \frac{g_0 - g_0^3 V^2}{1 - 3g_0^2 V^2} \cdot \frac{g_0 V - g_0^3 V^3}{g_0 - g_0^3 V^2} G_{55}^C + \frac{g_0 - g_0^3 V^2}{1 - 3g_0^2 V^2} \cdot \frac{2g_0^3 V^3}{g_0 - g_0^3 V^2} G_{55}^A + \frac{g_0^2 V^2 G_{53}^B}{g_0 - g_0^3 V^2}, \quad (\text{D-113})$$

entonces

$$G_{55}^B = g_{10} + g_{10} w_3 G_{55}^C + g_{10} \omega_1 G_{55}^A + g_{10} \omega_2 G_{53}^B \quad (\text{D-114})$$

Sitio C1

$$G_{11}^C = g_0 + g_0 V G_{11}^B + g_0 V G_{10}^C + g_0 V G_{12}^C, \quad (\text{D-115})$$

$$G_{10}^C = g_0 V G_{11}^C + g_0 V G_{10}^D, \quad (\text{D-116})$$

$$G_{12}^C = g_0 V G_{11}^C + g_0 V G_{12}^D, \quad (\text{D-117})$$

$$G_{10}^D = g_0 V G_{11}^D + g_0 V G_{10}^C, \quad (\text{D-118})$$

$$G_{12}^D = g_0 V G_{11}^D + g_0 V G_{12}^C, \quad (\text{D-119})$$

reemplazando (D-119) en (D-117)

$$G_{12}^C = g_0 V G_{11}^C + g_0 V (g_0 V G_{11}^D + g_0 V G_{12}^C) + \frac{g_0 V G_{13}^C}{1 - g_0^2 V^2}, \quad (\text{D-120})$$

$$G_{12}^C = g_0 V G_{11}^C + g_0^2 V^2 G_{11}^D + g_0^2 V^2 G_{12}^C + \frac{g_0 V G_{13}^C}{1 - g_0^2 V^2}, \quad (\text{D-121})$$

$$G_{12}^C (1 - g_0^2 V^2) = g_0 V G_{11}^C + g_0^2 V^2 G_{11}^D + \frac{g_0 V G_{13}^C}{1 - g_0^2 V^2}, \quad (\text{D-122})$$

$$G_{12}^C = \frac{g_0 V G_{11}^C + g_0^2 V^2 G_{11}^D}{1 - g_0^2 V^2} + \frac{g_0 V G_{13}^C}{1 - g_0^2 V^2}, \quad (\text{D-123})$$

ahora (D-118) en (D-116)

$$G_{10}^C = g_0 V G_{11}^C + g_0 V (g_0 V G_{11}^D + g_0 V G_{10}^C), \quad (\text{D-124})$$

$$G_{10}^C = g_0 V G_{11}^C + g_0^2 V^2 G_{11}^D + g_0^2 V^2 G_{10}^C, \quad (\text{D-125})$$

$$G_{10}^C (1 - g_0^2 V^2) = g_0 V G_{11}^C + g_0^2 V^2 G_{11}^D, \quad (\text{D-126})$$

$$G_{10}^C = \frac{g_0 V G_{11}^C + g_0^2 V^2 G_{11}^D}{1 - g_0^2 V^2}, \quad (\text{D-127})$$

reemplazando (D-123) y (D-127) en (D-115)

$$G_{11}^C = g_0 + g_0 V G_{11}^B + g_0 V \left(\frac{g_0 V G_{11}^C + g_0^2 V^2 G_{11}^D}{1 - g_0^2 V^2} \right) + g_0 V \left(\left(\frac{g_0 V G_{11}^C + g_0^2 V^2 G_{11}^D}{1 - g_0^2 V^2} \right) + \left(\frac{g_0 V G_{13}^C}{1 - g_0^2 V^2} \right) \right), \quad (\text{D-128})$$

$$G_{11}^C - g_0^2 V^2 G_{11}^C = g_0 - g_0^3 V^2 + g_0 V_{11}^B - g_0^3 V^3 G_{11}^B + g_0^2 V^2 G_{11}^C + g_0^3 V^3 G_{11}^D + g_0^2 V^2 G_{11}^C + g_0^3 V^3 G_{11}^D + g_0^2 V^2 G_{13}^C, \quad (\text{D-129})$$

$$G_{11}^C (1 - 3g_0^2 V^2) = g_0 - g_0^3 V^2 + (g_0 V - g_0^3 V^3) G_{11}^B + 2g_0^3 V^3 G_{11}^D + g_0^2 V^2 G_{13}^C, \quad (\text{D-130})$$

Se multiplica y divide por $g_0 - g_0^3 V^2$

$$G_{11}^C = \frac{g_0 - g_0^3 V^2}{1 - 3g_0^2 V^2} + \frac{g_0 - g_0^3 V^2}{1 - 3g_0^2 V^2} \cdot \frac{g_0 V - g_0^3 V^3}{g_0 - g_0^3 V^2} G_{11}^B + \frac{g_0 - g_0^3 V^2}{1 - 3g_0^2 V^2} \cdot \frac{2g_0^3 V^3}{g_0 - g_0^3 V^2} G_{11}^D + \frac{g_0^2 V^2 G_{13}^C}{g_0 - g_0^3 V^2}, \quad (\text{D-131})$$

donde

$$\frac{g_0 V - g_0^3 V^3}{g_0 - g_0^3 V^2} = \omega_3 \quad (\text{D-132})$$

entonces

$$G_{11}^C = g_{10} + g_{10} \omega_3 G_{11}^B + g_{10} \omega_1 G_{11}^D + g_{10} \omega_2 G_{13}^C \quad (\text{D-133})$$

