



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO

FACULTAD DE CIENCIAS

CONDUCTANCIA ELÉCTRICA Y LOCALIZACIÓN EN
CADENAS DE KOLAKOSKI.

T E S I S

QUE PARA OBTENER EL TÍTULO DE:

FÍSICO

P R E S E N T A :

JULIO MARTÍN GÓMEZ TELÉSFORO

TUTOR

DRA. VICENTA SÁNCHEZ MORALES



CIUDAD UNIVERSITARIA, Cd. Mx., 2020



Universidad Nacional
Autónoma de México

Dirección General de Bibliotecas de la UNAM

Biblioteca Central



UNAM – Dirección General de Bibliotecas
Tesis Digitales
Restricciones de uso

DERECHOS RESERVADOS ©
PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL

Todo el material contenido en esta tesis esta protegido por la Ley Federal del Derecho de Autor (LFDA) de los Estados Unidos Mexicanos (México).

El uso de imágenes, fragmentos de videos, y demás material que sea objeto de protección de los derechos de autor, será exclusivamente para fines educativos e informativos y deberá citar la fuente donde la obtuvo mencionando el autor o autores. Cualquier uso distinto como el lucro, reproducción, edición o modificación, será perseguido y sancionado por el respectivo titular de los Derechos de Autor.

Agradecimientos

Este trabajo existe gracias al apoyo ofrecido por parte de muchas personas, en especial mi familia. Finalmente, agradezco a la DGTIC por permitirme realizar algunos de los cálculos numéricos en Miztli y al proyecto PAPIIT IN115519.

Resumen

Se estudió el transporte eléctrico y localización, por medio de la densidad de estados, transmitancia y el IPR, de 5 cadenas atómicas aperiódicas (construidas a partir de la secuencia de Kolakoski), a temperatura $0K$, conectadas a dos saturadores periódicos semi-infinitos, bajo el formalismo del Hamiltoniano de amarre fuerte y la conductancia de Landauer. Se supone $T = 0K$ con el fin de disminuir la presencia de fonones, en caso contrario es necesario incluir un Hamiltoniano que describa estas excitaciones que contribuyen al transporte cuántico. Las cadenas contaron con más de 10^8 átomos con el fin de estudiar sistemas macroscópicos. En un sistema real siempre aparecerán imperfecciones e impurezas, así que se estudiaron los problemas de enlaces, sitios y mixto contando con un total de cinco casos (tres de enlaces, uno de sitios y uno mixto). Para obtener las cantidades antes mencionadas se usó el lenguaje de programación de Julia v1.2 usando flotantes del tipo *BigFloat* debido a que los términos involucrados se encontraban fuera del orden de $10^{\pm 5000}$. La densidad de estados (DOS) de un sistema nos indica la cantidad de estados por intervalo de energía. En el caso del transporte electrónico, al conocer la DOS sabemos la cantidad de portadores de carga que pueden participar en la conductividad. Bajo el formalismo de la conductancia de Landauer, a temperatura $0K$, basta con conocer la transmitancia para determinar la conductancia. Se desarrolló el método de renormalización para la densidad de estados, el hamiltoniano, la matriz de transferencia y el IPR con el fin de estudiarlos de manera exacta. Uno de los problemas de enlaces presentó una mayor cantidad de GAPs en comparación a los otros; se observó que, cuando las energías de sitio eran diferentes de cero, la banda de energía de la cadena se recorría. En todos los casos se encontraron picos de transmitancia cercanos a 1; se demostró de forma analítica qué generaciones

del sistema presentaban estados transparentes cuando la energía era cero para uno de los problemas de enlaces. Ninguno de los espectros de los casos mostró tener un estado totalmente localizado.

Introducción general

En mecánica cuántica el estudio de sistemas periódicos, tales como los cristales, resulta relativamente sencillo debido a que el potencial de la ecuación de Schrödinger puede reducirse a un potencial efectivo. Con ello el cálculo necesario para resolver el Hamiltoniano del sistema se reduce considerablemente. Sin embargo, los sistemas reales con una estructura cristalina presentarán imperfecciones o impurezas y fronteras, con lo que no es posible proponer un potencial periódico. Si se quiere analizar sistemas macroscópicos los grados de libertad serán del orden de 10^{8n} , con n la dimensión del sistema. Por esta razón, aún conociendo la distribución que tiene cada átomo de la red es imposible resolver el problema de manera directa.

En este trabajo se estudió el transporte electrónico de cadenas atómicas de 100663295 átomos construidas con base en la sucesión de Kolakoski bajo el formalismo del Hamiltoniano de enlace fuerte. Para cuantificar el comportamiento electrónico se analizó la densidad de estados, la transmitancia y el IPR. Se desarrolló el método de renormalización a estas cantidades obteniéndolas de manera exacta.

En el capítulo uno se da una introducción sobre sistemas periódicos y aperiódicos, el formalismo del Hamiltoniano de amarre fuerte y la conductancia de Landauer, las herramientas matemáticas usadas a lo largo de la tesis. También se presenta la sucesión de Kolakoski con la que se construyó el sistema de estudio y las ideas del método de renormalización y su aplicación.

En el capítulo dos se hizo un análisis de los espectros de las propiedades físicas de los problemas de enlaces, sitios y mixto, contando con un total de cinco casos diferentes y en el capítulo tres se exponen los resultados más relevantes obtenidos. En la sección de los apéndices se encuentran los cálculos del método de la renormalización

aplicado al Hamiltoniano, la DOS, la matriz de transferencia y el IPR.

Índice general

Agradecimientos	II
Resumen	III
Introducción general	V
1. Introducción	1
1.1. Cristales	1
1.1.1. Funciones de Bloch y Wannier	5
1.2. Cuasicristales	6
1.3. Hamiltoniano de enlace fuerte	7
1.3.1. Caso periódico	8
1.4. Función de Green	9
1.5. Conductancia de Landauer	11
1.6. Matriz de transferencia	13
1.7. Localización, IPR	14
1.8. Renormalización	15
1.9. Sucesión de Kolakoski	16
1.9.1. Cadena atómica y renormalización	17
1.9.2. Matriz de transferencia	22
1.9.3. Localización, IPR	26
2. Análisis de las Propiedades Físicas	28
2.1. Problema de enlaces	28

2.2. Problema de sitios	34
2.3. Problema mixto	37
2.4. Estado transparente	40
3. Conclusiones	43
A. Renormalización, Hamiltoniano	46
B. Renormalización, DOS	49
C. Renormalización, Matriz de transferencia.	56
D. Renormalizacion, IPR	60

Capítulo 1

Introducción

1.1. Cristales

Un cristal ideal es la repetición infinita de un grupo de átomos, al conjunto más pequeño de estos con el que se puede generar el cristal es llamado celda unitaria. La red cristalina (en tres dimensiones) puede ser descrita por tres vectores linealmente independientes, usualmente llamados vectores de traslación, \vec{a}_1 , \vec{a}_2 y \vec{a}_3 . Debido a la periodicidad de la estructura, en cualquier punto del cristal \vec{r} se tendrán las mismas propiedades físicas para todo \vec{r}' tal que

$$\vec{r}' = \vec{r} + u_1\vec{a}_1 + u_2\vec{a}_2 + u_3\vec{a}_3, \quad (1.1)$$

con u_1 , u_2 y u_3 enteros [Ashcroft et al., 1976, Kittel et al., 1976]. Los vectores \vec{a}_1 , \vec{a}_2 y \vec{a}_3 que forman el volumen más pequeño (dado por $V = \|\vec{a}_1 \cdot \vec{a}_2 \times \vec{a}_3\|$) son llamados vectores primitivos y celda primitiva al paralelepípedo definido por estos. Dados \vec{a}_1 , \vec{a}_2 y \vec{a}_3 y los tres ángulos α , β y γ , determinados por $\cos^{-1} \frac{\vec{a}_i \cdot \vec{a}_j}{\|\vec{a}_i\| \|\vec{a}_j\|}$, forman siete sistemas, que determinan la geometría de la red, y catorce tipos de redes cristalinas, describiendo la presencia de los puntos en el cristal.

Sistema cristalino	Número de redes cristalinas	Relación entre aristas y ángulos
Triclínico	1	$\ a_1\ \neq \ a_2\ \neq \ a_3\ \neq \ a_1\ , \alpha \neq \beta \neq \gamma \neq \alpha$
Monoclínico	2	$\ a_1\ \neq \ a_2\ \neq \ a_3\ \neq \ a_1\ , \alpha = \beta = 90 \neq \gamma$
Ortorrómbico	4	$\ a_1\ \neq \ a_2\ \neq \ a_3\ \neq \ a_1\ , \alpha = \beta = \gamma = 90$
Tetragonal	2	$\ a_1\ = \ a_2\ \neq \ a_3\ , \alpha = \beta = \gamma = 90$
Cúbico	3	$\ a_1\ = \ a_2\ = \ a_3\ , \alpha = \beta = \gamma = 90$
Trigonal	1	$\ a_1\ = \ a_2\ = \ a_3\ , 90 \neq \alpha = \beta = \gamma < 120$
Hexagonal	1	$\ a_1\ = \ a_2\ \neq \ a_3\ , 90 = \alpha = \beta, \gamma = 120$

Tabla 1.1: Relación de los vectores primitivos en los distintos sistemas cristalinos en \mathbb{R}^3

A las redes cristalinas generadas por celdas primitivas se les conoce como Redes de Bravais, en el caso de tres dimensiones son catorce y en el de dos son cinco. El parámetro de red es la norma de los vectores que generan la celda; los nodos son los puntos que se encuentran dentro de la celda; el número de coordinación de un punto en la red es el número de puntos de la red más cercanos a dicho punto. En algunos casos es útil considerar que el tamaño físico de los puntos de la red se extiende hasta estar en contacto con su vecino más cercano, a esta aproximación se le llama empaquetamiento compacto. El factor de empaquetamiento es el volumen usado por los puntos de la celda.

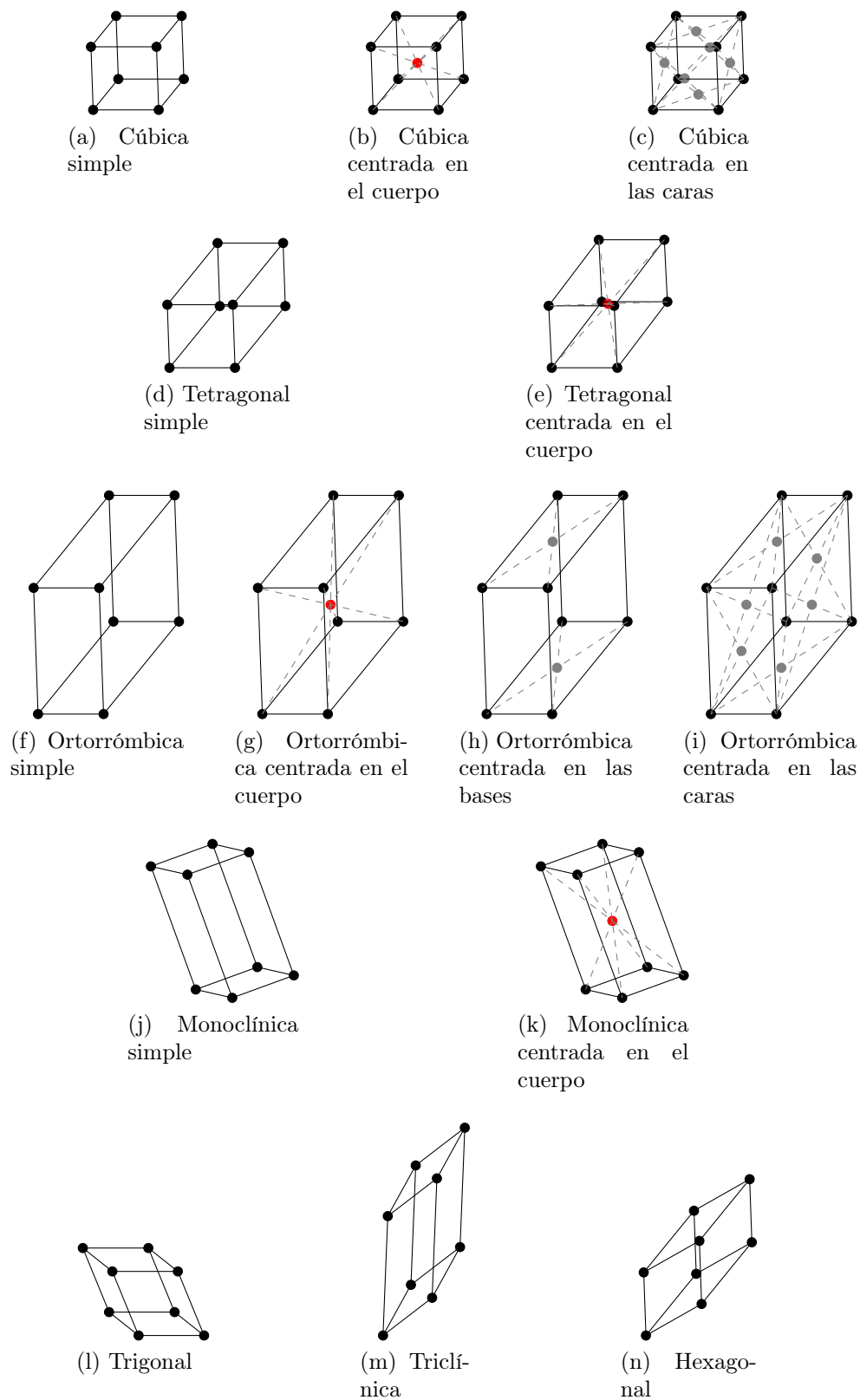


Figura 1.1: Redes de Bravais para un espacio de tres dimensiones.

Espacio recíproco

Los cristales tienen periodicidad por lo que una herramienta útil es la transformada de Fourier, así que es necesario desarrollar una base que describa al cristal en el espacio recíproco. Supongamos que f es una función periódica con periodo $\vec{R} = n_1\vec{r}_1 + n_2\vec{r}_2 + n_3\vec{r}_3$ (n_i entero y \vec{r}_i un vector) en el espacio real de dimensión tres. Expresando a f por medio de su transformada de Fourier tenemos que

$$f(\vec{r}) = \sum_i f_{b_i} e^{i\vec{b}_i \cdot \vec{r}}, \quad (1.2)$$

y considerando que $f(r) = f(r + R)$

$$f(\vec{r} + \vec{R}) = \sum_i f_{b_i} e^{i\vec{b}_i \cdot (\vec{r} + \vec{R})} = \sum_i f_{b_i} e^{i\vec{b}_i \cdot \vec{r}} e^{i\vec{b}_i \cdot \vec{R}} = f(\vec{r}); \quad (1.3)$$

por tanto $e^{i\vec{b}_i \cdot \vec{R}} = 1$. Esto sucede cuando

$$\vec{b}_i \cdot \vec{R} = 2\pi k, \quad (1.4)$$

con k un entero. En particular

$$e^{i\vec{b} \cdot \vec{R}} = e^{i\vec{b} \cdot (n_1\vec{r}_1 + n_2\vec{r}_2 + n_3\vec{r}_3)} = e^{i\vec{b} \cdot n_1\vec{r}_1} e^{i\vec{b} \cdot n_2\vec{r}_2} e^{i\vec{b} \cdot n_3\vec{r}_3}, \quad (1.5)$$

$$e^{i\vec{b} \cdot n_1\vec{r}_1} = 1, \quad (1.6)$$

$$e^{i\vec{b} \cdot n_2\vec{r}_2} = 1, \quad (1.7)$$

$$e^{i\vec{b} \cdot n_3\vec{r}_3} = 1, \quad (1.8)$$

se satisface si $\vec{b} \cdot \vec{r}_i n_i = 2\pi k$. Los vectores $\vec{b}_1, \vec{b}_2, \vec{b}_3$ que satisfacen dichas condiciones forman la base de la red recíproca [Cohen and Chelikowsky, 2012]

$$\vec{b}_1 = 2\pi \frac{\vec{r}_2 \times \vec{r}_3}{\vec{r}_1 \cdot \vec{r}_2 \times \vec{r}_3}, \quad (1.9)$$

$$\vec{b}_2 = 2\pi \frac{\vec{r}_3 \times \vec{r}_1}{\vec{r}_1 \cdot \vec{r}_2 \times \vec{r}_3}, \quad (1.10)$$

$$\vec{b}_3 = 2\pi \frac{\vec{r}_1 \times \vec{r}_3}{\vec{r}_2 \cdot \vec{r}_2 \times \vec{r}_3}, \quad (1.11)$$

Debido a cómo están contruidos los vectores de la red recíproca se tiene que $\vec{b}_i \cdot \vec{r}_j = \delta_{i,j} 2\pi$.

1.1.1. Funciones de Bloch y Wannier

Al escribir la ecuación de Schrödinger de una partícula dentro de un cristal se usa un potencial efectivo periódico tal que $\hat{V}(\vec{r} + \vec{R}) = \hat{V}(\vec{r})$, con $\vec{R} = n_1 \vec{r}_1 + n_2 \vec{r}_2 + n_3 \vec{r}_3$. Las funciones de onda generadas por este tipo de potencial son funciones de Bloch y tienen la forma

$$\psi_k(\vec{r}) = e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} u_k(\vec{r}), \quad (1.12)$$

donde u_k es una función periódica de periodo \vec{R} , $u_k(\vec{r} + \vec{R}) = u_k(\vec{r})$ [Ashcroft et al., 1976, Callaway, 2013, De La Peña, 2014]. Es fácil comprobar que ψ_k también es periódica

$$\psi_k(\vec{r} + \vec{R}) = e^{i\vec{k} \cdot (\vec{r} + \vec{R})} u_k(\vec{r} + \vec{R}), \quad (1.13)$$

$$= e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}} u_k(\vec{r}), \quad (1.14)$$

$$= e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} u_k(\vec{r}), \quad (1.15)$$

$$= \psi_k(\vec{r}). \quad (1.16)$$

Las funciones de Bloch se comportan como ondas planas moduladas por una función periódica. Las funciones de Wannier son la transformada de Fourier de las funciones de onda de Bloch, para distintos sitios de la red forman un conjunto ortonormal y

completo. Por lo que las funciones de Wannier son muy útiles para expresar estados electrónicos en los cristales [Cohen and Chelikowsky, 2012],

$$|l\rangle = \sum e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} \frac{1}{\sqrt{N}} |\psi\rangle. \quad (1.17)$$

Las funciones de Wannier permiten describir estados localizados [Marzari and Vanderbilt, 1997], más adelante veremos la importancia que tiene la presencia de estados localizados en la conductancia.

1.2. Cuasicristales

En 1984 D. Shechtman [Shechtman et al., 1984] observó que al enfriar rápidamente una mezcla líquida de aluminio y manganeso se obtenía una aleación con un patrón de difracción de puntos discretos que presentaba una estructura de icosaedro. Esto no era compatible con la simetría de rotación de un cristal porque es invariante a rotaciones de $\frac{2}{5}\pi$ radianes, la aleación tampoco mostraba simetría de traslación por lo que todo apuntaba a que no era un cristal. El hecho de que los cuasicristales presenten propiedades cristalinas sin poseer una estructura periódica despertó un gran interés en estudiarlos.