Sitio C3

$$G_{33}^C = g_0 + g_0 V G_{32}^C + g_0 V G_{34}^C + g_0 V G_{33}^B, \quad (\text{D-134})$$

$$G_{32}^C = g_0 V G_{33}^C + g_0 V G_{31}^C + g_0 V G_{32}^D, \quad (\text{D-135})$$

$$G_{32}^D = g_0 V G_{32}^C + g_0 V G_{33}^D, \quad (\text{D-136})$$

$$G_{34}^C = g_0 V G_{33}^C + g_0 V G_{35}^C + g_0 V G_{34}^D, \quad (\text{D-137})$$

$$G_{34}^D = g_0 V G_{34}^C + g_0 V G_{33}^D, \quad (\text{D-138})$$

Reemplazamos [D-138] en [D-137]

$$G_{34}^C = g_0 V G_{33}^C + g_0 V G_{35}^C + g_0 V (g_0 V G_{34}^C + g_0 V G_{33}^D), \quad (\text{D-139})$$

$$G_{34}^C = g_0 V G_{33}^C + g_0 V G_{35}^C + g_0^2 V^2 G_{31}^C + g_0^2 V^2 G_{33}^D, \quad (\text{D-140})$$

$$G_{34}^C - g_0^2 V^2 G_{31}^C = g_0 V G_{33}^C + g_0 V G_{35}^C + g_0^2 V^2 G_{33}^D, \quad (\text{D-141})$$

$$G_{34}^C = \frac{g_0 V G_{33}^C + g_0 V G_{35}^C + g_0^2 V^2 G_{33}^D}{1 - g_0^2 V^2}, \quad (\text{D-142})$$

Reemplazamos [D-136] en [D-135]

$$G_{32}^C = g_0 V G_{33}^C + g_0 V G_{31}^C + g_0 V (g_0 V G_{32}^C + g_0 V G_{33}^D), \quad (\text{D-143})$$

$$G_{32}^C = g_0 V G_{33}^C + g_0 V G_{31}^C + g_0^2 V^2 G_{32}^C + g_0^2 V^2 G_{33}^D, \quad (\text{D-144})$$

$$G_{32}^C - g_0^2 V^2 G_{32}^C = g_0 V G_{33}^C + g_0 V G_{31}^C + g_0^2 V^2 G_{33}^D, \quad (\text{D-145})$$

$$G_{32}^C = \frac{g_0 V G_{33}^C + g_0 V G_{31}^C + g_0^2 V^2 G_{33}^D}{1 - g_0^2 V^2}, \quad (\text{D-146})$$

Reemplazamos [D-142] y [D-146] en [D-134]

$$G_{33}^C = g_0 + g_0 V \left(\frac{g_0 V G_{33}^C + g_0 V G_{31}^C + g_0^2 V^2 G_{33}^D}{1 - g_0^2 V^2} \right) + g_0 V \left(\frac{g_0 V G_{33}^C + g_0 V G_{35}^C + g_0^2 V^2 G_{33}^D}{1 - g_0^2 V^2} \right) + g_0 V G_{33}^B, \quad (\text{D-147})$$

$$G_{33}^C - g_0^2 V^2 G_{33}^C = g_0 - g_0^3 V^2 + g_0^2 V^2 G_{33}^C + g_0^2 V^2 G_{31}^C + g_0^3 V^3 G_{33}^D + g_0^2 V^2 G_{33}^C + g_0^2 V^2 G_{35}^C + g_0^3 V^3 G_{35}^D + g_0 V G_{33}^B - g_0^3 V^3 G_{33}^B, \quad (\text{D-148})$$

$$G_{33}^C - 3g_0^2 V^2 G_{33}^C = g_0 - g_0^3 V^2 + g_0^2 V^2 G_{34}^C + 2g_0^3 V^3 G_{33}^D + g_0^2 V^2 (G_{35}^C + (g_0 V - g_0^3 V^3) G_{33}^B), \quad (\text{D-149})$$

$$G_{33}^C = \frac{g_0 - g_0^3 V^2}{1 - 3g_0^2 V^2} + \frac{g_0 - g_0^3 V^2}{1 - 3g_0^2 V^2} \cdot \frac{g_0^2 V^2}{g_0 - g_0^3 V^2} G_{31}^C + \frac{g_0 - g_0^3 V^2}{1 - 3g_0^2 V^2} \cdot \frac{2g_0^3 V^3 G_{33}^D}{g_0 - g_0^3 V^2} + \frac{g_0 - g_0^3 V^2}{1 - 3g_0^2 V^2} \cdot \frac{g_0^2 V^2 G_{35}^C}{g_0 - g_0^3 V^2} + \frac{g_0 - g_0^3 V^2}{1 - 3g_0^2 V^2} \cdot \frac{g_0 V - g_0^3 V^3}{g_0 - g_0^3 V^2} G_{33}^B, \quad (\text{D-150})$$

entonces

$$G_{33}^C = g_{10} + g_{10} \omega_2 g_{31}^C + g_{10} \omega_1 G_{33}^D + g_{10} \omega_2 G_{33}^C + g_{10} \omega_3 G_{33}^B \quad (\text{D-151})$$

Sitio C5

$$G_{55}^C = g_0 + g_0 V G_{55}^B + g_0 V G_{56}^C + g_0 V G_{54}^C, \quad (\text{D-152})$$

$$G_{56}^C = g_0 V G_{55}^C + g_0 V G_{56}^D, \quad (\text{D-153})$$

$$G_{54}^C = g_0 V G_{55}^C + g_0 V G_{54}^D + g_0 V G_{53}^C, \quad (\text{D-154})$$

$$G_{56}^D = g_0 V G_{55}^D + g_0 V G_{56}^C, \quad (\text{D-155})$$

$$G_{54}^D = g_0 V G_{55}^D + g_0 V G_{54}^C, \quad (\text{D-156})$$

reemplazando (D-156) en (D-154)

$$G_{54}^C = g_0 V G_{55}^C + g_0 V (g_0 V G_{55}^D + g_0 V G_{54}^C) + g_0 V G_{53}^C, \quad (\text{D-157})$$

$$G_{54}^C = g_0 V G_{55}^C + g_0^2 V^2 G_{55}^D + g_0^2 V^2 G_{54}^C + g_0 V G_{53}^C, \quad (\text{D-158})$$

$$G_{54}^C (1 - g_0^2 V^2) = g_0 V G_{55}^C + g_0^2 V^2 G_{55}^D + g_0 V G_{53}^C, \quad (\text{D-159})$$

$$G_{54}^C = \frac{g_0 V G_{55}^C + g_0^2 V^2 G_{55}^D + g_0 V G_{53}^C}{1 - g_0^2 V^2}, \quad (\text{D-160})$$

ahora (D-155) en (D-153)

$$G_{56}^C = g_0 V G_{55}^C + g_0 V (g_0 V G_{55}^D + g_0 V G_{56}^C), \quad (\text{D-161})$$

$$G_{56}^C = g_0 V G_{55}^C + g_0^2 V^2 G_{55}^D + g_0^2 V^2 G_{56}^C, \quad (\text{D-162})$$

$$G_{56}^C (1 - g_0^2 V^2) = g_0 V G_{55}^C + g_0^2 V^2 G_{55}^D, \quad (\text{D-163})$$

$$G_{56}^C = \frac{g_0 V G_{55}^C + g_0^2 V^2 G_{55}^D}{1 - g_0^2 V^2}, \quad (\text{D-164})$$

reemplazando (D-160) y (D-164) en (D-152)

$$G_{55}^C = g_0 + g_0 V G_{55}^B + g_0 V \left(\frac{g_0 V G_{55}^C + g_0^2 V^2 G_{55}^D}{1 - g_0^2 V^2} \right) + g_0 V \left(\frac{g_0 V G_{55}^C + g_0^2 V^2 G_{55}^D + g_0 V G_{53}^C}{1 - g_0^2 V^2} \right), \quad (\text{D-165})$$

$$G_{55}^C - g_0^2 V^2 G_{55}^C = g_0 - g_0^3 V^2 + g_0 V^2 - g_0^3 V^3 G_{55}^B + g_0^2 V^2 G_{55}^C + g_0^3 V^3 G_{55}^D + g_0^2 V^2 G_{55}^C + g_0^3 V^3 G_{55}^D + g_0^2 V^2 G_{53}^C, \quad (\text{D-166})$$

$$G_{55}^C (1 - 3g_0^2 V^2) = g_0 - g_0^3 V^2 + (g_0 V - g_0^3 V^3) G_{55}^B + 2g_0^3 V^3 G_{55}^D + g_0^2 V^2 G_{53}^C, \quad (\text{D-167})$$

Se multiplica y divide por $g_0 - g_0^3 V^2$

$$G_{55}^C = \frac{g_0 - g_0^3 V^2}{1 - 3g_0^2 V^2} + \frac{g_0 - g_0^3 V^2}{1 - 3g_0^2 V^2} \cdot \frac{g_0 V - g_0^3 V^3}{g_0 - g_0^3 V^2} G_{55}^B + \frac{g_0 - g_0^3 V^2}{1 - 3g_0^2 V^2} \cdot \frac{2g_0^3 V^3}{g_0 - g_0^3 V^2} G_{55}^D + \frac{g_0^2 V^2 G_{53}^C}{g_0 - g_0^3 V^2}, \quad (\text{D-168})$$

entonces

$$G_{55}^C = g_{10} + g_{10}\Omega_3 G_{55}^B + g_{10}\omega_1 G_{55}^D + g_{10}\omega_2 G_{53}^C \quad (\text{D-169})$$

Sitios D1

$$G_{11}^D = g_0 + g_0 V G_{10}^D + g_0 V G_{12}^D, \quad (\text{D-170})$$

$$G_{10}^D = g_0 + g_0 V G_{11}^D + g_0 V G_{10}^C, \quad (\text{D-171})$$

$$G_{12}^D = g_0 V G_{11}^D + g_0 V G_{12}^C + g_0 V G_{13}^D, \quad (\text{D-172})$$

$$G_{10}^C = g_0 V G_{10}^D + g_0 V G_{11}^C, \quad (\text{D-173})$$

$$G_{12}^C = g_0 V G_{11}^C + g_0 V G_{12}^D, \quad (\text{D-174})$$

reemplazamos (D-173) en (D-171)

$$G_{10}^D = g_0 V G_{11}^D + g_0 V (g_0 V G_{10}^D + g_0 V G_{11}^C), \quad (\text{D-175})$$

$$G_{10}^D = g_0 V G_{11}^D + g_0^2 V^2 G_{10}^D + g_0^2 V^2 G_{11}^C, \quad (\text{D-176})$$

$$G_{10}^D - g_0^2 V^2 G_{10}^D = g_0 V G_{11}^D + g_0^2 V^2 G_{11}^C, \quad (\text{D-177})$$

$$G_{10}^D = \frac{g_0 V G_{11}^D}{1 - g_0^2 V^2} + \frac{g_0^2 V^2 G_{11}^C}{1 - g_0^2 V^2}, \quad (\text{D-178})$$

ahora reemplazamos (D-174) en (D-172).

$$G_{12}^D = g_0 V G_{11}^D + g_0 V (g_0 V G_{11}^B + g_0 V G_{12}^D) + g_0 V G_{13}^D, \quad (\text{D-179})$$

$$G_{12}^D = g_0 V G_{11}^D + g_0^2 V^2 G_{11}^C + g_0^2 V^2 G_{12}^D + g_0 V G_{13}^D, \quad (\text{D-180})$$

$$G_{12}^D - g_0^2 V^2 G_{12}^D = g_0 V G_{11}^D + g_0^2 V^2 G_{11}^C + g_0 V G_{13}^D, \quad (\text{D-181})$$

$$G_{12}^D = \frac{g_0 V G_{11}^D + g_0^2 V^2 G_{11}^C + g_0 V G_{13}^D}{1 - g_0^2 V^2}, \quad (\text{D-182})$$