Los cuasicristales tienen una estructura que posee cierto orden; una forma de estudiar esta estructura es por medio de funciones cuasiperiódicas. Formalmente f es cuasiperiódica si para todo $\epsilon > 0$ existe un $\tau > 0$ tal que para todo x se cumple que $|f(x + \tau) - f(x)| < \epsilon$, es interesante notar que las funciones uniformemente continuas son cuasiperiódicas. Una particularidad de las funciones cuasiperiódicas es que tienen asociada una serie de Fourier. Por ejemplo,

$$f(x) = \cos \alpha x + \sin \beta x \quad (1.18)$$

tiene la forma de una serie de Fourier, sin embargo, si el cociente $\frac{\alpha}{\beta}$ es irracional entonces f no será periódica. Para poder generar la función en el espacio recíproco será necesario una base de dos dimensiones. De la misma forma la dimensión de la

base que genere la red de un cuasicristal será mayor que la dimensión del espacio en el que se encuentre.

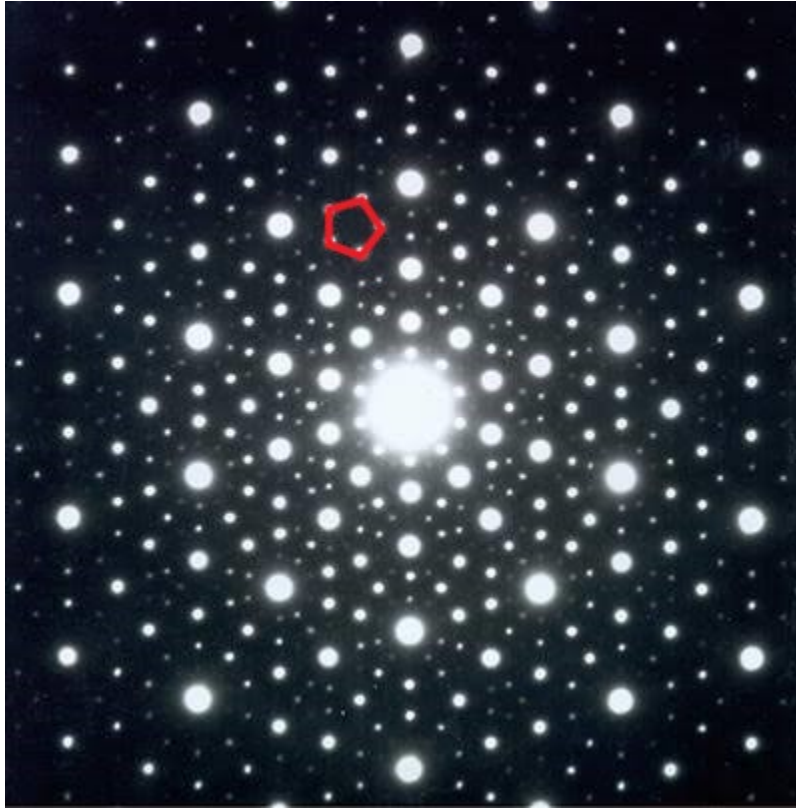


Figura 1.2: Patrón de difracción electrónica de una muestra de $Al_{86}Mn_{14}$, el cuál presenta una fase icosaedral [Shechtman et al., 1984]

El estudio de sistemas desordenados y de dimensión menor a tres han hecho grandes avances tecnológicos en la fabricación de dichos sistemas, tales como los semiconductores, por lo que el interés por conocer el comportamiento de sus propiedades es mayor. Para estudiar un sistema cuántico es necesario establecer un Hamiltoniano que lo describa, a continuación se presenta el modelo de enlace fuerte.

1.3. Hamiltoniano de enlace fuerte

Al modelar un electrón bajo el potencial eléctrico de un cristal debemos partir de la ecuación de Schrödinger

$$\hat{H}\Psi = \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + \hat{V}(\vec{r})\right]\Psi = E\Psi. \quad (1.19)$$

Debido a que un cristal es periódico, aproximamos el potencial a un potencial efectivo resultado de las interacciones del electrón con cada átomo. Por tanto \hat{V} es periódico y las soluciones $|\psi\rangle$ serán funciones de Bloch o bien funciones de Wannier. La aproximación de Hamiltoniano de enlace fuerte consiste expandir los estados del cristal en orbitales atómicos de los N átomos que componen al cristal de forma tal que el traslape entre orbitales atómicos de diferentes átomos sea despreciable por lo que es necesario que dichos orbitales decaigan lo suficientemente rápido a una distancia interatómica [Ashcroft et al., 1976]

$$\Psi = \sum_{i=1}^N \alpha_i |i\rangle. \quad (1.20)$$

Sustituyendo 1.20 en 1.19 y considerando interacciones sólo a primeros vecinos

$$\hat{H} = \sum_l |l\rangle \epsilon_l \langle l| + \sum_{l,m} |l\rangle t_{l,m} \langle m|, t_{ll} = 0, \quad (1.21)$$

donde la energía de sitio $\epsilon_l = \langle l| \hat{H} |l\rangle$ es la energía necesaria para que el electrón se encuentre en el sitio l y la integral de salto $t_{l,m} = \langle l| \hat{H} |m\rangle$ es la probabilidad de que el electrón pase del sitio l al m [Anderson, 1958]. La idea general de este modelo es aproximar el sistema a un conjunto de pozos de potencial aprovechando que las funciones de Wannier son ortogonales para diferentes sitios. El cálculo de los parámetros ϵ_l y $t_{l,m}$ es complicado y suele realizarse de manera experimental o a primeros principios. Analicemos ahora el caso de un cristal simple.

1.3.1. Caso periódico

Supongamos un sistema cristalino periódico con una distancia interatómica a , igual en todas direcciones, y vectores primitivos $\{\vec{a}_j\}_{j=1}^d$ tales que $\vec{a}_j \cdot \vec{a}_l = a^2 \delta_{j,l}$, el Hamiltoniano de enlace fuerte a primeros vecinos es

$$\hat{H}_p = \sum_l |l\rangle \epsilon_0 \langle l| + \sum_{l,m} |l\rangle t \delta_{1,|l-m|} \langle m|. \quad (1.22)$$

La función de Bloch en términos de la función de Wannier es su transformada de Fourier

$$\Psi = \sum_j \frac{e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}_j}}{\sqrt{N}} |j\rangle, \quad (1.23)$$

por lo que sustituyendo 1.23 en la ecuación de Schrödinger con $H = \hat{H}_p$ encontramos que

$$E = \epsilon_0 + 2t \sum_{j=1}^d \cos k_j a, \quad (1.24)$$

con d la dimensión del espacio de la red y $k_j = \frac{\vec{a}_j \cdot \vec{k}}{|a|}$.

Las energías permitidas se encuentran acotadas dentro de un intervalo llamado banda de energía, que es simétrico alrededor de ϵ_0 , a las zonas donde las energías no son permitidas se les conoce como GAP (brecha) [Callaway, 2013]. Cuando estudiamos la conductancia de un sistema obtener la densidad de estados (DOS, Density Of States) es importante ya que nos da la cantidad de portadores de carga, una herramienta para obtener DOS es la función de Green.

1.4. Función de Green

Sea $\hat{L} : C^k \rightarrow C^j$ un operador diferencial, lineal, hermitiano e independiente del tiempo. Sea $\{\phi_n\}$ el conjunto de funciones propias del operador \hat{L} y $\{\lambda_n\}$ el conjunto de valores propios de \hat{L} , $\hat{L}\phi_n = \lambda_n\phi_n$. La función de Green, G , es solución de la ecuación diferencial no homogénea con condiciones a la frontera para r y r' .

$$[z - \hat{L}(\vec{r})]\hat{G}(\vec{r}, \vec{r}', z) = \delta(\vec{r} - \vec{r}'). \quad (1.25)$$

Supondremos z complejo y que $\{\phi_n\}$ es un conjunto completo y ortonormal que satisface las mismas condiciones de frontera que \hat{G} para \vec{r} y \vec{r}' . Reescribiendo la ecuación 1.25

$$(z - \hat{L})\hat{G}(z) = 1. \quad (1.26)$$

Como \hat{L} es hermitiano y z complejo, los valores propios de $z - \hat{L}$ son diferentes de cero por lo que \hat{G} tiene la siguiente forma

$$\hat{G}(z) = \frac{1}{z - \hat{L}}, \quad (1.27)$$

$$= \frac{1}{z - \hat{L}} \sum_n |\phi_n\rangle \langle \phi_n|, \quad (1.28)$$

$$= \sum_n \frac{|\phi_n\rangle \langle \phi_n|}{z - \lambda_n}, \quad (1.29)$$

Si el espectro de valores propios es continuo la suma pasa a ser una integral,

$$\hat{G}(\vec{r}, \vec{r}', z) = \sum_n \frac{\phi_n(\vec{r})\phi_n^*(\vec{r}')}{z - \lambda_n} + \int dk \frac{\phi_k(\vec{r})\phi_k^*(\vec{r}')}{z - \lambda_k}, \quad (1.30)$$

de esta forma $\hat{G}(z)$ es una función analítica en el plano complejo excepto en algunos puntos o intervalos del eje real. En los valores propios discretos $G(z)$ tendrá polos simples mientras que en el intervalo del espectro continuo de valores propios $G(z)$ no estará bien definida. En este caso podríamos definirla por un límite, sin embargo, si las funciones propias asociadas a los valores propios del espectro continuo no decaen conforme r tiende a infinito, entonces los límites $\lim_{s \rightarrow 0^+} \hat{G}(\vec{r}, \vec{r}', \lambda \pm is)$, λ en el intervalo del espectro continuo de valores propios y s real positivo, existirán pero serán diferentes. Definimos así dos nuevas funciones de Green

$$\hat{G}^+(\vec{r}, \vec{r}', \lambda) = \lim_{s \rightarrow 0^+} \hat{G}(\vec{r}, \vec{r}', \lambda + is), \quad (1.31)$$

$$\hat{G}^-(\vec{r}, \vec{r}', \lambda) = \lim_{s \rightarrow 0^+} \hat{G}(\vec{r}, \vec{r}', \lambda - is), \quad (1.32)$$

Usando el límite

$$\lim_{y \rightarrow 0^+} \frac{1}{x \pm iy} = P \frac{1}{x} \mp i\pi\delta(x), \quad (1.33)$$

reescribimos G^\pm

$$\hat{G}^\pm(\vec{r}, \vec{r}, \lambda) = P \sum_n \frac{\phi_n(\vec{r})\phi_n^*(\vec{r})}{\lambda - \lambda_n} \mp i\pi \sum_n \delta(\lambda - \lambda_n)\phi_n(\vec{r})\phi_n^*(\vec{r}). \quad (1.34)$$

Integrando sobre r

$$\begin{aligned} \int dr \hat{G}^\pm(\vec{r}, \vec{r}, \lambda) &= \int dr \langle \vec{r} | \hat{G}^\pm(\lambda) | \vec{r} \rangle \equiv \text{Tr} \left\{ \hat{G}^\pm(\lambda) \right\}, \\ &= P \sum_n \frac{1}{\lambda - \lambda_n} \mp i\pi \sum_n \delta(\lambda - \lambda_n). \end{aligned} \quad (1.35)$$

Cuando las funciones propias son estados propios cuánticos el término $\sum_n \delta(\lambda - \lambda_n)$ es la densidad de estados (DOS, density of states) en λ , $N(\lambda)$. La densidad de estados por unidad de volumen en el punto \vec{r} está dada por $\rho(\vec{r}, \lambda) = \sum_n \delta(\lambda - \lambda_n)\phi_n(\vec{r})\phi_n^*(\vec{r})$. Entonces de la ecuación 1.35 tenemos

$$\rho(\vec{r}, \lambda) = \mp \frac{1}{\pi} \text{Im} \left\{ \hat{G}^\pm(\vec{r}, \vec{r}, \lambda) \right\}, \quad (1.36)$$

y

$$N(\lambda) = \mp \frac{1}{\pi} \text{Im} \left\{ \text{Tr} \left\{ \hat{G}^\pm(\lambda) \right\} \right\}. \quad (1.37)$$

Si deseamos calcular DOS entonces basta entonces con obtener los elementos de la diagonal de $\hat{G}^\pm(\lambda)$. El cálculo de la densidad de estados es importante debido a que muchas propiedades dependen de ella ya que nos indica los estados permitidos del sistema y con ello caracterizar diversas propiedades (como la energía interna) integrando sobre el intervalo de energías de estados ocupados, por lo que al conocerla sabremos cómo se comportará el sistema.

1.5. Conductancia de Landauer

Landauer publicó una serie de artículos en los que estudiaba el transporte cuántico a través de un material. Consideró que la resistividad era generada por la dispersión de los electrones incidentes [Landauer, 1957, Landauer, 1970, Landauer, 1992]. Esta

nueva forma de abordar el problema para calcular la conductancia de un material considera que la corriente define al potencial en lugar de ser la corriente generada por una diferencia de potencial, por lo que el tipo de contactos del material son importantes.

En el caso unidimensional la corriente total en una cadena será la suma de la corriente proveniente del lado derecho más la del lado izquierdo. La corriente proveniente de la izquierda es

$$I_L = \int_0^\infty 2f(\epsilon(k), \mu_L) ev(k) T(k) \frac{dk}{2\pi}, \quad (1.38)$$

donde f es la función de distribución de Fermi-Dirac, e la carga eléctrica del electrón, v la velocidad de los electrones y T la transmitancia. Haciendo el cambio de variable $dk = \frac{dk}{dE} dE = \frac{1}{\hbar v} dE$

$$I_L = \frac{2e}{h} \int_{U_L}^\infty f(E, \mu_L) T(E) dE. \quad (1.39)$$

La corriente proveniente de la derecha es similar a I_L salvo un signo negativo en la velocidad (por estar viajando en sentido opuesto) y un potencial químico μ_R

$$I_R = -\frac{2e}{h} \int_{U_R}^\infty f(E, \mu_R) T(E) dE, \quad (1.40)$$

los electrones con energías entre U_R y U_L no pueden contribuir a la corriente por lo que tomamos como límite inferior a U_L en la integral de I_R , así la corriente total $I = I_L + I_R$ es

$$I = \frac{2e}{h} \int_{U_L}^\infty [f(E, \mu_L) - f(E, \mu_R)] T(E) dE. \quad (1.41)$$

Aproximando f por Taylor a primer orden alrededor de la energía de Fermi μ_ϵ .

$$f(E, \mu_L) \approx f(E, \mu_\epsilon) + (\mu_L - \mu_\epsilon) \left. \frac{\partial f(E, \mu)}{\partial \mu} \right|_{\mu=\mu_\epsilon}, \quad (1.42)$$

$$f(E, \mu_R) \approx f(E, \mu_\epsilon) + (\mu_R - \mu_\epsilon) \left. \frac{\partial f(E, \mu)}{\partial \mu} \right|_{\mu=\mu_\epsilon}, \quad (1.43)$$

$$(1.44)$$

y considerando que $\left. \frac{\partial f(E, \mu)}{\partial \mu} \right|_{\mu=\mu_\epsilon} = -\frac{\partial f(E, \mu_\epsilon)}{\partial E}$. Entonces

$$I \approx \frac{2e}{h} \int_{U_L}^{\infty} -(\mu_L - \mu_R) \frac{\partial f(E, \mu_\epsilon)}{\partial E} T(E) dE, \quad (1.45)$$

sustituyendo $(\mu_L - \mu_R) = eV$, con V el voltaje entre los extremos de la cadena. Despejando para tener $\frac{I}{V}$ y usando la ley de Ohm tenemos que la conductancia es

$$G = \frac{I}{V} \approx \frac{2e^2}{h} \int_{U_L}^{\infty} -\frac{\partial f(E, \mu_\epsilon)}{\partial E} T(E) dE. \quad (1.46)$$

A temperaturas bajas (cercanas a $0K$) la distribución Fermi-Dirac es casi una función escalón por lo que $-\frac{\partial f(E, \mu_\epsilon)}{\partial E} \approx \delta(E - \mu_\epsilon)$ y la conductancia es

$$G = \frac{I}{V} \approx \frac{2e^2}{h} T(\mu_\epsilon). \quad (1.47)$$

Si $T = 1$, entonces $G = \frac{2e^2}{h}$, este valor es conocido como el cuanto de conductancia.

1.6. Matriz de transferencia

En la sección anterior se obtuvo que la conductancia depende de la transmitancia, por lo que debemos establecer una forma de determinarla, una de ellas es por medio de la matriz de transferencia. Consideremos que tenemos una cadena atómica con un Hamiltoniano de enlace fuerte, así que la función de onda de un electrón en el arreglo puede ser descrita de la siguiente forma

$$\Psi = \sum_{i=1}^N \alpha_i |i\rangle, \quad (1.48)$$

sustituyendo en la ecuación de Schrödinger

$$H\Psi = E\Psi,$$

tenemos

$$(\epsilon_i - E)\alpha_i |i\rangle + \sum_{j=1}^N t_{i,j} \alpha_j |j\rangle = 0. \quad (1.49)$$

Este sistema de ecuaciones puede escribirse de forma matricial y considerando interacciones solo a primeros vecinos

$$\begin{pmatrix} \alpha_{j+1} \\ \alpha_j \end{pmatrix} = T_j \begin{pmatrix} \alpha_j \\ \alpha_{j-1} \end{pmatrix}, \quad (1.50)$$

$$T_j = \begin{pmatrix} E - \epsilon_j & -t_{j,j-1} \\ t_{j,j+1} & t_{j,j+1} \\ 1 & 0 \end{pmatrix}. \quad (1.51)$$

Por lo que es posible escribir a α_N y α_{N-1} , en términos de α_1 y α_2 iterando productos de las matrices T_j

$$\begin{pmatrix} \alpha_N \\ \alpha_{N-1} \end{pmatrix} = T \begin{pmatrix} \alpha_2 \\ \alpha_1 \end{pmatrix}, \quad (1.52)$$

con $T = T_{N-1}T_{N-2}\dots T_3T_2$. Si conocemos la función de onda en el primer y último sitio podremos saber la porción reflejada y transmitida de la onda a través de la cadena. Supongamos que en el primer átomo tendremos una función de onda viajando hacia la cadena y otra función de onda (la onda reflejada por la cadena) saliendo de la cadena $\alpha_1 = e^{iKx} + r e^{-iK_r x}$, mientras que en el último átomo solamente tendremos una función de onda saliendo de la cadena, $\alpha_N = \tau e^{iK_\tau x}$. Sustituyendo en 1.52 se obtienen los valores de las amplitudes reflejadas y transmitidas. Una vez hecho esto, la transmitancia simplemente es $|\tau^2|$; más adelante se encontrará una expresión explícita para el sistema estudiado.

1.7. Localización, IPR

Anteriormente se mostró que el comportamiento de la transmitancia depende las amplitudes de las funciones de onda en cada sitio de la red, por tanto el estudio de estados localizados o estados extendidos es de mucha importancia.

En el caso periódico vimos que la función de onda puede escribirse por medio de

funciones de Bloch lo que implica que tendremos estados extendidos, sin embargo, los sistemas aperiódicos no presentan funciones de Bloch como funciones de onda por lo que es necesaria una forma de poder cuantificar el grado de localización de los estados. La localización fue estudiada inicialmente por Warren Anderson [Anderson, 1958], posteriormente se demostró que para sistemas cuya dimensión es menor a tres con un desorden totalmente aleatorio todos los estados son localizados, sin embargo, en sistemas aperiódicos construidos a partir de cierta regla es posible encontrar múltiples estados extendidos (lo que nos indica cierto orden).

Existen diversas formas de medir la localización, por ejemplo, el exponente de Lyapunov. En un sistema en el que se conoce la cantidad de sitios en los que puede estar una partícula, tal como es el caso de esta tesis, resulta interesante de medir la localización por medio de la varianza de la densidad de probabilidad llamado IPR por sus siglas en inglés, Inverse Participation Ratio,

$$IPR = \frac{\sum_{i=1}^N |\Psi_i|^4}{(\sum |\Psi_i|^2)^2}, \quad (1.53)$$

si Ψ está normalizada entonces $\sum_{i=1}^N |\Psi_i|^2 = 1$. Podemos interpretar el IPR como la proporción promedio de la amplitud de la función de onda en cada sitio en los que es diferente de cero. El PR (Participation Ratio, $PR = \frac{1}{IPR}$) indica el número de sitios en los que la función de onda se distribuye cuando Ψ se encuentra indeterminada. Por lo que es evidente que si se tiene un estado totalmente localizado entonces $IPR = 1$ mientras que si se tiene un estado totalmente extendido entonces $IPR = \frac{1}{N}$

1.8. Renormalización

El estudio de la mecánica cuántica es de gran relevancia debido a sus aplicaciones tecnológicas tales como el desarrollo de semiconductores, el gran problema es que los sistemas del orden de centímetros de tamaño implica Hamiltonianos con un número de grados de libertad de al menos 10^{8d} , con d la dimensión del sistema. El cálculo directo para resolver dicho Hamiltoniano implica tiempos de computo sumamente largos, en

los sistemas construidos a partir de una regla es posible realizar una renormalización para disminuir los grados de libertad [Sánchez et al., 2001, Sánchez and Wang, 2004, Sánchez et al., 2016, Sánchez et al., 2018]. Supongamos que tenemos una cadena de P átomos a distancias iguales, como Hamiltoniano del sistema usaremos el de enlace fuerte

$$H = \sum_p |p\rangle \epsilon_p \langle p| + \sum_{p,q} |p\rangle V_{p,q} \langle q|, t_{pp} = 0, \quad (1.54)$$

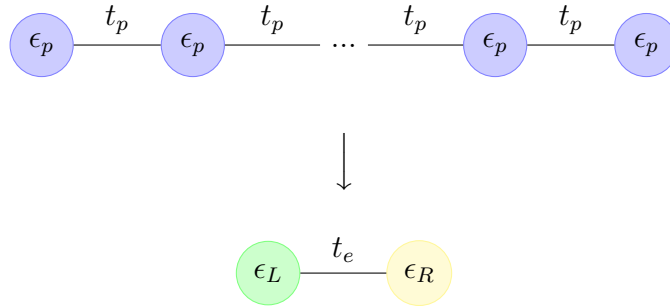
si G es la matriz cuyas entradas son las funciones de Green asociadas al sistema de ecuaciones de la matriz H tenemos que

$$(E - \hat{H})\hat{G} = I. \quad (1.55)$$

Con esto tenemos un sistema de ecuaciones con el que se construye un nuevo Hamiltoniano de 2×2 , con dos energías de sitio efectivas ϵ_R, ϵ_L y una integral de salto efectiva t_e ,

$$H_{renormalizado} = \begin{pmatrix} \epsilon_L & t_e \\ t_e & \epsilon_R \end{pmatrix}. \quad (1.56)$$

En un diagrama:



Esta misma idea puede extenderse a otras cantidades, por ejemplo, el IPR.

1.9. Sucesión de Kolakoski

Una forma de generar una sucesión de a y b es por medio de una sucesión contadora $\{\eta_n \mid \eta_n \in \mathcal{N}\}_{n=1}^{\infty}$, dicha sucesión nos indica colocar η_i veces la letra correspondiente.

Si $\eta_n = n$ la sucesión de a y b quedaría de la siguiente forma $(a, bb, aaa, bbbb, aaaaa, \dots)$. La sucesión contadora de la secuencia de Kolakoski es $(1, 2, 2, 1, 1, 2, 1, 2, 2, 1, 2, 2, \dots)$, si escribimos la sucesión generada encontraremos que es la misma. Esta sucesión fue publicada en una revista por William Kolakoski [Vaidya et al., 1965] en el que proponía, como problema, dar una forma simple de construir la secuencia y saber si la sucesión era periódica. Necdet Üçoluk dió una construcción y una prueba de que la sucesión es aperiódica [Kolakoski and Üçoluk, 1966].

El hecho de que una sucesión de Kolakoski sea su sucesión contadora hace que sea interesante su estudio en cadenas atómicas de una dimensión ya que podrían tener propiedades que se conserven a diferentes escalas. El estudio de sistemas aperiódicos es interesante por las diferentes propiedades que estos pueden llegar a presentar en diferentes rangos de temperatura o energías, sin considerar que en la práctica no es posible construir un sistema periódico. Esta sucesión ya ha sido usada para elaborar sistemas aperiódicos y estudiar sus propiedades ópticas [Fesenko, 2014, Fesenko and Tuz, 2016].

1.9.1. Cadena atómica y renormalización

Se estudiará la conductancia eléctrica de una cadena atómica por medio de la transmitancia, DOS y el IPR de un electrón dentro del sistema bajo la aproximación del Hamiltoniano de enlace fuerte con interacción solo a primeros vecinos. La cadena se encontrará a cero grados Kelvin a fin de disminuir las oscilaciones de los átomos (esto haría que se presentaran fonones dentro del sistema y por tanto se tendría que desarrollar un Hamiltoniano para describir estas excitaciones que contribuyen en el transporte cuántico), a $T = 0K$ todavía existen oscilaciones que deberían ser consideradas. Una forma de hacer esto sería partiendo de la energía interna del sistema y calcular el calor específico. El sistema está generado con base en la sucesión de Kolakoski, $\{k(n)|n \in \mathcal{N}\}$, con distancia interatómica a y se aplicará el método de renormalización para calcular las cantidades antes mencionadas. Se tendrán dos tipos de átomos con energías de sitio ϵ_1, ϵ_2 y, por tanto, tres integrales de salto $t_{1,1}, t_{1,2}$ y $t_{2,2}$ (de acuerdo a las posibles posiciones de los dos átomos).

La primera generación de las cadenas está formada por dos átomos tales que el primero será un átomo tipo $k(1)$ y el segundo $k(2)$, la generación dos constará de duplicar la generación anterior y unir el siguiente átomo de acuerdo a la sucesión de Kolakoski, $k(3)$. Se renormaliza el sistema de generación 2, con 5 átomos, y tendremos un nuevo sistema de dos grados de libertad con energías de sitio efectivas $\epsilon_L^{(2)}$, $\epsilon_r^{(2)}$ y una integral de salto efectiva $t_e(2)$, repetimos el proceso de unir una copia del sistema y luego agregar el siguiente átomo en la sucesión de Kolakoski para la generación 3. Bajo esta regla el sistema tiene un crecimiento exponencial en el número de átomos a cada generación.

Escribamos cuántos sitios tienen en las primeras 4 generaciones para determinar la relación de generación y número de sitios, sea $P(n)$ el número de átomos que contiene la cadena de generación n , escribiendo los primeros 4 valores de P ,

$$P(1) = 2, \quad (1.57)$$

$$P(2) = 2 + 2 + 1 = 2^2 + 1, \quad (1.58)$$

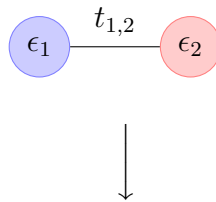
$$P(3) = (2^2 + 1) + (2^2 + 1) + 1 = 2^3 + 2^1 + 1, \quad (1.59)$$

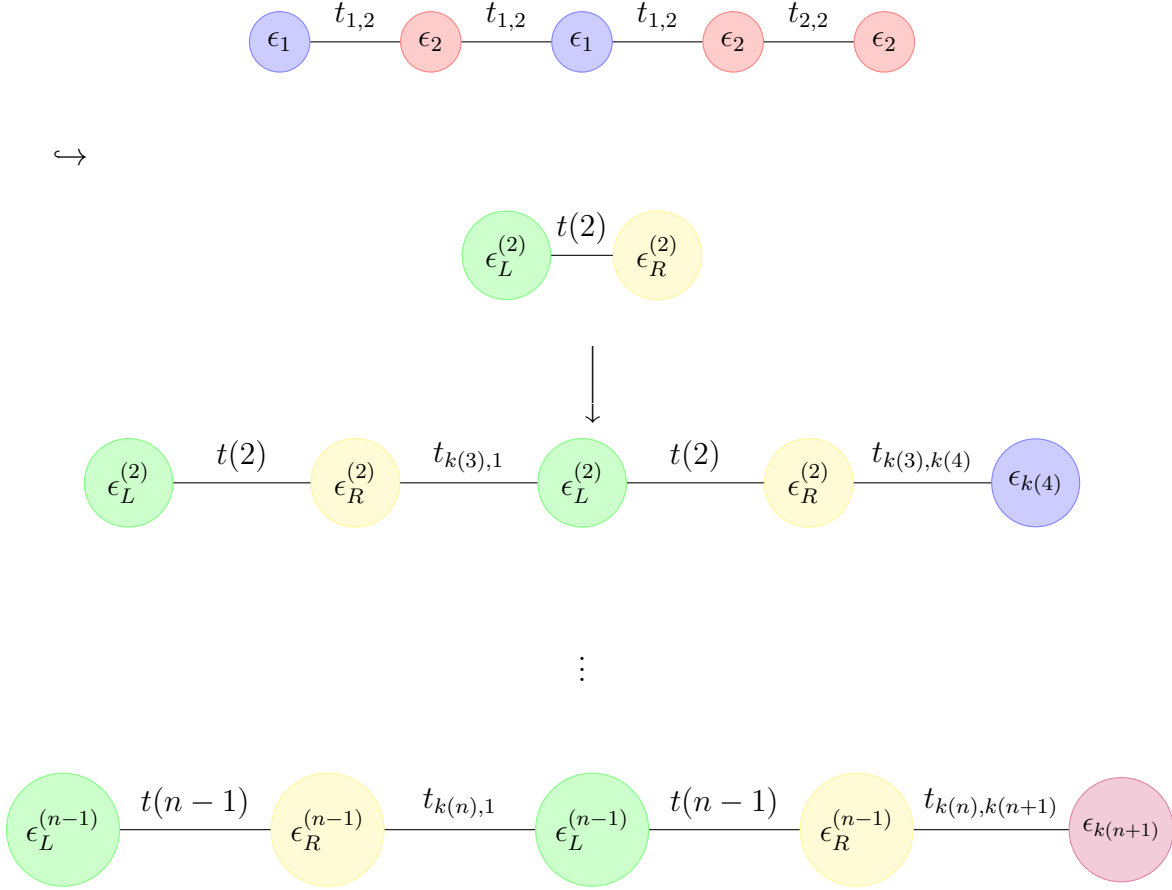
$$P(4) = (2^3 + 2^1 + 1) + (2^3 + 2^1 + 1) + 1 = 2^4 + 2^2 + 2^1 + 1, \quad (1.60)$$

se observa que P sigue la siguiente regla $P(n) = 2^n + \sum_{i=0}^{n-2} 2^i$, además $\sum_{i=0}^{n-2} 2^i = 2^{n-1} - 1$, por lo que

$$P(n) = 2^n + 2^{n-1} - 1 = 3(2^{n-1}) - 1. \quad (1.61)$$

En un diagrama





El Hamiltoniano de la n -ésima generación con base en la generación anterior, renormalizada, es

$$H = \begin{pmatrix} \epsilon_L(n-1) & t(n-1) & 0 & 0 & 0 \\ t(n-1) & E - \epsilon_R(n-1) & t_{k(n),1} & 0 & 0 \\ 0 & t_{k(n),1} & \epsilon_L(n-1) & t(n-1) & 0 \\ 0 & 0 & t(n-1) & \epsilon_R(n-1) & t_{k(n),k(n+1)} \\ 0 & 0 & 0 & t_{k(n),k(n+1)} & \epsilon_{k(n+1)} \end{pmatrix}, \quad (1.62)$$

usando las funciones de Green asociadas a este sistema encontramos $\epsilon_L(n)$, $\epsilon_r(n)$ y $t(n)$ para volver renormalizar esta generación y tener un sistema de 2 grados de

libertad

$$\begin{pmatrix} E - \epsilon_L(n-1) & -t(n-1) & 0 & 0 & 0 \\ -t(n-1) & E - \epsilon_R(n-1) & -t_{k(n),1} & 0 & 0 \\ 0 & -t_{k(n),1} & E - \epsilon_L(n-1) & -t(n-1) & 0 \\ 0 & 0 & -t(n-1) & E - \epsilon_R(n-1) & -t_{k(n),k(n+1)} \\ 0 & 0 & 0 & -t_{k(n),k(n+1)} & E - \epsilon_{k(n+1)} \end{pmatrix} G_{5 \times 5} = I_{5 \times 5}, \quad (1.63)$$

$$\epsilon_L(n) = \epsilon_L(n-1) + \frac{t^2(n-1)}{E - \epsilon_R(n-1) - t_{k(n),1}^2(E - \epsilon_R(n-1))W_{RLT}}, \quad (1.64)$$

$$\epsilon_R(n) = \epsilon_{k(n+1)} + \frac{t_{k(n),k(n+1)}^2}{E - \epsilon_R(n-1) - t^2(n-1)(E - \epsilon_R(n-1))W_{RLTN}}, \quad (1.65)$$

$$t(n) = \frac{t^2 t_{k(n),1} t_{k(n),k(n+1)}}{(E - \epsilon_R(n-1))^2 (E - \epsilon_L(n-1)) - t^2(n-1)(E - \epsilon_R(n-1)) - t_{k(n),1}^2 (E - \epsilon_R(n-1))}, \quad (1.66)$$

con

$$W_{RLT} = \frac{1}{(E - \epsilon_R(n-1))(E - \epsilon_L(n-1)) - t^2(n-1)}, \quad (1.67)$$

$$W_{RLTN} = \frac{1}{(E - \epsilon_R(n-1))(E - \epsilon_L(n-1)) - t_{k(n),1}^2}. \quad (1.68)$$

Siguiendo esta misma idea, encontramos la densidad de estados de la generación n de manera recursiva usando el sistema de ecuaciones 1.63, para escribir la densidad de estados con base en los términos de la densidad de estados de generaciones anteriores se tiene que determinar a $G_{1,2}$, $G_{2,2}$, $G_{3,3}$, $G_{3,4}$ y $G_{4,4}$ en función de $G_{1,1}$, $G_{1,5}$ y $G_{5,5}$

$$\begin{aligned} DOS(n) &= -\frac{1}{\pi} \text{Im}\{D_1(n-1)G_{11} + D_2(n-1)G_{22} + D_3(n-1)G_{12} + D_4(n-1) \\ &\quad + D_1(n-1)G_{33} + D_2(n-1)G_{44} + D_3(n-1)G_{34} + D_4(n-1) + G_{55}\} \\ &= -\frac{1}{\pi} \text{Im}\{D_1(n)G_{11} + D_2(n)G_{55} + D_3(n)G_{15} + D_4(n)\} \end{aligned} \quad (1.69)$$

Haciendo lo dicho anteriormente la ecuación 1.69 toma la siguiente forma

$$\begin{aligned}
DOS(n) = & -\frac{1}{\pi} Im\{G_{11} \left[D_1(n-1) + D_2(n-1) \frac{t^2}{(E - \epsilon_R - t_{k(n),1}^2 (E - \epsilon_R) W_{RLT})^2} \right. \\
& + D_3(n-1) \frac{t}{E - \epsilon_R - t_{k(n),1}^2 (E - \epsilon_R) W_{RLT}} + D_1(n-1) t^2 t_{k(n),1}^2 W_{RLTTN}^2 \\
& + D_2(n-1) \frac{t^4 t_{k(n),1}^2 W_{RLTTN}^2}{(E - \epsilon_R - t^2 (E - \epsilon_R) W_{RLTTN})^2} + D_3(n-1) \frac{t^3 t_{k(n),1}^2 W_{RLTTN} W_{RLTTN}}{E - \epsilon_R - t^2 (E - \epsilon_R) W_{RLTTN}} \left. \right] \\
& + G_{55} \left[D_2(n-1) \frac{t^2 t_{k(n),1}^2 t_{k(n),k(n+1)}^2 W_{RLT}^2}{(E - \epsilon_R - t_{k(n),1}^2 (E - \epsilon_R) W_{RLT})^2} + D_1(n-1) t^2 t_{k(n),k(n+1)}^2 W_{RLTTN}^2 \right. \\
& + D_2(n-1) \frac{t_{k(n),k(n+1)}^2}{(E - \epsilon_R - t^2 (E - \epsilon_R) W_{RLTTN})^2} \\
& + D_3(n-1) \frac{t t_{k(n),k(n+1)}^2 W_{RLTTN}}{E - \epsilon_R - t^2 (E - \epsilon_R) W_{RLTTN}} + 1 \left. \right] \\
& + G_{15} \left[D_2(n-1) \frac{2t^2 t_{k(n),1} t_{k(n),k(n+1)} W_{RLT}}{(E - \epsilon_R - t_{k(n),1}^2 (E - \epsilon_R) W_{RLT})^2} \right. \\
& + D_3(n-1) \frac{t t_{k(n),1} t_{k(n),k(n+1)} W_{RLT}}{E - \epsilon_R - t_{k(n),1}^2 (E - \epsilon_R) W_{RLT}} \\
& + D_1(n-1) 2t^2 t_{k(n),1} t_{k(n),k(n+1)} W_{RLTTN}^2 + D_2(n-1) \frac{2t^2 t_{k(n),1} t_{k(n),k(n+1)} W_{RLTTN}}{(E - \epsilon_R - t^2 (E - \epsilon_R) W_{RLTTN})^2} \\
& + D_3(n-1) \frac{t^3 t_{k(n),1} t_{k(n),k(n+1)} W_{RLTTN} W_{RLTTN} + t t_{k(n),1} t_{k(n),k(n+1)} W_{RLTTN}}{E - \epsilon_R - t^2 (E - \epsilon_R) W_{RLTTN}} \left. \right] \\
& + \left[D_4(n-1) 2 + \frac{D_2(n-1)}{E - \epsilon_R - t_{k(n),1}^2 (E - \epsilon_R) W_{RLT}} + D_1(n-1) (E - \epsilon_R) W_{RLTTN} \right. \\
& + \left. \frac{D_2(n-1)}{E - \epsilon_R - t^2 (E - \epsilon_R) W_{RLTTN}} + D_3(n-1) \frac{(E - \epsilon_R) t W_{RLTTN}}{E - \epsilon_R - t^2 (E - \epsilon_R) W_{RLTTN}} \right] \} \\
\end{aligned} \tag{1.70}$$

con

$$W_{RLTTN} = \frac{1}{(E - \epsilon_R)(E - \epsilon_L) - t^2 - t_{k(n),1}^2}. \tag{1.71}$$

A continuación aplicamos el método de renormalización para calcular la transmitancia.