Reemplazamos (D-178) y (D-13) en (D-182)

$$G_{11}^D = g_0 + g_0 V \left(\frac{g_0 V G_{11}^D + g_0^2 V^2 G_{11}^C}{1 - g_0^2 V^2} \right) + g_0 V \left(\frac{g_0 V G_{11}^D + g_0^2 V^2 G_{11}^C + g_0 V G_{13}^D}{1 - g_0^2 V^2} \right), \quad (\text{D-183})$$

$$G_{11}^D - g_0^2 V^2 G_{11}^D = g_0^2 = g_0^3 V^2 + 2g_0^2 V^2 G_{11}^D + 2g_0^3 V^3 G_{11}^C + g_0^2 V^2 G_{13}^D, \quad (\text{D-184})$$

$$G_{11}^D - 3g_0^2 V^2 G_{11}^D = g_0 - g_0^3 V^2 + 2g_0^3 V^3 G_{11}^C + g_0^2 V^2 G_{13}^D, \quad (\text{D-185})$$

$$G_{11}^D = \frac{g_0 - g_0^3 V^2}{1 - 3g_0^2 V^2} + \frac{g_0 - g_0^3 V^2}{1 - 3g_0^2 V^2} \cdot \frac{2g_0^3 V^3}{g_0 - g_0^3 V^2} G_{11}^C + \frac{g_0 - g_0^3 V^2}{1 - 3g_0^2 V^2} \cdot \frac{g_0^2 V^2}{g_0 - g_0^3 V^2} G_{13}^D, \quad (\text{D-186})$$

donde

$$\frac{g_0 - g_0^3 V^2}{1 - 3g_0^2 V^2} = g_{10}, \quad (\text{D-187})$$

$$\frac{2g_0^3 V^3}{g_0 - g_0^3 V^2} = \omega_1, \quad (\text{D-188})$$

$$\frac{g_0^2 V^2}{g_0 - g_0^3 V^2} = \omega_2, \quad (\text{D-189})$$

por lo cual,

$$G_{11}^D = g_{10} + g_{10}\omega_1 G_{11}^C + g_{10}\omega_2 G_{13}^D. \quad (\text{D-190})$$

Sitio D3

$$G_{33}^D = g_0 + g_0 V G_{32}^D + g_0 V G_{34}^D, \quad (\text{D-191})$$

$$G_{32}^D = g_0 V G_{33}^D + g_0 V G_{33}^C + g_0 V G_{31}^D, \quad (\text{D-192})$$

$$G_{34}^D = g_0 V G_{33}^D + g_0 V G_{34}^C + g_0 V G_{35}^D, \quad (\text{D-193})$$

$$G_{32}^C = g_0 V G_{32}^D + g_0 V G_{33}^C, \quad (\text{D-194})$$

$$G_{34}^C = g_0 V G_{34}^D + g_0 V G_{33}^C, \quad (\text{D-195})$$

Sustituyendo (D-194) en (D-192)

$$G_{32}^D = g_0 V G_{33}^D + g_0 V (g_0 V G_{32}^D + g_0 V G_{33}^C) + g_0 V G_{31}^D, \quad (\text{D-196})$$

$$G_{32}^D = g_0 V G_{33}^D + g_0^2 V^2 G_{32}^D + g_0^2 V^2 G_{33}^C + g_0 V G_{31}^D, \quad (\text{D-197})$$

$$G_{32}^D - g_0^2 V^2 G_{32}^D = g_0 V G_{33}^D + g_0^2 V^2 G_{33}^C + g_0 V G_{31}^D, \quad (\text{D-198})$$

$$G_{32}^D (1 - g_0^2 V^2) = g_0 V G_{33}^D + g_0^2 V^2 G_{33}^C + g_0 V G_{31}^D, \quad (\text{D-199})$$

$$G_{32}^D = \frac{g_0 V G_{33}^D + g_0^2 V^2 G_{33}^C + g_0 V G_{31}^D}{1 - g_0^2 V^2}, \quad (\text{D-200})$$

reemplazando (D-195) en (D-193)

$$G_{34}^D = g_0 V G_{33}^D + g_0 V (g_0 V G_{34}^D + g_0 V G_{33}^C) + g_0 V G_{35}^D, \quad (\text{D-201})$$

$$G_{32}^D = g_0 V G_{33}^D + g_0^2 V^2 G_{31}^D + g_0^2 V^2 G_{33}^C + g_0 V G_{35}^D, \quad (\text{D-202})$$

$$G_{34}^D - g_0^2 V^2 G_{34}^D = g_0 V G_{33}^D + g_0^2 V^2 G_{33}^C + g_0 V G_{35}^D, \quad (\text{D-203})$$

$$G_{34}^D (1 - g_0^2 V^2) = g_0 V G_{33}^D + g_0^2 V^2 G_{33}^C + g_0 V G_{35}^D, \quad (\text{D-204})$$

$$G_{34}^D = \frac{g_0 V G_{33}^D + g_0^2 V^2 G_{33}^C + g_0 V G_{35}^D}{1 - g_0^2 V^2}, \quad (\text{D-205})$$

ahora se reemplaza (D-200) y (D-205) en (D-191)

$$G_{33}^D = g_0 + g_0 V \left(\frac{g_0 V G_{33}^D + g_0^2 V^2 G_{33}^C + g_0 V G_{31}^D}{1 - g_0^2 V^2} \right) + g_0 V \left(\frac{g_0 V G_{33}^D + g_0^2 V^2 G_{33}^C + g_0 V G_{35}^D}{1 - g_0^2 V^2} \right), \quad (\text{D-206})$$

$$G_{33}^D (1 - g_0^2 V^2) = g_0 - g_0^3 V^2 + g_0^2 V^2 G_{33}^D + g_0^3 V^3 G_{33}^C + g_0^2 V^2 G_{31}^D + g_0^2 V^2 G_{33}^D + g_0^3 V^3 G_{33}^C + g_0^2 V^2 G_{35}^D, \quad (\text{D-207})$$

$$G_{33}^D (1 - 3g_0^2 V^2) = g_0 - g_0^3 v^2 + 2g_0^3 v^3 G_{33}^C + g_0^2 v^2 G_{31}^D + g_0^2 V^2 G_{35}^D \quad (D-208)$$

Se multiplica y divide par $g_0 - g_0^3 V^2$

$$G_{33}^D = \frac{g_0 - g_0^3 V^2}{1 - 3g_0^2 V^2} + \frac{g_0 - g_0^3 V^2}{1 - 3g_0^2 V^2} \cdot \frac{2g_0^3 V^3}{g_0 - g_0^3 V^2} G_{33}^C + \frac{g_0 - g_0^3 V^2}{1 - 3g_0^2 V^2} \cdot \frac{g_0^2 V^2}{g_0^2 - g_0^3 V^2} G_{31}^D + \frac{g_0 - g_0^3 V^2}{1 - 3g_0^2 V^2} \cdot \frac{g_0^2 V^2}{g_0 - g_0^3 V^2} G_{35}^D, \quad (D-209)$$

entonces:

$$G_{33}^D = g_{10} + g_{10}\omega_1 G_{33}^C + g_{10}\omega_2 G_{31}^A + g_{10}\omega_2 G_{35}^D. \quad (D-210)$$