1.9.2. Matriz de transferencia

En la sección 1.6 se mostró que la transmitancia podía obtenerse por medio de una multiplicación de matrices. Para calcular la matriz de transferencia, $T(n)$, de la generación n -ésima, se usará $T(n-1)$. Primero calculemos $T(2)$, que servirá como condición inicial en la renormalización.

De acuerdo a que $H = \sum_i \epsilon_i |i\rangle \langle i| + t_{i,i-1} |i\rangle \langle i-1| + t_{i,i+1} |i\rangle \langle i+1|$

$$H \sum_j \alpha_j |j\rangle = E \sum_j \alpha_j |j\rangle, \quad (1.72)$$

$$\alpha_i(\epsilon_i - E) + \alpha_{i-1}t_{i,i-1} + \alpha_{i+1}t_{i,i+1} = 0, \quad (1.73)$$

el caso de generación 2, con matrices, quedaría de la siguiente forma

$$\begin{pmatrix} \alpha_3 \\ \alpha_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\frac{\epsilon_2 - E}{t_{1,2}} & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha_2 \\ \alpha_1 \end{pmatrix}, \quad (1.74)$$

$$\begin{pmatrix} \alpha_4 \\ \alpha_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\frac{\epsilon_1 - E}{t_{1,2}} & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha_3 \\ \alpha_2 \end{pmatrix}, \quad (1.75)$$

$$\begin{pmatrix} \alpha_5 \\ \alpha_4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\frac{\epsilon_2 - E}{t_{2,2}} & -\frac{t_{1,2}}{t_{2,2}} \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha_4 \\ \alpha_3 \end{pmatrix}. \quad (1.76)$$

Por lo que

$$T(2) = \begin{pmatrix} -\frac{(\epsilon_2 - E)^2(\epsilon_1 - E)}{t_{1,2}^2 t_{2,2}} + 2\frac{\epsilon_2 - E}{t_{2,2}} & -\frac{(\epsilon_2 - E)(\epsilon_1 - E)}{t_{1,2} t_{2,2}} + \frac{t_{1,2}}{t_{2,2}} \\ \frac{(\epsilon_2 - E)(\epsilon_1 - E)}{t_{1,2}^2} - 1 & \frac{\epsilon_1 - E}{t_{1,2}} \end{pmatrix} \quad (1.77)$$

Luego, de acuerdo a la construcción del sistema, la matriz de transferencia de la generación n -ésima estaría dada por

$$T(n) = T_{k(n+1)} T(n-1) U T(n-1), \quad (1.78)$$

donde $T_{k(n+1)}$ y U son las matrices de transferencia que aparecen debido a agregar un nuevo sitio y unir una copia de la generación anterior, respectivamente. Para encontrar $T_{k(n+1)}$ y U solamente debemos tener en cuenta qué tipos de átomos están presentes en dichas uniones.

$$U = \begin{pmatrix} \frac{(\epsilon_1 - E)(\epsilon_{k(n)} - E)}{t_{1,2}t_{k(n),1}} - \frac{t_{k(n),1}}{t_{1,2}} & \frac{(\epsilon_1 - E)t_{k(n),k(n-1)}}{t_{1,2}t_{k(n),1}} \\ -\frac{\epsilon_{k(n)} - E}{t_{k(n),1}} & -\frac{t_{k(n),k(n-1)}}{t_{k(n),1}} \end{pmatrix}, \quad (1.79)$$

$$T_{k(n+1)} = \begin{pmatrix} -\frac{\epsilon_{k(n)} - E}{t_{k(n),k(n+1)}} & -\frac{t_{k(n),k(n-1)}}{t_{k(n),k(n+1)}} \\ 1 & 0 \end{pmatrix}. \quad (1.80)$$

Con ello se calcula de manera recursiva todas las entradas de la matriz $T(n)$ tomando como condiciones iniciales las entradas de la matriz $T(2)$.

$$\begin{aligned} T_{11}(n) = & -\frac{\epsilon_{k(n)} - E}{t_{k(n),k(n+1)}} \left(T_{11}(n-1) \left[T_{11}(n-1) \left[\frac{(\epsilon_1 - E)(\epsilon_{k(n)} - E)}{t_{1,2}t_{k(n),1}} - \frac{t_{k(n),1}}{t_{1,2}} \right] \right. \right. \\ & \left. \left. + T_{21}(n-1) \left[\frac{(\epsilon_1 - E)t_{k(n),k(n+1)}}{t_{1,2}t_{k(n),1}} \right] \right] \right. \\ & \left. + T_{12}(n-1) \left[-T_{12}(n-1) \left[\frac{\epsilon_{k(n)} - E}{t_{k(n),1}} \right] - T_{22}(n-1) \left[\frac{t_{k(n),k(n-1)}}{t_{k(n),1}} \right] \right] \right), \quad (1.81) \\ & -\frac{t_{k(n),k(n-1)}}{t_{k(n),k(n+1)}} \left(T_{21}(n-1) \left[T_{11}(n-1) \left[\frac{(\epsilon_1 - E)(\epsilon_{k(n)} - E)}{t_{1,2}t_{k(n),1}} - \frac{t_{k(n),1}}{t_{1,2}} \right] \right. \right. \\ & \left. \left. + T_{21}(n-1) \left[\frac{(\epsilon_1 - E)t_{k(n),k(n+1)}}{t_{1,2}t_{k(n),1}} \right] \right] \right. \\ & \left. + T_{22} \left[-T_{11}(n-1) \left[\frac{\epsilon_{k(n)} - E}{t_{k(n),1}} \right] - T_{21}(n-1) \left[\frac{t_{k(n),k(n-1)}}{t_{k(n),1}} \right] \right] \right) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
T_{12}(n) = & -\frac{\epsilon_{k(n)} - E}{t_{k(n),k(n+1)}} \left(T_{11}(n-1) \left[T_{12}(n-1) \left[\frac{(\epsilon_1 - E)(\epsilon_{k(n)} - E)}{t_{1,2}t_{k(n),1}} - \frac{t_{k(n),1}}{t_{1,2}} \right] \right. \right. \\
& \left. \left. + T_{22}(n-1) \left[\frac{(\epsilon_1 - E)t_{k(n),k(n+1)}}{t_{1,2}t_{k(n),1}} \right] \right] \right. \\
& \left. + T_{12}(n-1) \left[-T_{12}(n-1) \left[\frac{\epsilon_{k(n)} - E}{t_{k(n),1}} \right] - T_{22}(n-1) \left[\frac{t_{k(n),k(n-1)}}{t_{k(n),1}} \right] \right] \right), \quad (1.82) \\
& -\frac{t_{k(n),k(n-1)}}{t_{k(n),k(n+1)}} \left(T_{21}(n-1) \left[T_{12}(n-1) \left[\frac{(\epsilon_1 - E)(\epsilon_{k(n)} - E)}{t_{1,2}t_{k(n),1}} - \frac{t_{k(n),1}}{t_{1,2}} \right] \right. \right. \\
& \left. \left. + T_{22}(n-1) \left[\frac{(\epsilon_1 - E)t_{k(n),k(n+1)}}{t_{1,2}t_{k(n),1}} \right] \right] \right. \\
& \left. + T_{22}(n-1) \left[-T_{12}(n-1) \left[\frac{\epsilon_{k(n)} - E}{t_{k(n),1}} \right] - T_{22}(n-1) \left[\frac{t_{k(n),k(n-1)}}{t_{k(n),1}} \right] \right] \right)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
T(n)_{21} = & T_{11}(n-1) \left[T_{11}(n-1) \left[\frac{(\epsilon_1 - E)(\epsilon_{k(n)} - E)}{t_{1,2}t_{k(n),1}} - \frac{t_{k(n),1}}{t_{1,2}} \right] \right. \\
& \left. + T_{21}(n-1) \left[\frac{(\epsilon_1 - E)t_{k(n),k(n+1)}}{t_{1,2}t_{k(n),1}} \right] \right], \quad (1.83) \\
& + T_{12}(n-1) \left[-T_{12}(n-1) \left[\frac{\epsilon_{k(n)} - E}{t_{k(n),1}} \right] \right. \\
& \left. - T_{22}(n-1) \left[\frac{t_{k(n),k(n-1)}}{t_{k(n),1}} \right] \right]
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
T(n)_{22} = & T_{11}(n-1) \left[T_{12}(n-1) \left[\frac{(\epsilon_1 - E)(\epsilon_{k(n)} - E)}{t_{1,2}t_{k(n),1}} - \frac{t_{k(n),1}}{t_{1,2}} \right] \right. \\
& \left. + T_{22}(n-1) \left[\frac{(\epsilon_1 - E)t_{k(n),k(n+1)}}{t_{1,2}t_{k(n),1}} \right] \right], \quad (1.84) \\
& + T_{12}(n-1) \left[-T_{12}(n-1) \left[\frac{\epsilon_{k(n)} - E}{t_{k(n),1}} \right] \right. \\
& \left. - T_{22}(n-1) \left[\frac{t_{k(n),k(n-1)}}{t_{k(n),1}} \right] \right]
\end{aligned}$$

Conectaremos la cadena a dos saturadores periódicos semi-infinitos que funcionarán como reservorios y mantendrán a nuestra cadena en equilibrio termodinámico, cada saturador tendrá un potencial químico (μ_R, μ_L) y una integral de salto (t_R, t_L) . La funciones de onda en los saturadores tiene la forma de una onda periódica $\alpha_0 = 1 + r$, $\alpha_1 = e^{ika} + re^{-ika}$, $\alpha_n = \tau e^{ikna}$ y $\alpha_{n+1} = \tau e^{ik(n+1)a}$. Las matrices de transferencia para cada saturador serán

$$R = \begin{pmatrix} -\frac{\epsilon_{k(n+1)} - E}{t_R} & -\frac{t_{k(n),k(n+1)}}{t_R} \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad (1.85)$$

$$L = \begin{pmatrix} -\frac{\epsilon_1 - E}{t_{1,2}} & -\frac{t_L}{t_{1,2}} \\ 1 & 0 \end{pmatrix}. \quad (1.86)$$

con R la matriz de transferencia para el saturador derecho y L la del izquierdo. Con lo que la matriz de transferencia \mathcal{T} da la cadena de generación n conectada a los saturadores es

$$\mathcal{T} = RT(n)L, \quad (1.87)$$

$$\mathcal{T}_{11} = -\frac{\epsilon_{k(n+1)} - E}{t_R} [T_{11}(n) \left(-\frac{\epsilon_1 - E}{t_{1,2}}\right) + T_{12}(n)] - \frac{t_{k(n),k(n+1)}}{t_R} [T_{21}(n) \left(-\frac{\epsilon_1 - E}{t_{1,2}}\right) + T_{22}(n)], \quad (1.88)$$

$$\mathcal{T}_{12} = \frac{\epsilon_{k(n+1)} - E}{t_R} T_{11}(n) \frac{t_L}{t_{1,2}} + \frac{t_{k(n),k(n+1)}}{t_R} T_{21}(n) \frac{t_L}{t_{1,2}}, \quad (1.89)$$

$$\mathcal{T}_{21} = -T_{11}(n) \frac{\epsilon_1 - E}{t_{1,2}} + T_{12}(n), \quad (1.90)$$

$$\mathcal{T}_{22} = -T_{11}(n) \frac{t_L}{t_{1,2}}. \quad (1.91)$$

La transmitancia, $|\tau|^2$, queda definida por el siguiente sistema de ecuaciones partiendo de que

$$\begin{pmatrix} \tau e^{ika(n+1)} \\ \tau e^{ikan} \end{pmatrix} = \mathcal{T} \begin{pmatrix} e^{ika} + re^{-ika} \\ 1 + r \end{pmatrix}, \quad (1.92)$$

$$\begin{aligned}\tau e^{ika(n+1)} &= [\mathcal{T}_{11}e^{ika} + \mathcal{T}_{12}] + r(\mathcal{T}_{11}e^{-ika} + \mathcal{T}_{12}), \\ \tau e^{ikan} &= [\mathcal{T}_{21}e^{ika} + \mathcal{T}_{22}] + r(\mathcal{T}_{21}e^{-ika} + \mathcal{T}_{22}).\end{aligned}$$

Despejando τ y r

$$r = -\frac{[\mathcal{T}_{11}e^{ika} + \mathcal{T}_{12}] - [\mathcal{T}_{21}e^{ika} + \mathcal{T}_{22}]e^{ika}}{(\mathcal{T}_{11}e^{-ika} + \mathcal{T}_{12}) - (\mathcal{T}_{21}e^{-ika} + \mathcal{T}_{22})e^{ika}}, \quad (1.93)$$

$$\tau = \frac{(\mathcal{T}_{21}e^{-ika} + \mathcal{T}_{22})[\mathcal{T}_{11}e^{ika} + \mathcal{T}_{12}] - (\mathcal{T}_{11}e^{-ika} + \mathcal{T}_{12})[\mathcal{T}_{21}e^{ika} + \mathcal{T}_{22}]}{(\mathcal{T}_{21}e^{-ika} + \mathcal{T}_{22})e^{ika} - (\mathcal{T}_{11}e^{-ika} + \mathcal{T}_{12})}, \quad (1.94)$$

$$= -2i \frac{[\mathcal{T}_{12}\mathcal{T}_{21} - \mathcal{T}_{11}\mathcal{T}_{22}] \sin ka}{(\mathcal{T}_{21}e^{-ika} + \mathcal{T}_{22})e^{ika} - (\mathcal{T}_{11}e^{-ika} + \mathcal{T}_{12})}, \quad (1.95)$$

considerando que el determinante de la matriz de transferencia es uno y tomando el módulo cuadrado de τ

$$|\tau|^2 = \frac{4[\mathcal{T}_{12}\mathcal{T}_{21} - \mathcal{T}_{11}\mathcal{T}_{22}]^2 \sin^2 ka}{(\mathcal{T}_{21} - \mathcal{T}_{12})^2 + \mathcal{T}_{22}^2 + \mathcal{T}_{11}^2 - \mathcal{T}_{11}\mathcal{T}_{22}2 \cos 2ka + (\mathcal{T}_{21} - \mathcal{T}_{12})(\mathcal{T}_{22} - \mathcal{T}_{11})2 \cos ka}. \quad (1.96)$$

Usando la ecuación 1.24 y suponiendo que la auto energía en los saturadores es cero, la energía $E = 2t_a \cos ka$ y la integral de salto t_a

$$\mathbf{T}(E) = \frac{(1 - \frac{E^2}{4t_a^2})}{(\mathcal{T}_{21} - \mathcal{T}_{12})^2 + \mathcal{T}_{22}^2 + \mathcal{T}_{11}^2 + 2\mathcal{T}_{11}\mathcal{T}_{22}(1 - \frac{E^2}{2t_a^2}) + (\mathcal{T}_{21} - \mathcal{T}_{12})(\mathcal{T}_{22} - \mathcal{T}_{11})\frac{E}{t_a}}. \quad (1.97)$$

Ahora solamente falta determinar el IPR

1.9.3. Localización, IPR

Dado que el IPR depende de las amplitudes de la función de onda en cada sitio de la cadena y a que conocemos las amplitudes en los saturadores buscaremos dejar los coeficientes intermedios en términos de los extremos. Escribiendo IPR de las primeras dos generaciones

$$IPR(1) = \frac{|\alpha_1|^4 + |\alpha_2|^4}{(|\alpha_1|^2 + |\alpha_2|^2)^2}, \quad (1.98)$$

$$IPR(2) = \frac{|\alpha_1|^4 + |\alpha_2|^4 + |\alpha_3|^4 + |\alpha_4|^4 + |\alpha_5|^4}{(|\alpha_1|^2 + |\alpha_2|^2 + |\alpha_3|^2 + |\alpha_4|^2 + |\alpha_5|^2)^2}, \quad (1.99)$$

Usando la ecuación de Schrödinger expresamos el $IPR(2)$ en términos de α_1 y α_5

$$IPR(2) = \frac{|\alpha_1|^4 + |\alpha_1 A_2 + \alpha_5 B_2|^4 + |\alpha_1 A_3 + \alpha_5 B_3|^4 + |\alpha_1 A_4 + \alpha_5 B_4|^4 + |\alpha_5|^4}{(|\alpha_1|^2 + |\alpha_1 A_2 + \alpha_5 B_2|^2 + |\alpha_1 A_3 + \alpha_5 B_3|^2 + |\alpha_1 A_4 + \alpha_5 B_4|^2 + |\alpha_5|^2)^2}, \quad (1.100)$$

tanto los valores de A_i , B_i como la generalización a $IPR(n)$ se muestran en el apéndice D.

Capítulo 2

Análisis de las Propiedades Físicas

A fin de caracterizar las propiedades electrónicas del sistema aperiódico se estudiaron tres casos, enlaces, sitios y mixto. Para el cálculo de los coeficientes de *DOS*, transmitancia e *IPR* se realizaron programas en el lenguaje Julia *v1.2* usando flotantes tipo *BigFloat*, debido a que los valores no podían ser expresados de manera correcta con cuádruple precisión. Todos los cálculos fueron realizados para una cadena de generación 26, que contiene 100663295 átomos, si consideramos una distancia interatómica del orden de $0.1nm$ entonces correspondería a una cadena de $\approx 1cm$ de longitud.

2.1. Problema de enlaces

En este caso se considerarán energías de sitio iguales y las integrales de salto son diferentes, esta situación puede ocurrir si se tiene un tipo de átomo y decidimos alterar la distancia interatómica. Por ejemplo, si quisiéramos que la integral de salto t_{12} cambie entonces debemos alterar la distancia entre los átomos de asociados al 1 y al 2. Para cuantificar el comportamiento ante las presencia de cada tipo de átomo se analizarón 3 situaciones diferentes en las que se variaba solo una de las integrales de salto mientras que el resto eran igual a $-|t|$.

En las figuras 2.1, 2.2 y 2.3 se muestran los espectros de la *DOS* (parte imaginaria de E igual a $10^{-3}|t|$), transmitancia e *IPR* para el problema de enlaces en función de la energía $\frac{E}{|t|}$, con energías de sitio iguales a 0 y una de las integrales de salto igual a

$-0.8|t|$ (t_{11} , t_{12} y t_{22} , respectivamente) y el resto igual a $-|t|$.

En la figura 2.1 observamos que los espectros muestran simetría de espejo respecto al cero de las energías. El espectro de la DOS muestra zonas en las que es casi constante, zonas en las que decae a cero y también diversos picos, en los límites de la banda de energía es donde hay una mayor acumulación de estados. El espectro de la transmitancia tiene múltiples zonas de picos de alta conductividad y diversos GAPS. Los máximos globales del IPR están en $|\frac{E}{t}| = 2$ y en las zonas con alta transmitancia decae a cero, en los GAPS de la transmitancia el IPR sube considerablemente mostrando máximos locales.