Sitio D5

$$G_{55}^D = g_0 + g_0 V G_{56}^D + g_0 V G_{54}^D, \quad (D-211)$$

$$G_{56}^D = g_0 + g_0 V G_{55}^D + g_0 V G_{56}^C, \quad (D-212)$$

$$G_{54}^D = g_0 V G_{55}^D + g_0 V G_{54}^C + g_0 V G_{53}^D, \quad (D-213)$$

$$G_{56}^C = g_0 V G_{56}^D + g_0 V G_{55}^C, \quad (D-214)$$

$$G_{54}^C = g_0 V G_{55}^C + g_0 V G_{54}^D, \quad (D-215)$$

reemplazamos (D-214) en (D-212)

$$G_{56}^D = g_0 V G_{55}^D + g_0 V (g_0 V G_{56}^D + g_0 V G_{55}^C), \quad (D-216)$$

$$G_{56}^D = g_0 V G_{55}^D + g_0^2 V^2 G_{56}^D + g_0^2 V^2 G_{55}^C, \quad (D-217)$$

$$G_{56}^D - g_0^2 V^2 G_{56}^D = g_0 V G_{55}^D + g_0^2 V^2 G_{55}^C, \quad (D-218)$$

$$G_{56}^D = \frac{g_0 V G_{55}^D}{1 - g_0^2 V^2} + \frac{g_0^2 V^2 G_{55}^C}{1 - g_0^2 V^2}, \quad (D-219)$$

ahora reemplazamos (D-215) en (D-213).

$$G_{54}^D = g_0 V G_{55}^D + g_0 V (g_0 V G_{55}^C + g_0 V G_{54}^D) + g_0 V G_{53}^D, \quad (D-220)$$

$$G_{54}^D = g_0 V G_{55}^D + g_0^2 V^2 G_{55}^C + g_0^2 V^2 G_{54}^D + g_0 V G_{53}^D, \quad (D-221)$$

$$G_{54}^D - g_0^2 V^2 G_{54}^D = g_0 V G_{55}^D + g_0^2 V^2 G_{55}^C + g_0 V G_{53}^D, \quad (D-222)$$

$$G_{54}^D = \frac{g_0 V G_{55}^D + g_0^2 V^2 G_{55}^C + g_0 V G_{53}^D}{1 - g_0^2 V^2}, \quad (D-223)$$

Reemplazamos (D-219) y (D-223) en (D-211)

$$G_{55}^D = g_0 + g_0 V \left(\frac{g_0 V G_{55}^D + g_0^2 V^2 G_{55}^C}{1 - g_0^2 V^2} \right) + g_0 V \left(\frac{g_0 V G_{55}^D + g_0^2 V^2 G_{55}^C + g_0 V G_{53}^D}{1 - g_0^2 V^2} \right), \quad (D-224)$$

$$G_{55}^D - g_0^2 V^2 G_{55}^D = g_0 = g_0^3 V^2 + 2g_0^2 V^2 G_{44}^D + 2g_0^3 V^3 G_{55}^C + g_0^2 V^2 G_{53}^D, \quad (D-225)$$

$$G_{55}^D - 3g_0^2 V^2 G_{55}^D = g_0 - g_0^3 V^2 + 2g_0^3 V^3 G_{55}^C + g_0^2 V^2 G_{53}^D, \quad (D-226)$$

$$G_{55}^D = \frac{g_0 - g_0^3 V^2}{1 - 3g_0^2 V^2} + \frac{g_0 - g_0^3 V^2}{1 - 3g_0^2 V^2} \cdot \frac{2g_0^3 V^3}{g_0 - g_0^3 V^2} G_{55}^C + \frac{g_0 - g_0^3 V^2}{1 - 3g_0^2 V^2} \cdot \frac{g_0^2 V^2}{g_0 - g_0^3 V^2} G_{53}^D, \quad (D-227)$$

entonces,

$$G_{55}^D = g_{10} + g_{10}\omega_1 G_{55}^C + g_{10}\omega_2 G_{53}^D. \quad (\text{D-228})$$

Terminada la decimación es sistema se reduce de la siguiente forma.

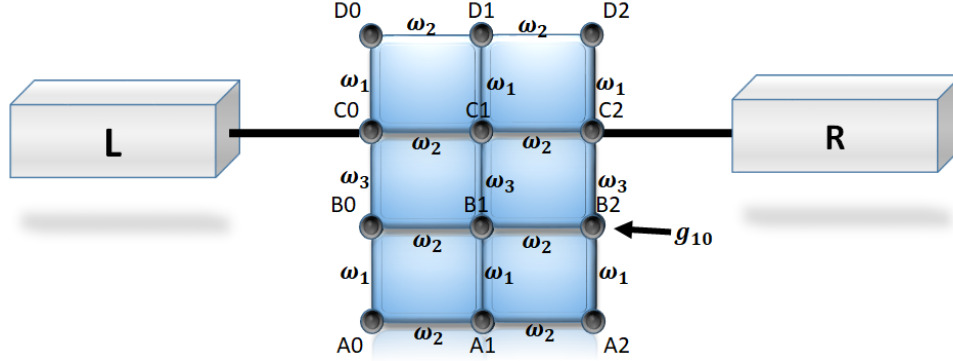


Figura D-3.: primera decimación de la nanocinta de grafeno tipo Zig - Zag, sitios renombrados con nuevas energías de acople ω_1 , ω_2 , ω_3 y función de Green g_{10}

Ahora se decima el sistema obtenido, para esto vuelve y se empela la ecuación (2-90) para obtener las funciones de los sitios C0, C1, C2, B0, B1 y B2.

Sitio C0

$$G_{00}^C = g_{10} + g_{10}\omega_1 G_{00}^D + g_{10}\omega_3 G_{00}^B + g_{10}\omega_2 G_{01}^C, \quad (\text{D-229})$$

$$G_{00}^D = g_{10} + g_{10}\omega_1 G_{00}^C, \quad (\text{D-230})$$

reemplazamos (D-230) en (D-229)

$$G_{00}^C = g_{10} + g_{10}\omega_1 (g_{10} + g_{10}\omega_1 G_{00}^C) + g_{10}\omega_3 G_{00}^B + g_{10}\omega_2 G_{10}^C, \quad (\text{D-231})$$

$$G_{00}^C = g_{10} + g_{10}^2\omega_1 + g_{10}^2\omega_1^2 G_{00}^C + g_{10}\omega_3 G_{00}^B + g_{10}\omega_2 G_{10}^C, \quad (\text{D-232})$$

$$G_{00}^C (1 - g_{10}^2\omega_1^2) = g_{10} + g_{10}^2\omega_1 + g_{10}\omega_3 G_{00}^B + g_{10}\omega_2 G_{10}^C, \quad (\text{D-233})$$

se multiplica y divide por: $g_{10} + g_{10}^2\omega_1$

$$G_{00}^c = \frac{g_{10} + g_{10}^2\omega_1}{1 - g_{10}^2\omega_1^2} + \frac{g_{10} + g_{10}^2\omega_1}{1 - g_{10}^2\omega_1^2} \cdot \frac{g_{10}\omega_3}{g_{10} + g_{10}^2\omega_1} + \frac{g_{10} + g_{10}^2\omega_1}{1 - g_{10}^2\omega_1^2} \cdot \frac{g_{10}\omega_2}{g_{10} + g_{10}^2\omega_1} G_{10}^C, \quad (\text{D-234})$$

donde,

$$\frac{g_{10} + g_{10}^2\omega_1}{1 - g_{10}^2\omega_1^2} = g_{11}, \quad (\text{D-235})$$

$$\frac{g_{10}\omega_2}{g_{10} + g_{10}^2\omega_1} = \omega_4, \quad (\text{D-236})$$

$$\frac{g_{10}\omega_3}{g_{10} + g_{10}^2\omega_1} = \omega_5, \quad (\text{D-237})$$

entonces,

$$G_{00}^C = g_{11} + g_{11}\omega_5 G_{00}^B + g_{11}\omega_4 G_{10}^C. \quad (\text{D-238})$$

Sitio C1

$$G_{11}^C = g_{10} + g_{10}\omega_1 G_{11}^D + g_{10}\omega_3 G_{11}^B + g_{10}\omega_2 G_{10}^C + g_{10}\omega_2 G_{12}^C, \quad (\text{D-239})$$

$$G_{11}^D = g_{10} + g_{10}\omega_1 G_{11}^C, \quad (\text{D-240})$$

reemplazamos (D-240) en (D-239)

$$G_{11}^C = g_{10} + g_{10}\omega_2 G_{10}^C + g_{10}\omega_2 G_{10}^C + g_{10}\omega_1 (g_{10} + g_{10}\omega_1 G_{11}^C) + g_{10}\omega_3 G_{11}^B, \quad (\text{D-241})$$

$$G_{11}^C = g_{10} + g_{10}\omega_2 G_{10}^C + g_{10}\omega_2 G_{12}^C + g_{10}^2\omega_1 + g_{10}^2\omega_1^2 G_{11}^C + g_{10}\omega_3 G_{11}^B, \quad (\text{D-242})$$

$$G_{11}^C - g_{10}^2\omega_1^2 G_{11}^C = g_{10} + g_{10}^2\omega_1 + g_{10}\omega_2 G_{10}^C + g_{10}\omega_2 G_{12}^C + g_{10}\omega_3 G_{11}^B, \quad (\text{D-243})$$

se multiplica y divide por: $g_{10} + g_{10}^2\omega_1$

$$G_{11}^C = \frac{g_{10} + g_{10}^2\omega_1}{1 - g_{10}^2\omega_1^2} + \frac{g_{10} + g_{10}^2\omega_1}{1 - g_{10}^2\omega_1^2} \cdot \frac{g_{10}\omega_2}{g_{10} + g_{10}^2\omega_1} G_{10}^C + \frac{g_{10} + g_{10}^2\omega_1}{1 - g_{10}^2\omega_1^2} \cdot \frac{g_{10}\omega_2}{g_{10} + g_{10}^2\omega_1} G_{12}^C + \frac{g_{10} + g_{10}^2\omega_1}{1 - g_{10}^2\omega_1^2} \cdot \frac{g_{10}\omega_3}{g_{10} + g_{10}^2\omega_1^B}, \quad (\text{D-244})$$

entonces

$$G_{11}^C = g_{11} + g_{11}\omega_4 G_{10}^C + g_{11}\omega_4 G_{12}^C + g_{11}\omega_5 G_{11}^B. \quad (\text{D-245})$$

Sitio C2

$$G_{22}^C = g_{10} + g_{10}\omega_1 G_{22}^D + g_{10}\omega_3 G_{22}^B + g_{10}\omega_2 G_{21}^C, \quad (\text{D-246})$$

$$G_{22}^D = g_{10} + g_{10}\omega_1 G_{22}^C, \quad (\text{D-247})$$

reemplazamos (D-247) en (D-246)

$$G_{22}^C = g_{10} + g_{10}\omega_1 (g_{10} + g_{10}\omega_1 G_{22}^C) + g_{10}\omega_3 G_{22}^B + g_{10}\omega_2 G_{12}^C, \quad (\text{D-248})$$

$$G_{22}^C = g_{12} + g_{10}^2\omega_1 + g_{10}^2\omega_1^2 G_{22}^C + g_{10}\omega_3 G_{22}^B + g_{10}\omega_2 G_{12}^C, \quad (\text{D-249})$$

$$G_{22}^C (1 - g_{10}^2\omega_1^2) = g_{10} + g_{10}^2\omega_1 + g_{10}\omega_3 G_{22}^B + g_{10}\omega_2 G_{12}^C, \quad (\text{D-250})$$

se multiplica y divide por: $g_{10} + g_{10}^2\omega_1$

$$G_{22}^C = \frac{g_{10} + g_{10}^2\omega_1}{1 - g_{10}^2\omega_1^2} + \frac{g_{10} + g_{10}^2\omega_1}{1 - g_{10}^2\omega_1^2} \cdot \frac{g_{10}\omega_3}{g_{10} + g_{10}^2\omega_1} + \frac{g_{10} + g_{10}^2\omega_1}{1 - g_{10}^2\omega_1^2} \cdot \frac{g_{10}\omega_2}{g_{10} + g_{10}^2\omega_1} G_{12}^C, \quad (\text{D-251})$$

entonces,

$$G_{22}^C = g_{11} + g_{11}\omega_5 G_{22}^B + g_{11}\omega_4 G_{12}^C. \quad (\text{D-252})$$

reemplazando (D-263) en (D-262).