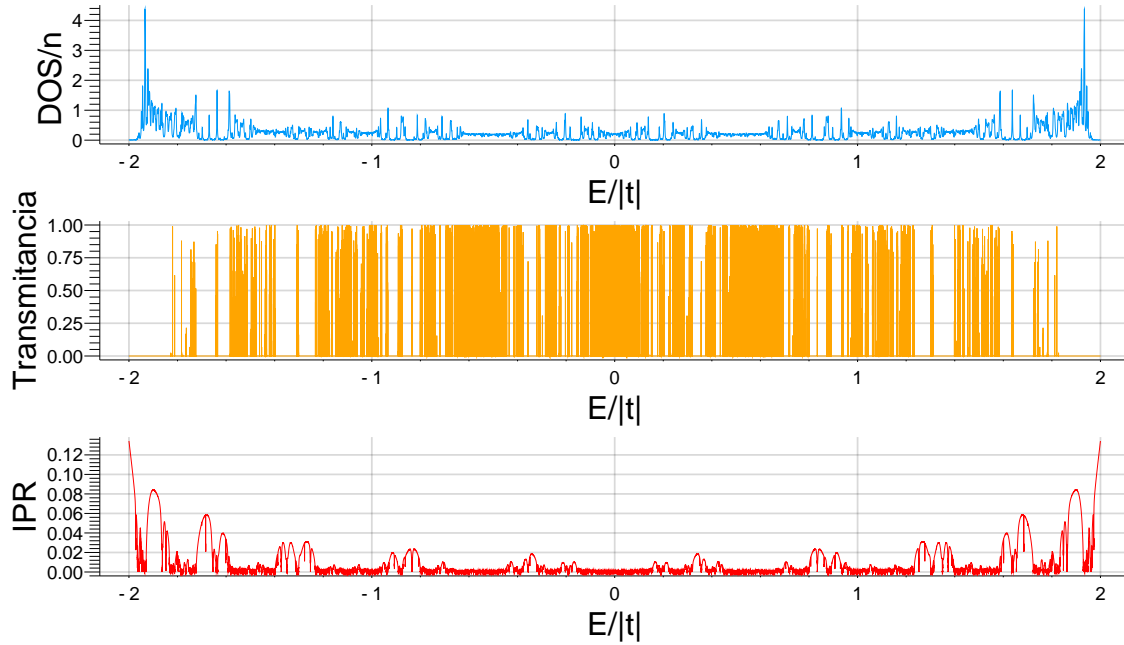


Figura 2.1: DOS (Azul), parte imaginaria de la energía igual a $10^{-3}|t|$, transmitancia (Amarillo) e IPR (Rojo) de una cadena de generación 26 en función de la energía $\frac{E}{|t|}$, con energías de sitio iguales a 0 e integrales de salto $t_{11} = -0.8|t|$, $t_{12} = -|t|$ y $t_{22} = -|t|$

En la figura 2.2 el espectro de la DOS muestra que la banda de energía está contenida en el intervalo $[-1.8, 1.8]$. Se observa que algunos picos de la transmitancia son cercanos a 1. El espectro del IPR toma valores por arriba de 0.5 en $|\frac{E}{t}| = 2$ y a pesar de tener múltiples GAPS en la transmitancia, en general, se encuentra debajo de 0.1

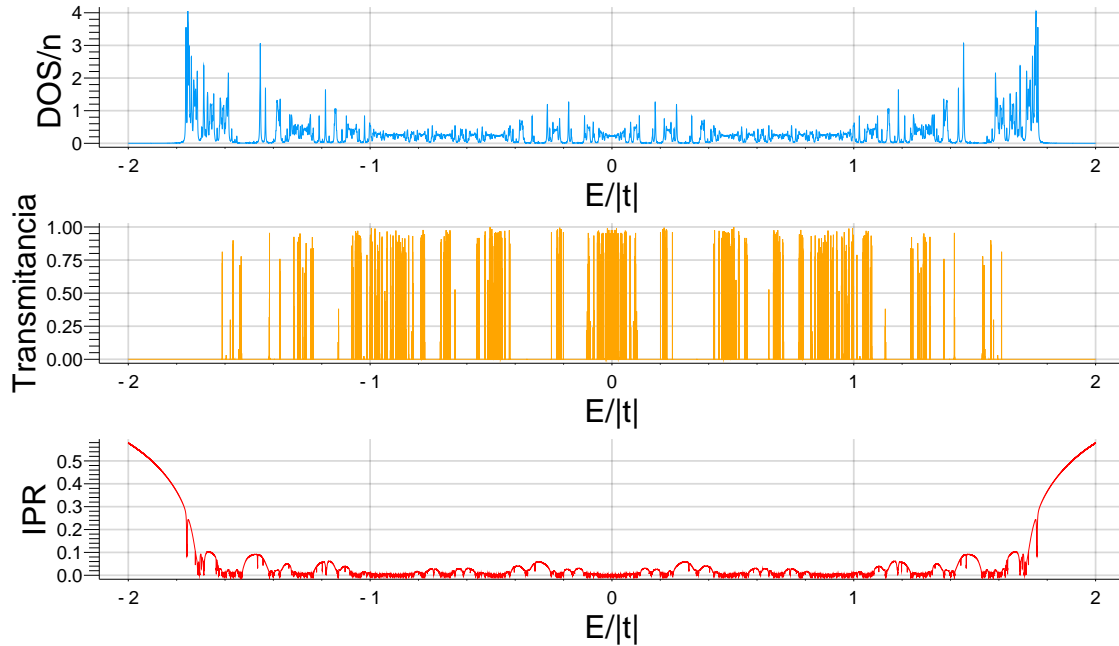


Figura 2.2: DOS (Azul), parte imaginaria de la energía igual a $10^{-3}|t|$, transmitancia (Amarillo) e IPR (Rojo) de una cadena de generación 26 en función de la energía $\frac{E}{|t|}$, con energías de sitio iguales a 0 e integrales de salto $t_{11} = -|t|$, $t_{12} = -0.8|t|$ y $t_{22} = -|t|$

En la figura 2.3 el espectro de la DOS muestra varias zonas con un comportamiento casi constante y en ellas los picos del espectro de la transmitancia son cercanos a 1 pero es apreciable que no son estados transparentes. El IPR, en general, se encuentra debajo de 0.1 y cuando la transmitancia decae a 0 el IPR aumenta. Al igual que los dos casos anteriores los espectros muestran simetría de espejo respecto al 0 de las energías

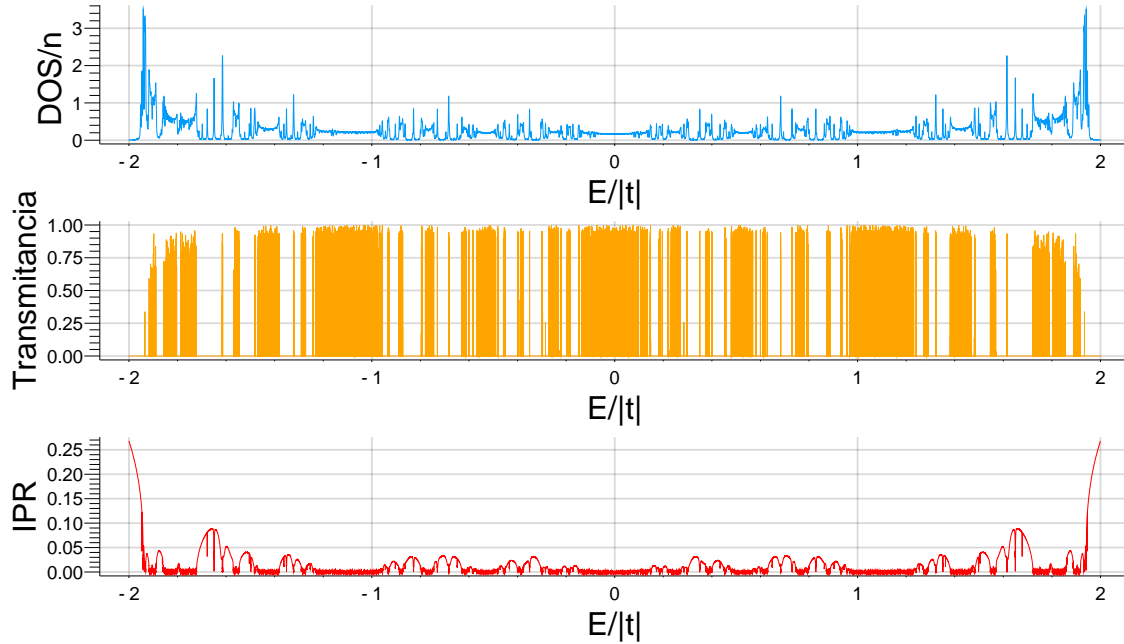


Figura 2.3: DOS (Azul), parte imaginaria de la energía igual a $10^{-3}|t|$, transmitancia (Amarillo) e IPR (Rojo) de una cadena de generación 26 en función de la energía $\frac{E}{|t|}$, con energías de sitio iguales a 0 e integrales de salto $t_{11} = -|t|$, $t_{12} = -|t|$ y $t_{22} = -0.8|t|$

Dado que en alrededor del 0 de la energía los espectros de las figuras 2.1, 2.2 y 2.3 mostraban picos de alta transmitancia se decidió realizar una ampliación de las tres, obteniendo las figuras 2.4, 2.5 y 2.6, respectivamente, para ver como se comportan los espectros de manera local. En este caso la parte imaginaria de la energía en DOS fue de $10^{-8}|t|$ debido a que los estados propios se traslapan.

En la figura 2.4 observamos que el espectro de la DOS presenta picos en grupos de 2, 3 o 5 y conforme la energía aumenta este comportamiento se pierde. Cerca del cero de la energía, el espectro de la transmitancia oscila y para diversas energías se llegan a tener valores cercanos a 1. Ante la existencia de zonas con alta transmitancia el IPR tiene mínimos locales.

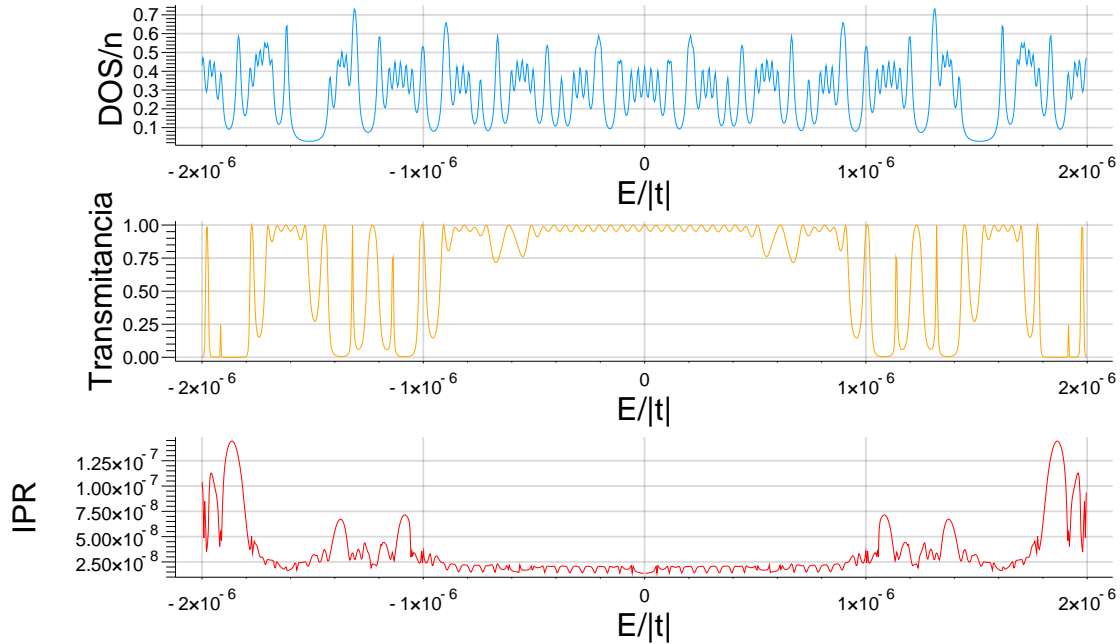


Figura 2.4: Amplificación de la figura 2.1. DOS (Azul), parte imaginaria de la energía igual a $10^{-8}|t|$, transmitancia (Amarillo) e IPR (Rojo) de una cadena de generación 26 en función de la energía $\frac{E}{|t|}$, con energías de sitio iguales a 0 e integrales de salto $t_{11} = -0.8|t|$, $t_{12} = -|t|$ y $t_{22} = -|t|$

En la figura 2.5 el espectro de la DOS tiene cuatro zonas en las que decae a 0; ahí el espectro de la transmitancia muestra GAPs, alrededor del 0 se tiene una zona casi constante y es claro que no se tiene un estado transparente. En los GAPs de la transmitancia el espectro del IPR aumenta teniendo máximos locales.

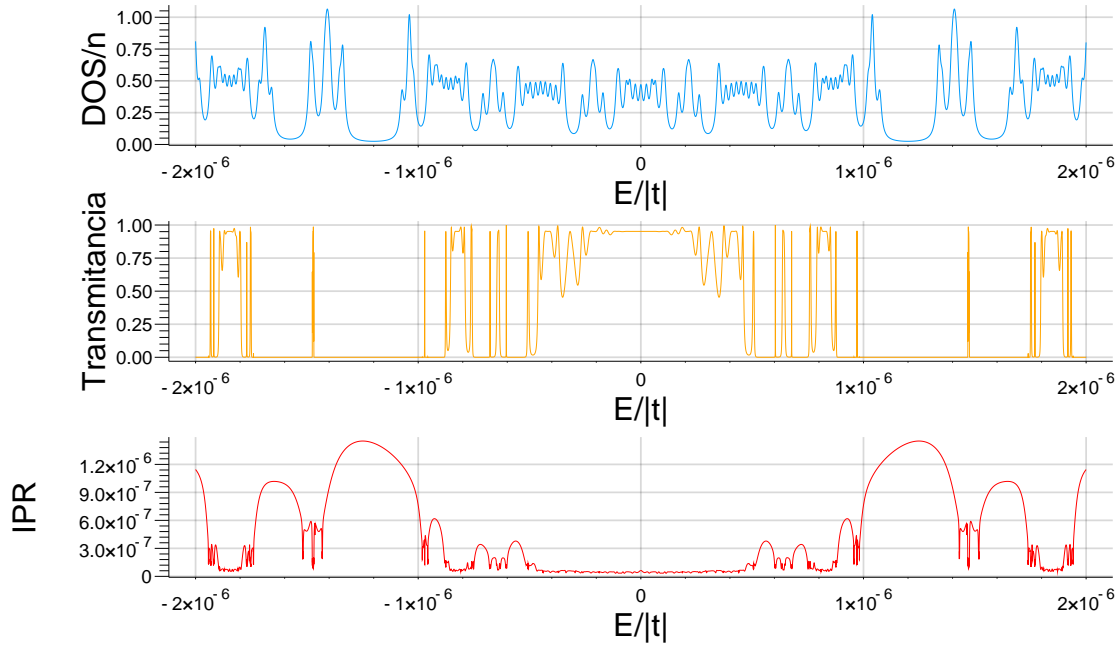


Figura 2.5: Amplificación de la figura 2.2. DOS (Azul), parte imaginaria de la energía igual a $10^{-8}|t|$, transmitancia (Amarillo) e IPR (Rojo) de una cadena de generación 26 en función de la energía $\frac{E}{|t|}$, con energías de sitio iguales a 0 e integrales de salto $t_{11} = -|t|$, $t_{12} = -0.8|t|$ y $t_{22} = -|t|$

En la figura 2.6 el espectro de la DOS tiene un comportamiento muy similar al esperado de un caso periódico, el cual se pierde conforme la energía aumenta. A pesar de eso la transmitancia no presenta estados transparentes en esta región, pero sí alta conductividad y, en esta zona, el espectro del IPR decae casi a cero.

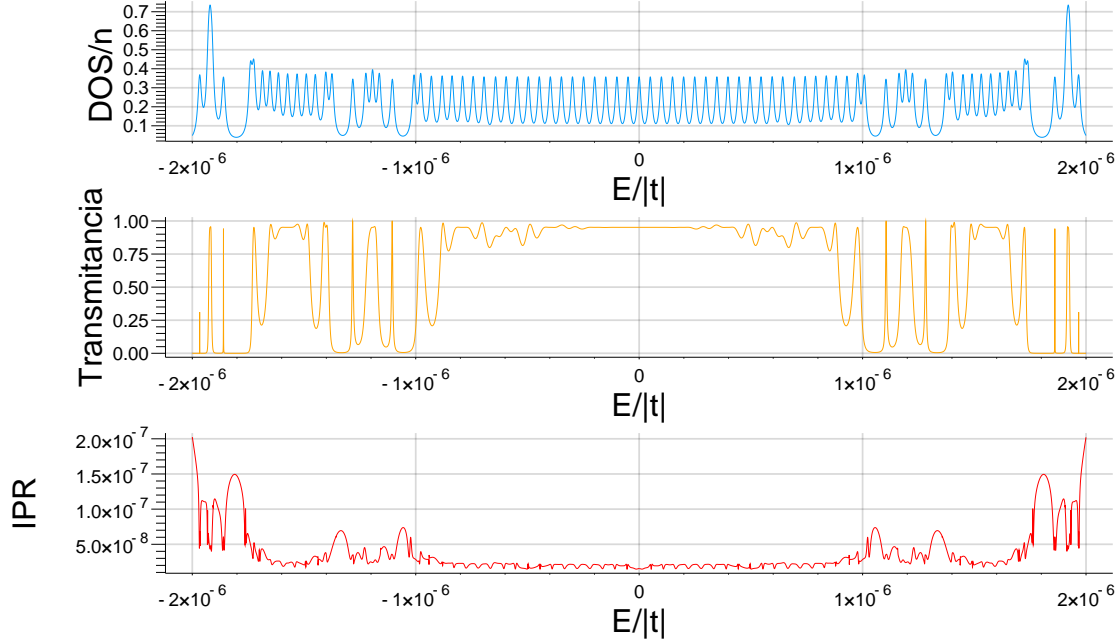


Figura 2.6: Amplificación de la figura 2.3. DOS (Azul), parte imaginaria de la energía igual a $10^{-8}|t|$, transmitancia (Amarillo) e IPR (Rojo) de una cadena de generación 26 en función de la energía $\frac{E}{|t|}$, con energías de sitio iguales a 0 e integrales de salto $t_{11} = -|t|$, $t_{12} = -|t|$ y $t_{22} = -0.8|t|$

2.2. Problema de sitios

En el Hamiltoniano de enlace fuerte representamos a los sitios de la red como pozos de potencial, por tanto una forma de variar los valores de las energías de sitio es usando dos tipos de átomos diferentes y tener diferentes estados energéticos en los orbitales. Este problema se hizo con todas las integrales de salto iguales a $-|t|$ y energías de sitio diferentes. En este caso se estudió el comportamiento del sistema cuando ambas energías de sitio son diferentes de cero, con $\epsilon_1 = 0.3|t|$ y $\epsilon_2 = 0.6|t|$

En la figura 2.7 se muestra el espectro de la DOS (parte imaginaria de la energía igual a $10^{-3}|t|$) y en la figura 2.8 se presentan los espectros de la DOS (parte imaginaria de la energía igual a $10^{-3}|t|$), transmitancia e IPR en función de la energía $\frac{E}{|t|}$, las energías de sitio y las integrales de salto fueron las mencionadas anteriormente.