$$G_{11}^A = g_{11} + g_{11}\omega_4 G_{10}^A + g_{11}\omega_4 G_{12}^A + g_{11}\omega_5 (g_{11} + g_{11}\omega_5 G_{11}^A), \quad (\text{D-264})$$

$$G_{11}^A = g_{11} + g_{11}\omega_4 G_{10}^A + g_{11}\omega_4 G_{12}^A + g_{11}^2\omega_5 + g_{11}^2\omega_5^2 G_{11}^A, \quad (\text{D-265})$$

$$G_{11}^A = g_{11}^2\omega_5^2 G_{11}^A = g_{11} + g_{11}^2\omega_5 + g_{11}\omega_4 G_{10}^A + g_{11}\omega_4 G_{12}^A, \quad (\text{D-266})$$

multiplicando y dividiendo entre $g_{11} + g_{11}^2\omega_5$.

$$G_{11}^A = \frac{g_{11} + g_{11}^2\omega_5}{1 - g_{11}^2\omega_5^2} + \frac{g_{11} + g_{11}^2\omega_5}{1 - g_{11}^2\omega_5^2} \frac{g_{11}\omega_4}{1 - g_{11}^2\omega_5^2} G_{10}^A + \frac{g_{11} + g_{11}^2\omega_5}{1 - g_{11}^2\omega_5^2} \frac{g_{11}\omega_4}{1 - g_{11}^2\omega_5^2} G_{12}^A, \quad (\text{D-267})$$

entonces.

$$G_{11}^A = g_{12} + g_{12}\omega_6 G_{10}^A + g_{12}\omega_6 G_{12}^A \quad (\text{D-268})$$

Sitio A2.

$$G_{22}^A = g_{11} + g_{11}\omega_4 G_{21}^A + g_{11}\omega_5 G_{22}^B, \quad (\text{D-269})$$

$$G_{22}^B = g_{11} + g_{11}\omega_5 G_{22}^A, \quad (\text{D-270})$$

reemplazando (D-254) en (D-253).

$$G_{22}^A = g_{11} + g_{11}\omega_4 G_{21}^A + g_{11}\omega_5 (g_{11} + g_{11}\omega_5 G_{22}^A), \quad (\text{D-271})$$

$$G_{22}^A = g_{11} + g_{11}\omega_4 G_{21}^A + g_{11}^2\omega_5 + g_{11}^2\omega_5^2 G_{22}^A, \quad (\text{D-272})$$

$$G_{22}^A - g_{11}^2\omega_5^2 G_{22}^A = g_{11} + g_{11}^2\omega_5 + g_{11}\omega_4 G_{21}^A, \quad (\text{D-273})$$

multiplicando y dividiendo entre $g_{11} + g_{11}^2\omega_5$.

$$G_{22}^A = \frac{g_{11} + g_{11}^2\omega_5}{1 - g_{11}^2\omega_5^2} + \frac{g_{11} + g_{11}^2\omega_5}{1 - g_{11}^2\omega_5^2} \frac{g_{11}\omega_4}{1 - g_{11}^2\omega_5^2} G_{21}^A, \quad (\text{D-274})$$

entonces.

$$G_{22}^A = g_{12} + g_{12}\omega_6 G_{21}^A \quad (\text{D-275})$$

Terminada la decimación, el sistema final queda de la siguiente forma.

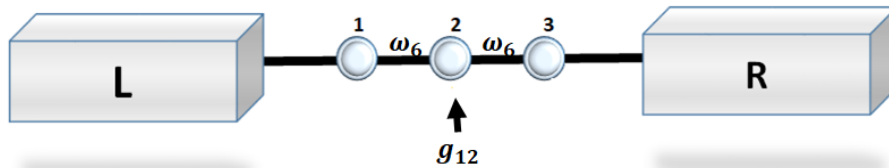


Figura D-5.: Decimación final de la nanocinta de grafeno tipo Zig - Zag con nuevas energías efectivas de acople ω_6 , y nueva función de Green g_{12} para cada sitio.

E. Anexo: Objetivos

E.1. General

Estudiar el efecto del tipo de borde en el transporte electrónico a través de nanocintas de grafeno o fosforeno.

E.1.1. Específicos

- Modelar las nanocintas de fosforeno o grafeno que permita tener en cuenta el efecto de los bordes.
- Determinar y definir un modelo computacional para evaluar el transporte electrónico a través de nanocintas de grafeno o fosforeno.
- Calcular el transporte electrónico para diferentes nanocintas en función del tipo de borde y del ancho de las nanocintas.