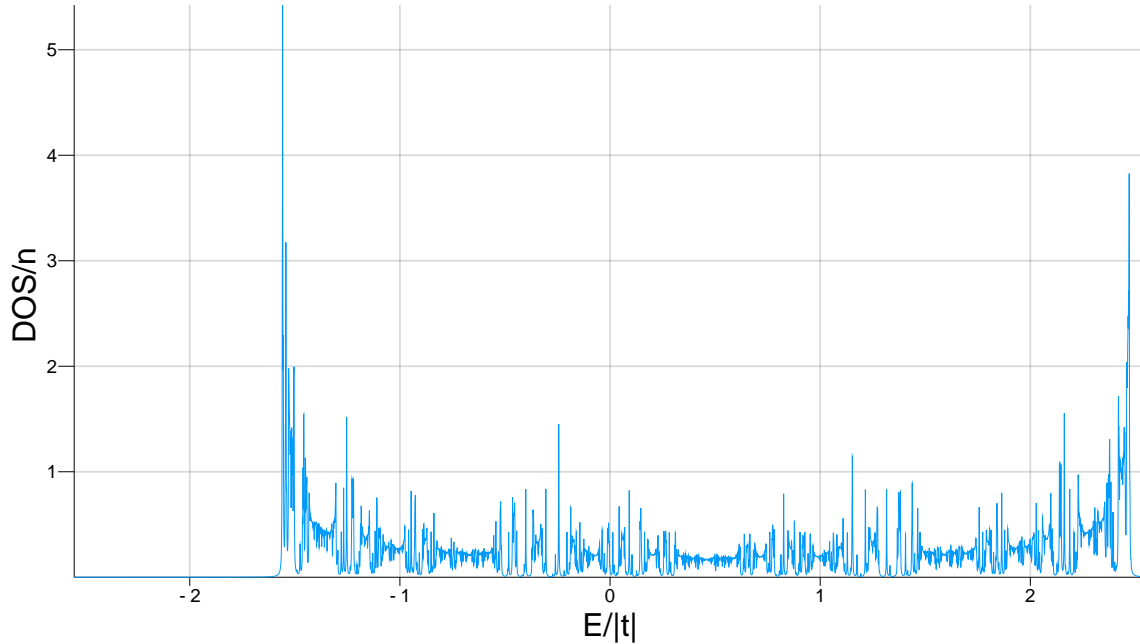


Figura 2.7: DOS (Azul), parte imaginaria de la energía igual a $10^{-3}|t|$, de una cadena de generación 26 en función de la energía $\frac{E}{|t|}$, con energías de sitio $\epsilon_1 = 0.3|t|$, $\epsilon_2 = 0.6|t|$ e integrales de salto iguales a $-|t|$

Se puede notar en la figura 2.7 que la banda de energía del espectro de la DOS se recorre hasta $[-1.6, 2.5]$ y no presenta simetría de espejo. En la figura 2.8 el espectro de la transmitancia decae a cero fuera de la banda de energía y el espectro del IPR alcanza su máximo. Se observan diversas zonas de picos en la transmitancia en los que se podría tener estados transparentes. El IPR es cercano a 0, salvo en las regiones para las que la transmitancia presenta GAPS, en los que el IPR llega a tomar valores por encima de 0.05.

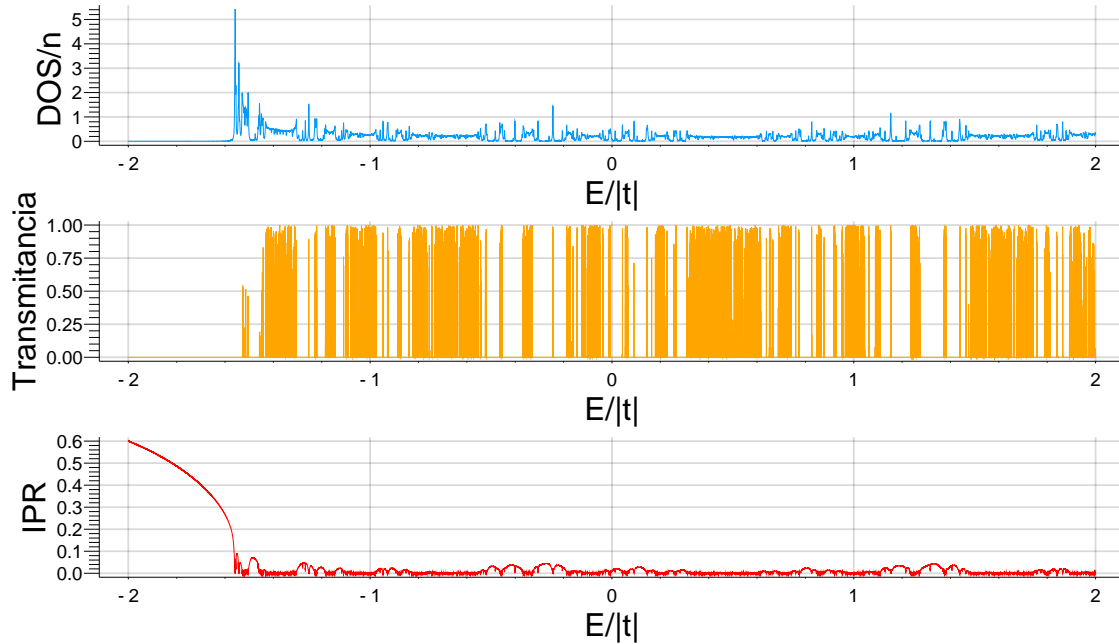


Figura 2.8: DOS (Azul), parte imaginaria de la energía igual a $10^{-3}|t|$, transmitancia (Amarillo) e IPR (Rojo) de una cadena de generación 26 en función de la energía $\frac{E}{|t|}$, con energías de sitio $\epsilon_1 = 0.3|t|$, $\epsilon_2 = 0.6|t|$ e integrales de salto iguales a $-|t|$

Para ver el comportamiento local de los espectros de la figura 2.8 se hizo una amplificación alrededor de $\frac{E}{|t|} = 0.5235$, en la figura 2.9 se muestra el espectro de la DOS (parte imaginaria igual a $10^{-8}|t|$ debido al traslape de los estados propios), transmitancia y el IPR para el problema de sitios con $\epsilon_1 = 0.3|t|$, $\epsilon_2 = 0.6|t|$ e integrales de salto iguales a $-|t|$.

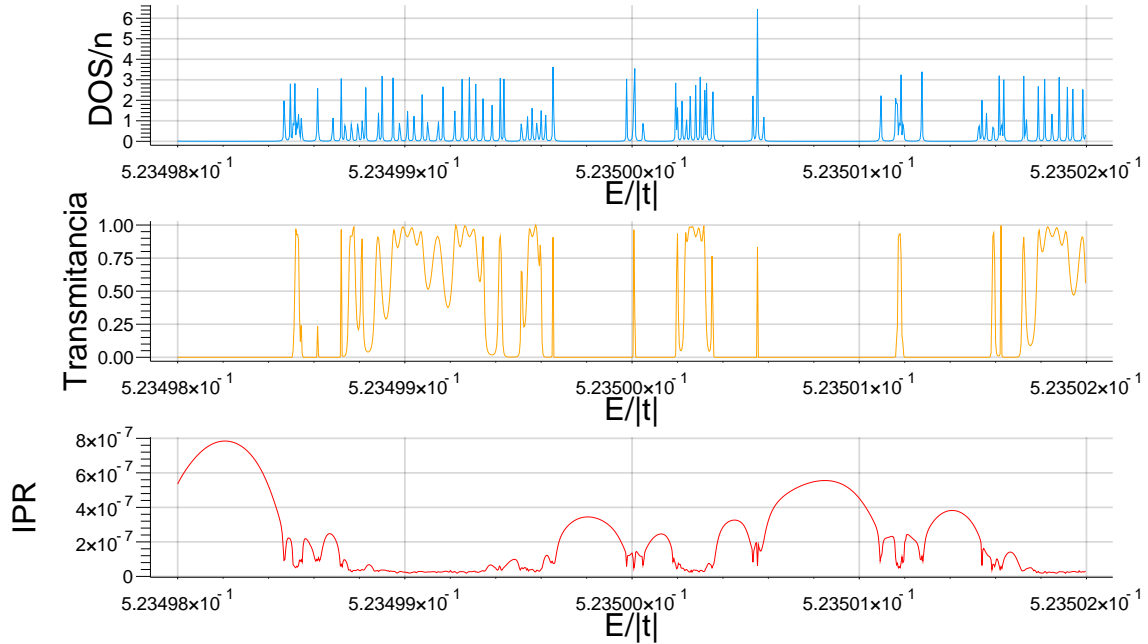


Figura 2.9: Amplificación de la figura 2.8. DOS (Azul), parte imaginaria de la energía igual a $10^{-8}|t|$, transmitancia (Amarillo) e IPR (Rojo) de una cadena de generación 26 en función de la energía $\frac{E}{|t|}$, con energías de sitio $\epsilon_1 = 0.3|t|$, $\epsilon_2 = 0.6|t|$ e integrales de salto iguales a $-|t|$

En la figura 2.9 el espectro de la DOS presenta zonas en las que no hay ningún estado propio y con ello una baja transmitancia, en las regiones con DOS diferente de cero se tiene una alta conductividad y es apreciable que alguno podría ser un estado transparente. El espectro del IPR se encuentra por debajo de $8 * 10^{-7}$ con máximos locales en las regiones de baja transmitancia. En este caso se puede ver un comportamiento muy relacionado de los tres espectros.

2.3. Problema mixto

En la sección anterior cambiamos el tipo de átomos para cambiar el valor de las energías de sitio dejando las integrales de salto iguales a $-|t|$, sin embargo, si cambiamos el tipo de átomos se cambian las integrales de salto. Así que estudiar el caso en el que las energías de sitio e integrales de salto son diferentes es un problema más realista.

En la figura 2.10 se muestra el espectro de la DOS (parte imaginaria de la ener-

gía igual a $10^{-3}|t|$) y en la figura 2.11 se presentan los espectros de la DOS (parte imaginaria de la energía igual a $10^{-3}|t|$), transmitancia e IPR en función de la energía $\frac{E}{|t|}$, con energías de sitio $\epsilon_1 = 0.2|t|$, $\epsilon_2 = 0.4|t|$ e integrales de salto $t_{11} = -|t|$, $t_{12} = -0.9|t|$, $t_{22} = -0.8|t|$.

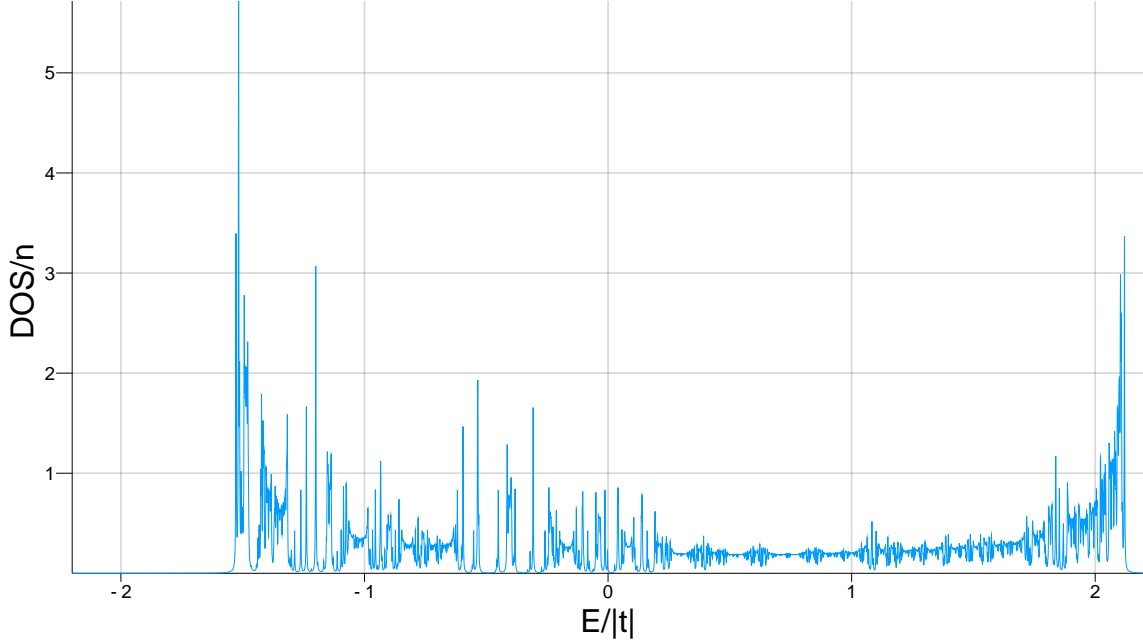


Figura 2.10: DOS (Azul), parte imaginaria de la energía igual a $10^{-3}|t|$, de una cadena de generación 26 en función de la energía $\frac{E}{|t|}$, con energías de sitio con energías de sitio $\epsilon_1 = 0.2|t|$, $\epsilon_2 = 0.4|t|$ e integrales de salto $t_{11} = -|t|$, $t_{12} = -0.9|t|$, $t_{22} = -0.8|t|$

El espectro de la DOS en la figura 2.10 muestra que la banda de energía se encuentra en el intervalo $[-1.6, 2.1]$, en la figura 2.11 observamos que los espectros no presentan simetría espejo, DOS muestra un comportamiento casi constante para diversos intervalos. El espectro de la transmitancia presenta GAPs para energías negativas y para las positivas se tiene, en general, una gran cantidad de picos de alta transmitancia e incluso sugiriendo la presencia de diversos estados transparentes, en dicha región el comportamiento del espectro del IPR es casi constante y muy cercano a 0. Para $\frac{E}{|t|} < -1.4$ se tienen los valores más elevados del IPR.

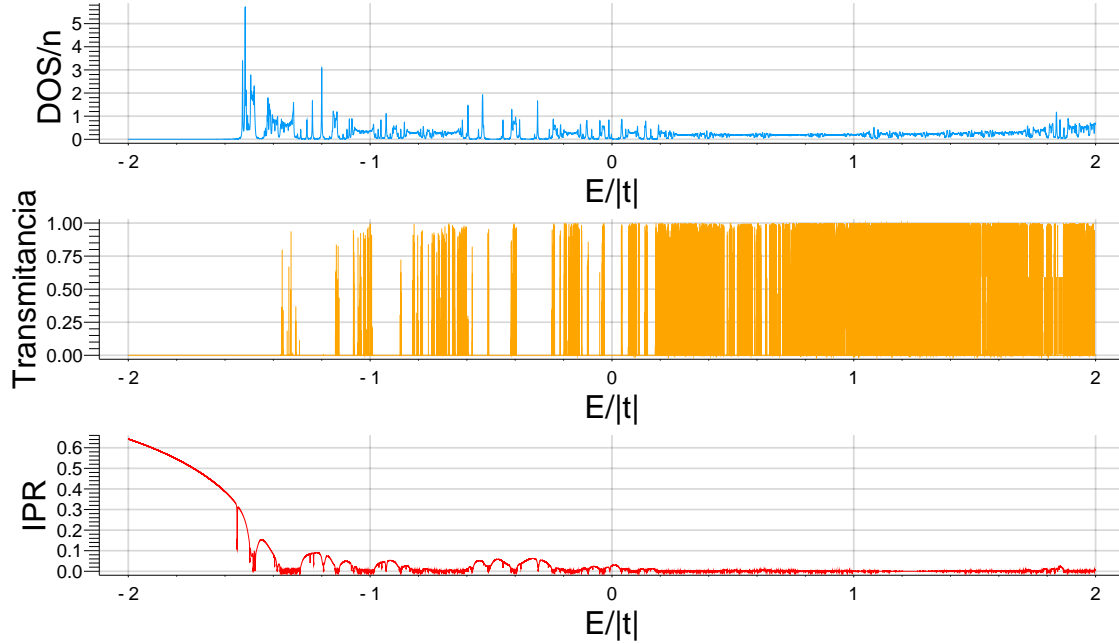


Figura 2.11: DOS (Azul), parte imaginaria de la energía igual a $10^{-3}|t|$, transmitancia (Amarillo) e IPR (Rojo) de una cadena de generación 26 en función de la energía $\frac{E}{|t|}$, con energías de sitio $\epsilon_1 = 0.2|t|$, $\epsilon_2 = 0.4|t|$ e integrales de salto $t_{11} = -|t|$, $t_{12} = -0.9|t|$, $t_{22} = -0.8|t|$

Para observar el comportamiento local de los espectros en la zona con una mayor cantidad de picos de alta conductividad se hizo una amplificación alrededor de $\frac{E}{|t|} = 0.550014$ de la figura 2.11. En la figura 2.12 se muestra los espectros de DOS (parte imaginaria de la energía igual a $10^{-8}|t|$, debido al traslape de los estados propios), transmitancia e IPR en función de la energía con los mismos valores para las energías de sitio e integrales de salto de la figura 2.11.

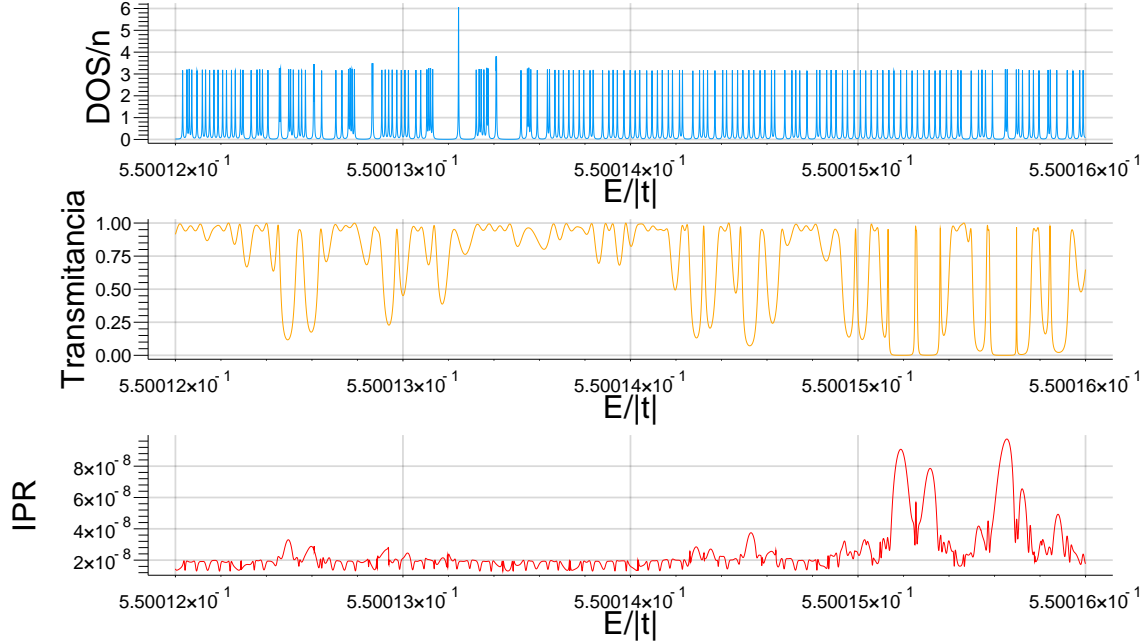


Figura 2.12: Amplificación de la figura 2.11. DOS (Azul), parte imaginaria de la energía igual a $10^{-8}|t|$, transmitancia (Amarillo) e IPR (Rojo) de una cadena de generación 26 en función de la energía $\frac{E}{|t|}$, con energías de sitio con energías de sitio $\epsilon_1 = 0.3|t|$, $\epsilon_2 = 0.6|t|$ e integrales de salto $t_{11} = -|t|$, $t_{12} = -0.9|t|$, $t_{22} = -0.8|t|$

En la figura 2.12 tenemos que el espectro de la transmitancia presenta alta conductividad, en DOS se observan una gran cantidad de estados propios (comparada con las ampliaciones de los espectros de los problemas de enlaces y sitios, figuras 2.4, 2.5 2.6 y 2.9), se tienen zonas en las que la transmitancia decae a 0 a pesar de que para la misma región de $\frac{E}{|t|}$ se tienen estados propios lo que nos indica que no todos los estados participan en el transporte electrónico. Se tienen mínimos del IPR ante los picos de alta transmitancia

2.4. Estado transparente

En los problemas anteriores se observó que algunos espectros de la transmitancia tenían picos cercanos a 1, para comprobar la existencia de estados transparentes se obtuvo de forma analítica la transmitancia para el problema de enlaces con $t_{1,1} = t_{1,2} = -|t|$ y $t_{22} = -0.8|t|$ en la energía $\frac{E}{|t|} = 0$. Al sustituir los valores en la matriz de transferencia se obtiene que $T_{11}(n)$ y $T_{22}(n)$ son iguales a cero para toda n por lo

que la transmitancia es

$$\mathbf{T}(E = 0) = |\tau|^2 = 4 \frac{1}{(\mathcal{T}_{21} - \mathcal{T}_{12})^2}, \quad (2.1)$$

con

$$\mathcal{T}_{12} = -t_{k(n),k(n+1)}T_{21}(n), \quad (2.2)$$

$$\mathcal{T}_{21} = T_{12}(n), \quad (2.3)$$

$$T_{12}(n) = \frac{t_{k(n),k(n-1)}}{t_{k(n),k(n+1)}}T_{12}(n-1)T_{21}(n-1), \quad (2.4)$$

$$T_{21}(n) = t_{k(n),k(n-1)}T_{12}(n-1)T_{21}(n-1). \quad (2.5)$$

Al desarrollar las ecuaciones de arriba se tiene que las generaciones que presenten $t_{k(n),k(n+1)} = t_{2,2}$ tendrán una transmitancia $\mathbf{T}(E = 0) = \frac{4}{2.05^2}$, mientras que las generaciones con $t_{k(n),k(n+1)} = t_{1,2} = t_{1,1}$ tendrán una transmitancia $\mathbf{T}(E = 0) = 1$. Por lo tanto, las generaciones 2, 8, 11, 18, y 26 no son estados transparentes, pero son estados con una transmitancia alta. Para verificar este comportamiento se hizo la figura 2.13 con los espectros de la transmitancia para $E = 0$ contra el número de la generación.

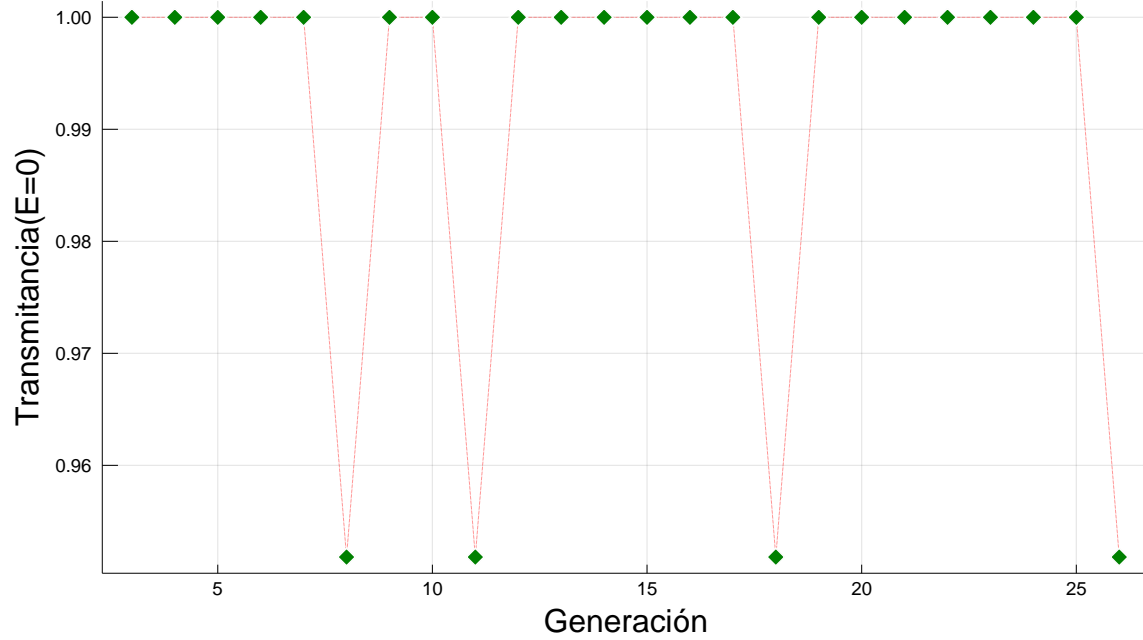


Figura 2.13: Transmitancia con $E = 0$ vs generación con energías de sitio iguales a 0 e integrales de salto $t_{22} = -0.8|t|$, $t_{12} = -|t|$ y $t_{11} = -|t|$.

En la figura 2.13, observamos que la transmitancia sigue el comportamiento predicho de forma analítica, tiene estados transparentes salvo las generaciones 8, 11, 18, 26 y coincide de manera exacta con lo calculado en cada generación.

Capítulo 3

Conclusiones

En este trabajo se estudiaron cadenas atómicas unidimensionales aperiódicas, cuyo ordenamiento está construido a partir de la secuencia de Kolakoski. Para ello se empleó la aproximación del Hamiltoniano de amarre fuerte, considerando interacciones solo a primeros vecinos y una temperatura de 0 K. El tamaño de los sistemas fue de aproximadamente 1cm de longitud (macroscópico); se desarrolló el método de renormalización al Hamiltoniano, DOS, matriz de transferencia e IPR para obtenerlas de manera exacta. Se hicieron diversos programas en el lenguaje Julia v 1.2, usando flotantes tipo *BigFloat* debido a que los términos involucrados en la renormalización para cadenas de generación $n = 26$ se encuentran fuera el orden de $10^{\pm 5000}$.

1. Con el desarrollo del método de renormalización se pudo analizar sistemas con 10^8 átomos.
2. Para los problemas de enlaces, sitios y mixto se encontraron múltiples estados con alta conductividad. En particular para el problema de enlaces con $t_{22} = -0.8|t|$, $t_{12} = -|t|$ y $t_{11} = -|t|$ se encontró de forma analítica que sólo las generaciones, n , en las que la sucesión de Kolakoski es tal que $K(n) = 2$, $K(n + 1) = 2$ la cadena no presenta un estado transparente en $E = 0$, estando en concordancia con los datos obtenidos para todas las generaciones de manera exacta.
3. Bajo el formalismo de la conductancia de Landauer basta con conocer la trans-

- mitancia para analizar al sistema. Se observó que el espectro de la DOS puede caracterizar el sistema tan bien como la transmitancia, sin embargo no todos los estados propios del sistema colaboran en la conductividad.
4. Para poder obtener información del sistema por medio del IPR es necesario conocer su comportamiento en una vecindad ya que nos permite saber la presencia de GAPs así como estados de alta transmitancia al comparar el IPR de acuerdo a los máximos y mínimos del espectro.
 5. Si bien en zonas de alta transmitancia nuestro sistema presenta un IPR del orden de $\frac{1}{100663295}$ en regiones de baja transmitancia (cercana a cero) el IPR es un un máximo local pero no igual a 1. Esto último podríamos explicarlo si consideramos que la transmitancia nunca fue igual a 0 (la transmitancia llegó a tomar valores del orden de 10^{-4000}) por lo que la función de onda logra propagarse y por tanto no tenemos estados totalmente localizados. Por medio del efecto túnel podemos entender que en presencia de alta transmitancia se tienen estados extendidos pero no se tienen estados localizados con una transmitancia baja.
 6. Al realizar una amplificación y estudiar los espectros de los casos de manera local se observan máximos locales en DOS, estos picos están localizados en los valores propios del hamiltoniano y se observa que a mayor cantidad de estados por intervalo en la energía se tienen zonas de alta transmitancia más anchas; se encontró que no todos los estados participan en el transporte eléctrico.
 7. Cuando las energías de sitio son diferentes de cero los espectros pierden simetría de espejo alrededor del cero, esto podemos explicarlo si consideramos al Hamiltoniano del sistema como un Hamiltoniano diagonal más una perturbación, $H = H_{diagonal} + H_{perturbacion}$, por tanto el polinomio característico del Hamiltoniano pierde simetría de espejo alrededor del cero. Se observó que conforme la aperiodicidad de la cadena se vuelve mayor hay más GAPs en la cadena y cubren una mayor zona.

8. Se buscaron casos en los que el sistema presentara propiedades del tipo fractal, u otro tipo de regla o patrón, en los espectros de DOS, transmitancia, IPR, sin embargo, no se encontró ninguno.

El método de renormalización en sistemas no periódicos es de mucho interés, vimos que permite estudiar un sistema macroscópico de manera exacta y que estos pueden tener estados transparentes. Incluso es posible agregara imperfecciones o estudiar otro tipo de excitaciones como fotones o fonones, el trabajo desarrollado aquí puede extenderse a sistemas de mayor dimensión permitiendo el desarrollo de materiales considerando las interacciones adecuadas, tales como semiconductores, por medio de otros modelos de transporte más avanzados como el formalismo Kubo-Greenwood o bien para tener una mejor comprensión del transporte cuántico.

Apéndice A

Renormalización, Hamiltoniano

En este apéndice obtenemos los valores de las autoenergías e integrales de salto de cadena de generación n , el sistema de ecuaciones es

$$\begin{pmatrix} E-\epsilon_L(n-1) & -t(n-1) & 0 & 0 & 0 \\ -t(n-1) & E-\epsilon_R(n-1) & -t_{k(n),1} & 0 & 0 \\ 0 & -t_{k(n),1} & E-\epsilon_L(n-1) & -t(n-1) & 0 \\ 0 & 0 & -t(n-1) & E-\epsilon_R(n-1) & -t_{k(n),k(n+1)} \\ 0 & 0 & 0 & -t_{k(n),k(n+1)} & E-\epsilon_k(n+1) \end{pmatrix} G_{5 \times 5} = I_{5 \times 5}, \quad (\text{A.1})$$

donde $G_{5 \times 5}$ es la matriz de funciones de Green de nuestro Hamiltoniano. Para reducir la notación se evitará escribir $(n-1)$.

Multiplicando la primer matriz por la primer columna de $G_{5 \times 5}$ obtenemos las siguientes ecuaciones.

$$G_{11}(E - \epsilon_L) - G_{12}t = 1 \quad (\text{A.2})$$

$$-G_{11}t + G_{12}(E - \epsilon_R) - G_{13}t_{k(n),1} = 0 \quad (\text{A.3})$$

$$-G_{12}t_{k(n),1} + G_{13}(E - \epsilon_L) - G_{14}t = 0 \quad (\text{A.4})$$

$$-G_{13}t + G_{14}(E - \epsilon_R) - G_{15}t_{k(n),k(n+1)} = 0 \quad (\text{A.5})$$

De las ecuaciones A.2, A.3, A.4 y A.5 se sustituye hasta tener una sola ecuación en

términos de G_{11} y G_{15} .

$$G_{14} = \frac{G_{13}t + G_{15}t_{k(n),k(n+1)}}{E - \epsilon_R} \quad (\text{A.6})$$

$$G_{13} = \frac{G_{12}t_{k(n),1} + G_{14}t}{E - \epsilon_L} \quad (\text{A.7})$$

$$G_{13} = \frac{G_{12}t_{k(n),1} + G_{15} \frac{tt_{k(n),k(n+1)}}{E - \epsilon_R}}{E - \epsilon_L - \frac{t^2}{E - \epsilon_R}} \quad (\text{A.8})$$

$$G_{12} = \frac{G_{11}t + G_{13}t_{k(n),1}}{E - \epsilon_R} \quad (\text{A.9})$$

$$\begin{aligned} &= \frac{G_{11}t + G_{15} \frac{tt_{k(n),1}t_{k(n),k(n+1)}}{(E - \epsilon_R)(E - \epsilon_L) - t^2}}{E - \epsilon_R - \frac{t_{k(n),1}^2(E - \epsilon_R)}{(E - \epsilon_R)(E - \epsilon_L) - t^2}} \end{aligned} \quad (\text{A.10})$$

Sea

$$W_{RLT} = \frac{1}{(E - \epsilon_R)(E - \epsilon_L) - t^2} \quad (\text{A.11})$$

$$\begin{aligned} 1 &= G_{11} \left(E - \epsilon_L - \frac{t^2}{E - \epsilon_R - t_{k(n),1}^2 (E - \epsilon_R) W_{RLT}} \right) \\ &- G_{15} \frac{t^2 t_{k(n),1} t_{k(n),k(n+1)}}{(E - \epsilon_R)^2 (E - \epsilon_L) - t^2 (E - \epsilon_R) - t_{k(n),1}^2 (E - \epsilon_R)} \end{aligned} \quad (\text{A.12})$$

Multiplicando la primer matriz por la última columna de $G_{5 \times 5}$ obtenemos las siguientes ecuaciones.

$$-G_{15}t + G_{25}(E - \epsilon_R) - G_{35}t_{k(n),1} = 0 \quad (\text{A.13})$$

$$-G_{25}t_{k(n),1} + G_{35}(E - \epsilon_L) - G_{45}t = 0 \quad (\text{A.14})$$

$$-G_{35}t + G_{45}(E - \epsilon_R) - G_{55}t_{k(n),k(n+1)} = 0 \quad (\text{A.15})$$

$$-G_{45}t_{k(n),k(n+1)} - G_{55}(E - \epsilon_{k(n+1)}) = 1 \quad (\text{A.16})$$

De las ecuaciones A.13, A.14, A.15 y A.16 se sustituye hasta tener una sola ecuación en términos de G_{11} y G_{15} .

$$G_{25} = \frac{G_{15}t + G_{35}t_{k(n),1}}{E - \epsilon_R} \quad (\text{A.17})$$

$$G_{35} = \frac{G_{25}t_{k(n),1} + G_{45}t}{E - \epsilon_L} \quad (\text{A.18})$$

$$= \frac{G_{45}t + G_{15} \frac{tt_{k(n),1}}{E - \epsilon_R}}{E - \epsilon_L - \frac{t_{k(n),1}^2}{E - \epsilon_R}} \quad (\text{A.19})$$

$$G_{45} = \frac{G_{35}t + G_{55}t_{k(n),k(n+1)}}{E - \epsilon_R} \quad (\text{A.20})$$

$$= \frac{G_{55}t_{k(n),k(n+1)} + G_{15} \frac{t^2 t_{k(n),1}}{(E - \epsilon_R)(E - \epsilon_L) - t_{k(n),1}^2}}{E - \epsilon_R - \frac{t^2(E - \epsilon_R)}{(E - \epsilon_R)(E - \epsilon_L) - t_{k(n),1}^2}} \quad (\text{A.21})$$

Sea

$$W_{RLTN} = \frac{1}{(E - \epsilon_R)(E - \epsilon_L) - t_{k(n),1}^2} \quad (\text{A.22})$$

$$\begin{aligned} 1 &= G_{55}(E - \epsilon_{k(n+1)} - \frac{t_{k(n),k(n+1)}^2}{E - \epsilon_R - t^2(E - \epsilon_R)W_{RLTN}}) \\ -G_{15} &\frac{t^2 t_{k(n),1} t_{k(n),k(n+1)}}{(E - \epsilon_R)^2(E - \epsilon_L) - t^2(E - \epsilon_R) - t_{k(n),1}^2(E - \epsilon_R)} \end{aligned} \quad (\text{A.23})$$

por lo que de las ecuaciones A.12, A.23 tenemos que

$$\epsilon_L(n) = \epsilon_L + \frac{t^2}{E - \epsilon_R - t_{k(n),1}^2(E - \epsilon_R)W_{RLT}} \quad (\text{A.24})$$

$$\epsilon_R(n) = \epsilon_{k(n+1)} + \frac{t_{k(n),k(n+1)}^2}{E - \epsilon_R - t^2(E - \epsilon_R)W_{RLTN}} \quad (\text{A.25})$$

$$t(n) = \frac{t^2 t_{k(n),1} t_{k(n),k(n+1)}}{(E - \epsilon_R)^2(E - \epsilon_L) - t^2(E - \epsilon_R) - t_{k(n),1}^2(E - \epsilon_R)} \quad (\text{A.26})$$

Apéndice B

Renormalización, DOS

En este apéndice obtenemos la densidad de estados de la cadena de generación n el sistema de ecuaciones es

$$\begin{pmatrix} E-\epsilon_L(n-1) & -t(n-1) & 0 & 0 & 0 \\ -t(n-1) & E-\epsilon_R(n-1) & -t_{k(n),1} & 0 & 0 \\ 0 & -t_{k(n),1} & E-\epsilon_L(n-1) & -t(n-1) & 0 \\ 0 & 0 & -t(n-1) & E-\epsilon_R(n-1) & -t_{k(n),k(n+1)} \\ 0 & 0 & 0 & -t_{k(n),k(n+1)} & E-\epsilon_k(n+1) \end{pmatrix} G_{5 \times 5} = I_{5 \times 5}. \quad (\text{B.1})$$

Por la forma en la que construimos nuestra cadena tenemos que DOS está determinada por

$$\begin{aligned} DOS(n) &= -\frac{1}{\pi} \text{Im}\{D_1(n-1)G_{11} + D_2(n-1)G_{22} + D_3(n-1)G_{12} + D_4(n-1) \\ &\quad + D_1(n-1)G_{33} + D_2(n-1)G_{44} + D_3(n-1)G_{34} + D_4(n-1) + G_{55}\}, \\ &= -\frac{1}{\pi} \text{Im}\{D_1(n)G_{11} + D_2(n)G_{55} + D_3(n)G_{15} + D_4(n)\} \end{aligned} \quad (\text{B.2})$$

ahora buscaremos expresar G_{12} , G_{22} , G_{33} , G_{34} y G_{44} en términos de G_{11} , G_{15} y G_{55} . Multiplicando los renglones 2,3 y 4 por la matriz G obtenemos las siguientes ecuaciones.