Bibliografía

- [1] https://www3.uji.es/rajadell/index_files/IA23/tema3.pdf. — Accessed : 2024-1-21
- [2] Compuesto de P25-grafeno como fotocatalizador de alto rendimiento. (2010)
- [3] ARÉVALO RAMÍREZ, Jhojan A.: *Crecimiento y caracterización de electrodos de grafeno por exfoliación electroquímica*, Universidad Nacional de Colombia, Tesis de Grado
- [4] ASLLA QUISPE, Abraham P. *Magnetoresistencia del grafeno*. 2014
- [5] BARANGER, Harold U. ; STONE, A D.: Electrical linear-response theory in an arbitrary magnetic field: A new Fermi-surface formation. En: *Physical Review B* 40 (1989), Nr. 12, p. 8169
- [6] BARREIRO CARRASCO, Pablo [u. a.]. *Funciones de Green y aplicaciones en Física*. 2019
- [7] BASTOS, Ramón C.: Transporte electrónico dentro y fuera de equilibrio en nanocintas de grafeno. (2014)
- [8] BELLETTI, Gustavo D.: *Modelado computacional de películas delgadas de óxidos ferromagnéticos: efectos de un gradiente de deformación y su interacción con nanocintas de grafeno*, Universidad Nacional del Litoral, Tesis de Grado, 2016
- [9] BENÍTEZ-MARTÍNEZ, S: *Contribuciones del grafeno a la Nanociencia y Nanotecnología analíticas*, Universidad de Córdoba, Tesis de Grado, 2015
- [10] BENÍTEZ-MARTÍNEZ, S: *Contribuciones del grafeno a la Nanociencia y Nanotecnología analíticas*. (2015)
- [11] CABRIALES GÓMEZ, Roberto C.: Luminiscencia en polímeros semiconductores. En: *Ingenierías* 7 (2004), Nr. 23, p. 12-16
- [12] DUQUE DAZA, Mauricio F. *Transporte eléctrico en una nanoestructura grafeno-superconductor*. 2011
- [13] ECONOMOU, E.N.: *Green's Functions in Quantum Physics*. Springer Berlin Heidelberg, 2010 (Springer Series in Solid-State Sciences). — ISBN 9783642066917

- [14] ESTÉVEZ BALLESTEROS, María [u. a.]: Materiales 2D para dispositivos eléctricos posibles. (2021)
- [15] FISHER, Daniel S. ; LEE, Patrick A.: Relation between conductivity and transmission matrix. En: *Physical Review B* 23 (1981), Nr. 12, p. 6851
- [16] H., Ojeda J.: *Propiedades de Transporte de hilos moleculares y alambres cuánticos*, Universidad Técnica Federico Santa María, Tesis de Grado, 2010
- [17] HUAMANÍ CORREA, Jorge L.: Propiedades electrónicas y de transporte de nanocintas de grafeno y dicalcogenuros de metales de transición mediante la interacción espín-órbita usando el método tight binding. (2022)
- [18] IZQUIERDO DÍAZ, Edgar A.: Funciones de Green aplicadas a la solución de problemas de contorno basados en la ecuación diferencial de Airy. (2018)
- [19] LEIVA, Marcos César Amor P. *Estudio de las propiedades de transporte electrónico en sistemas nanoestructurados: defectos en nanocintas de grafeno del tipo armchair*. 2012
- [20] LEWENKOPF, Caio H. ; MUCCIOLO, Eduardo R.: The recursive Green's function method for graphene. En: *Journal of Computational Electronics* 12 (2013), p. 203–231
- [21] LUQUE, Guillermina L. ; ROJAS, Mariana I. ; LEIVA, Ezequiel P.: Estudio DFT de la cinética de apertura de nanotubos de carbono para dar nanocintas de grafeno con bordes funcionalizados.
- [22] MARTÍNEZ, Gerardo ; SALAVAGIONE, Horacio J.: Nanocompuestos poliméricos a partir de grafeno. (2010)
- [23] MARTÍNEZ, V G. ; LOPEZ, RM ; VELASCO, CB: Estudio de la estabilidad del Óxido de grafeno con el tiempo. En: *Universidad de Oviedo. Trabajo fin de Master* (2013)
- [24] MEDINA CUY, Fabian G. [u. a.]. *Propiedades térmicas y de transporte de la molécula de Bifenilo*. 2014
- [25] MUÑOZ, Edgar: El grafeno: química y aplicaciones. (2016)
- [26] MUÑOZ GÓMEZ, Roberto: Tesis Doctorales: "Síntesis de grafeno sobre sustratos dieléctricos mediante deposición química en fase vapor asistida por plasma". En: *Revista 100cias@ uned* 11 (2018), p. 24–26
- [27] OJEDA, JH ; MEDINA, FG ; BECERRA-ALONSO, David: Electronic properties of a molecular system with Platinum. En: *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures* 94 (2017), p. 78–86

-
- [28] PADILLA, Andrés S.: *Propiedades del grafeno y aportaciones en la construcción sostenible del futuro de México.*, Universidad Nacional Autónoma de México, Tesis de Grado, 2020
- [29] PAZ ORTEGA, Irene. *El grafeno: posibilidades del grafeno en la arquitectura.* 2018
- [30] PEÑA, Javier R. ; MORENO, Pilar A.: Almacenamiento de energía en bordes de grano en grafeno.
- [31] QUIJAS, Paulo Cesar G. [u. a.]: Física Básica de Grafeno. (2016)
- [32] RODRÍGUEZ GONZÁLEZ, Claramaría ; KHARISSOVA, Oxana V.: Propiedades y aplicaciones del grafeno. En: *Ingenierías* 11 (2008), Nr. 38, p. 17–23
- [33] ROJAS-CUERVO, A. M. ; FONSECA-ROMERO, K. M. ; REY-GONZÁLEZ, R. R.: Anisotropic Dirac cones in monatomic hexagonal lattices. A DFT study. 87 (2014), p. 67
- [34] ROJAS-CUERVO, Angela M. ; FONSECA-ROMERO, Karen M. ; REY-GONZÁLEZ, Rafael R.: Propiedades electrónicas de sistemas tipo panel de abejas en dos dimensiones. un estudio AB initio. En: *Momento* (2015), Nr. 50, p. 1–9
- [35] ROJAS CUERVO, Ángela M.: *Propiedades estructurales y electronicas de monocapas hexagonales de Si, Ge, GaN y GaAs. Un estudio ab initio*, Tesis de Grado, 2012
- [36] ROMERO GÓMEZ, Rosa M.: *Síntesis de grafeno derivado químicamente mediante la reducción química de óxido de grafeno*, Tesis de Grado, 2015
- [37] VALVERDE GUIJARRO, Ángel Luis. *Estudio de las propiedades del grafeno y sus posibilidades.* 2014
- [38] WU MEI, Wei S. *Propiedades electrónicas de bicapas de grafeno formando patrones de moiré.* 2017