$$-G_{11}t + G_{12}(E - \epsilon_R) - G_{13}t_{k(n),1} = 0 \quad (\text{B.3})$$

$$-G_{12}t + G_{22}(E - \epsilon_R) - G_{23}t_{k(n),1} = 1 \quad (\text{B.4})$$

$$-G_{13}t + G_{23}(E - \epsilon_R) - G_{33}t_{k(n),1} = 0 \quad (\text{B.5})$$

$$-G_{14}t + G_{24}(E - \epsilon_R) - G_{34}t_{k(n),1} = 0 \quad (\text{B.6})$$

$$-G_{15}t + G_{25}(E - \epsilon_R) - G_{35}t_{k(n),1} = 0 \quad (\text{B.7})$$

$$-G_{12}t_{k(n),1} + G_{13}(E - \epsilon_L) - G_{14}t = 0 \quad (\text{B.8})$$

$$-G_{22}t_{k(n),1} + G_{23}(E - \epsilon_L) - G_{24}t = 0 \quad (\text{B.9})$$

$$-G_{23}t_{k(n),1} + G_{33}(E - \epsilon_L) - G_{34}t = 1 \quad (\text{B.10})$$

$$-G_{24}t_{k(n),1} + G_{34}(E - \epsilon_L) - G_{44}t = 0 \quad (\text{B.11})$$

$$-G_{25}t_{k(n),1} + G_{35}(E - \epsilon_L) - G_{45}t = 0 \quad (\text{B.12})$$

$$-G_{13}t + G_{14}(E - \epsilon_R) - G_{15}t_{k(n),k(n+1)} = 0 \quad (\text{B.13})$$

$$-G_{23}t + G_{24}(E - \epsilon_R) - G_{25}t_{k(n),k(n+1)} = 0 \quad (\text{B.14})$$

$$-G_{33}t + G_{34}(E - \epsilon_R) - G_{35}t_{k(n),k(n+1)} = 0 \quad (\text{B.15})$$

$$-G_{34}t + G_{44}(E - \epsilon_R) - G_{45}t_{k(n),k(n+1)} = 1 \quad (\text{B.16})$$

$$-G_{35}t + G_{45}(E - \epsilon_R) - G_{55}t_{k(n),k(n+1)} = 0 \quad (\text{B.17})$$

Con las ecuaciones B.3, B.7, B.8, B.9, B.10, B.12 y B.13 obtenemos a G_{12} y G_{22} en términos de G_{11} , G_{15} y G_{55}

$$G_{14} = \frac{G_{15}t_{k(n),k(n+1)} + G_{13}t}{E - \epsilon_R} \quad (\text{B.18})$$

$$G_{13} = \frac{G_{12}t_{k(n),1} + G_{14}t}{E - \epsilon_L} \quad (\text{B.19})$$

$$G_{13} = \frac{G_{12}t_{k(n),1} + G_{15}\frac{tt_{k(n),k(n+1)}}{E-\epsilon_R}}{E - \epsilon_L - \frac{t^2}{E-\epsilon_R}} \quad (\text{B.20})$$

$$G_{12} = \frac{G_{11}t + G_{13}t_{k(n),1}}{E - \epsilon_R} \quad (\text{B.21})$$

$$G_{12} = \frac{G_{11}t + G_{15}tt_{k(n),1}t_{k(n),k(n+1)}W_{RLT}}{E - \epsilon_R - t_{k(n),1}^2(E - \epsilon_R)W_{RLT}} \quad (\text{B.22})$$

$$G_{45} = \frac{G_{35}(E - \epsilon_L) - G_{25}t_{k(n),1}}{t} \quad (\text{B.23})$$

$$= \frac{G_{35}t + G_{55}t_{k(n),k(n+1)}}{E - \epsilon_R} \quad (\text{B.24})$$

$$G_{35} = \frac{G_{25}(E - \epsilon_R)t_{k(n),1} + G_{55}tt_{k(n),k(n+1)}}{(E - \epsilon_R)(E - \epsilon_L) - t^2} \quad (\text{B.25})$$

sustituyendo en B.7

$$-G_{15}t + G_{25}(E - \epsilon_R) - G_{55}tt_{k(n),1}t_{k(n),k(n+1)}W_{RLT} - G_{25}t_{k(n),1}^2(E - \epsilon_R)W_{RLT} = 0 \quad (\text{B.26})$$

$$G_{25} = \frac{G_{15}t + G_{55}tt_{k(n),1}t_{k(n),k(n+1)}W_{RLT}}{E - \epsilon_R - t_{k(n),1}^2(E - \epsilon_R)W_{RLT}} \quad (\text{B.27})$$

$$G_{24} = \frac{G_{23}t + G_{25}t_{k(n),k(n+1)}}{E - \epsilon_R} \quad (\text{B.28})$$

$$G_{23} = \frac{G_{22}t_{k(n),1} + G_{24}t}{E - \epsilon_L} \quad (\text{B.29})$$

$$G_{23} = G_{22}t_{k(n),1}(E - \epsilon_R)W_{RLT} + G_{25}tt_{k(n),k(n+1)}W_{RLT} \quad (\text{B.30})$$

$$= G_{22}t_{k(n),1}(E - \epsilon_R)W_{RLT} + \frac{G_{15}t^2t_{k(n),k(n+1)}W_{RLT} + G_{55}t^2t_{k(n),1}t_{k(n),k(n+1)}^2W_{RLT}^2}{E - \epsilon_R - t_{k(n),1}^2(E - \epsilon_R)W_{RLT}} \quad (\text{B.31})$$

Sustituyendo G_{12} y G_{23} en B.4

$$G_{22} = \frac{1}{E - \epsilon_R - t_{k(n),1}^2(E - \epsilon_R)W_{RLT}} + \frac{G_{11}t^2 + G_{15}2t^2t_{k(n),1}t_{k(n),k(n+1)}W_{RLT} + G_{55}t^2t_{k(n),1}^2t_{k(n),k(n+1)}^2W_{RLT}^2}{(E - \epsilon_R - t_{k(n),1}^2(E - \epsilon_R)W_{RLT})^2} \quad (\text{B.32})$$

Con las ecuaciones B.3, B.6, B.7, B.8, B.11, B.12, B.13 y obtenemos a G_{45} y G_{44}

en términos de G_{11} G_{15} y G_{55}

$$G_{12} = \frac{G_{13}(E - \epsilon_L) - G_{14}t}{t_{k(n),1}} \quad (\text{B.33})$$

$$= \frac{G_{11}t + G_{13}t_{k(n),1}}{E - \epsilon_R} \quad (\text{B.34})$$

$$G_{13} = G_{14}t(E - \epsilon_R)W_{RLTN} + G_{11}tt_{k(n),1}W_{RLTN} \quad (\text{B.35})$$

Sustituyendo G_{13} en B.13

$$G_{14} = \frac{G_{11}t^2t_{k(n),1}W_{RLTN} + G_{15}t_{k(n),k(n+1)}}{E - \epsilon_R - t^2(E - \epsilon_R)W_{RLTN}} \quad (\text{B.36})$$

$$G_{34} = \frac{G_{44}t + G_{24}t_{k(n),1}}{E - \epsilon_L} \quad (\text{B.37})$$

$$G_{24} = \frac{G_{14}t + G_{34}t_{k(n),1}}{E - \epsilon_R} \quad (\text{B.38})$$

$$G_{34} = \frac{G_{44}t + \frac{G_{14}tt_{k(n),1}}{E - \epsilon_R}}{E - \epsilon_L - \frac{t_{k(n),1}^2}{E - \epsilon_R}} \quad (\text{B.39})$$

$$= G_{44}t(E - \epsilon_R)W_{RLTN} + G_{14}tt_{k(n),1}W_{RLTN} \quad (\text{B.40})$$

$$= G_{44}t(E - \epsilon_R)W_{RLTN} + \frac{G_{11}t^3t_{k(n),1}^2W_{RLTN}^2 + G_{15}tt_{k(n),1}t_{k(n),k(n+1)}W_{RLTN}}{E - \epsilon_R - t^2(E - \epsilon_R)W_{RLTN}} \quad (\text{B.41})$$

$$G_{25} = \frac{G_{15}t + G_{35}t_{k(n),1}}{E - \epsilon_R} \quad (\text{B.42})$$

$$= \frac{G_{35}(E - \epsilon_L) - G_{45}t}{t_{k(n),1}} \quad (\text{B.43})$$

$$G_{35} = G_{15}tt_{k(n),1}W_{RLTN} + G_{45}t(E - \epsilon_R)W_{RLTN} \quad (\text{B.44})$$

$$-G_{15}t^2t_{k(n),1}W_{RLTN} - G_{45}t^2(E - \epsilon_R)W_{RLTN} + G_{45}(E - \epsilon_R) - G_{55}t_{k(n),k(n+1)} = 0 \quad (\text{B.45})$$

$$G_{45} = \frac{G_{15}t^2t_{k(n),1}W_{RLTN} + G_{55}t_{k(n),k(n+1)}}{E - \epsilon_R - t^2(E - \epsilon_R)W_{RLTN}} \quad (\text{B.46})$$

$$G_{44} = \frac{1}{E - \epsilon_R - t^2(E - \epsilon_R)W_{RLTN}} \quad (\text{B.47})$$

$$+ \frac{G_{11}t^4t_{k(n),1}^2W_{RLTN}^2 + G_{15}2t^2t_{k(n),1}t_{k(n),k(n+1)}W_{RLTN} + G_{55}t_{k(n),k(n+1)}^2}{(E - \epsilon_R - t^2(E - \epsilon_R)W_{RLTN})^2}$$

Con las ecuaciones B.3, B.6, B.7, B.11, B.25 y B.20 obtenemos a G_{34} en términos de G_{11} , G_{15} y G_{55}

$$G_{25} = \frac{G_{15}t + G_{35}t_{k(n),1}}{E - \epsilon_R} \quad (\text{B.48})$$

$$W_{RLTTN} = \frac{1}{(E - \epsilon_R)(E - \epsilon_L) - t^2 - t_{k(n),1}^2} \quad (\text{B.49})$$

Sustituyendo G_{25} en B.25

$$G_{35} = G_{55}tt_{k(n),k(n+1)}W_{RLTTN} + G_{15}tt_{k(n),1}W_{RLTTN} \quad (\text{B.50})$$

$$G_{12} = \frac{G_{11}t + G_{13}t_{k(n),1}}{E - \epsilon_R} \quad (\text{B.51})$$

Sustituyendo G_{12} en B.20

$$G_{13} = G_{11}tt_{k(n),1}W_{RLTTN} + G_{15}tt_{k(n),k(n+1)}W_{RLTTN} \quad (\text{B.52})$$

$$\begin{aligned} G_{33} &= (E - \epsilon_R)W_{RLTTN} + G_{11}t^2t_{k(n),1}^2W_{RLTTN}^2 \\ &+ G_{15}2t^2t_{k(n),1}t_{k(n),k(n+1)}W_{RLTTN}^2 + G_{55}t^2t_{k(n),k(n+1)}^2W_{RLTTN}^2 \end{aligned} \quad (\text{B.53})$$

$$G_{34} = \frac{G_{44}t + G_{24}t_{k(n),1}}{(E - \epsilon_L)} \quad (\text{B.54})$$

$$G_{24}t = \frac{G_{14}t + G_{34}t_{k(n),1}}{E - \epsilon_R} \quad (\text{B.55})$$

$$G_{34} = G_{44}t(E - \epsilon_R)W_{RLTN} + G_{14}tt_{k(n),1}W_{RLTN} \quad (\text{B.56})$$

$$G_{44} = 1 + G_{34}t + G_{45}t_{K(n),K(n+1)} \quad (\text{B.57})$$

$$\begin{aligned} G_{34} &= tW_{RLTTN} + G_{14}tt_{k(n),1}W_{RLTTN} + G_{45}tt_{k(n),K(n+1)}W_{RLTTN} \\ &= tW_{RLTTN} + \frac{G_{11}t^3t_{k(n),1}^2W_{RLTN}W_{RLTTN} + G_{15}tt_{k(n),1}t_{k(n),k(n+1)}W_{RLTTN}}{E - \epsilon_R - t^2(E - \epsilon_R)W_{RLTN}} \\ &\quad + \frac{G_{15}t^3t_{k(n),1}t_{k(n),K(n+1)}W_{RLTN}W_{RLTTN} + G_{55}tt_{k(n),k(n+1)}^2W_{RLTTN}}{E - \epsilon_R - t^2(E - \epsilon_R)W_{RLTN}} \end{aligned} \quad (\text{B.58})$$

Por último sustituimos G_{12} , G_{22} , G_{33} , G_{34} y G_{44} en B.3

$$\begin{aligned}
 DOS(n) &= -\frac{1}{\pi} \text{Im}\{D_1(n-1)G_{11} + D_2(n-1)G_{22} + D_3(n-1)G_{12} + D_4(n-1) \\
 &\quad + D_1(n-1)G_{33} + D_2(n-1)G_{44} + D_3(n-1)G_{34} + D_4(n-1) + G_{55}\} \\
 &= -\frac{1}{\pi} \text{Im}\{G_{11} \left[D_1(n-1) + D_2(n-1) \frac{t^2}{(E - \epsilon_R - t_{k(n),1}^2 (E - \epsilon_R) W_{RLT})^2} \right. \\
 &\quad + D_3(n-1) \frac{t}{E - \epsilon_R - t_{k(n),1}^2 (E - \epsilon_R) W_{RLT}} + D_1(n-1) t^2 t_{k(n),1}^2 W_{RLTTN}^2 \\
 &\quad + D_2(n-1) \frac{t^4 t_{k(n),1}^2 W_{RLTN}^2}{(E - \epsilon_R - t^2 (E - \epsilon_R) W_{RLTN})^2} \\
 &\quad \left. + D_3(n-1) \frac{t^3 t_{k(n),1}^2 W_{RLTN} W_{RLTTN}}{E - \epsilon_R - t^2 (E - \epsilon_R) W_{RLTN}} \right] \\
 &\quad + G_{55} \left[1 + D_2(n-1) \frac{t^2 t_{k(n),1}^2 t_{k(n),k(n+1)}^2 W_{RLT}^2}{(E - \epsilon_R - t_{k(n),1}^2 (E - \epsilon_R) W_{RLT})^2} \right. \\
 &\quad + D_1(n-1) t^2 t_{k(n),k(n+1)}^2 W_{RLTTN}^2 \\
 &\quad + D_2(n-1) \frac{t_{k(n),k(n+1)}^2}{(E - \epsilon_R - t^2 (E - \epsilon_R) W_{RLTN})^2} \\
 &\quad \left. + D_3(n-1) \frac{t t_{k(n),k(n+1)}^2 W_{RLTTN}}{E - \epsilon_R - t^2 (E - \epsilon_R) W_{RLTN}} \right] \\
 &\quad + G_{15} \left[D_2(n-1) \frac{2t^2 t_{k(n),1} t_{k(n),k(n+1)} W_{RLT}}{(E - \epsilon_R - t_{k(n),1}^2 (E - \epsilon_R) W_{RLT})^2} \right. \\
 &\quad \left. + D_3(n-1) \frac{t t_{k(n),1} t_{k(n),k(n+1)} W_{RLT}}{E - \epsilon_R - t_{k(n),1}^2 (E - \epsilon_R) W_{RLT}} \right. \\
 &\quad + D_1(n-1) 2t^2 t_{k(n),1} t_{k(n),k(n+1)} W_{RLTTN}^2 + D_2(n-1) \frac{2t^2 t_{k(n),1} t_{k(n),k(n+1)} W_{RLTN}}{(E - \epsilon_R - t^2 (E - \epsilon_R) W_{RLTN})^2} \\
 &\quad \left. D_3(n-1) \left(\frac{t t_{k(n),1} t_{k(n),k(n+1)} W_{RLTTN}}{E - \epsilon_R - t^2 (E - \epsilon_R) W_{RLTN}} + \frac{t^3 t_{k(n),1} t_{k(n),k(n+1)} W_{RLTN} W_{RLTTN}}{E - \epsilon_R - t^2 (E - \epsilon_R) W_{RLTN}} \right) \right] \\
 &\quad + 2D_4(n-1) + D_2(n-1) \frac{1}{E - \epsilon_R - t_{k(n),1}^2 (E - \epsilon_R) W_{RLT}} \\
 &\quad + D_1(n-1) (E - \epsilon_R) W_{RLTTN} \\
 &\quad + D_2(n-1) \frac{1}{E - \epsilon_R - t^2 (E - \epsilon_R) W_{RLTN}} + D_3(n-1) t W_{RLTTN} \} \\
 \end{aligned} \tag{B.59}$$

Con esto renormalizamos la densidad de estados de nuestro sistema de generación n en términos de cadenas de generación $n - 1$.

Apéndice C

Renormalización, Matriz de transferencia.

La matriz de transferencia T para nuestra cadena de generación n está dada por

$$T(n) = T_{k(n+1)}T(n-1)UT(n-1), \quad (\text{C.1})$$

donde U es

$$U = \begin{pmatrix} \frac{(\epsilon_1 - E)(\epsilon_{k(n)} - E)}{t_{1,2}t_{k(n),1}} - \frac{t_{k(n),1}}{t_{1,2}} & \frac{(\epsilon_1 - E)t_{k(n),k(n-1)}}{t_{1,2}t_{k(n),1}} \\ -\frac{\epsilon_{k(n)} - E}{t_{k(n),1}} & -\frac{t_{k(n),k(n-1)}}{t_{k(n),1}} \end{pmatrix}, \quad (\text{C.2})$$

por lo que tenemos que encontrar las entradas de la matriz $T(n)$ de acuerdo a C.1, primero calculamos las entradas del producto $UT(n-1)$

$$[UT(n-1)]_{11} = T_{11}(n-1)\left[\frac{(\epsilon_1 - E)(\epsilon_{k(n)} - E)}{t_{1,2}t_{k(n),1}} - \frac{t_{k(n),1}}{t_{1,2}}\right] + T_{21}(n-1)\left[\frac{(\epsilon_1 - E)t_{k(n),k(n-1)}}{t_{1,2}t_{k(n),1}}\right] \quad (\text{C.3})$$

$$[UT(n-1)]_{12} = T_{12}(n-1)\left[\frac{(\epsilon_1 - E)(\epsilon_{k(n)} - E)}{t_{1,2}t_{k(n),1}} - \frac{t_{k(n),1}}{t_{1,2}}\right] + T_{22}(n-1)\left[\frac{(\epsilon_1 - E)t_{k(n),k(n-1)}}{t_{1,2}t_{k(n),1}}\right] \quad (\text{C.4})$$

$$[UT(n-1)]_{21} = -T_{11}(n-1)\left[\frac{\epsilon_{k(n)} - E}{t_{k(n),1}}\right] - T_{21}(n-1)\left[\frac{t_{k(n),k(n-1)}}{t_{k(n),1}}\right], \quad (\text{C.5})$$

ahora obtenemos las entradas en $T(n)$ con el producto $T(n-1)[UT(n-1)]$

$$[UT(n-1)]_{22} = -T_{12}(n-1)\left[\frac{\epsilon_{k(n)} - E}{t_{k(n),1}}\right] - T_{22}(n-1)\left[\frac{t_{k(n),k(n-1)}}{t_{k(n),1}}\right] \quad (\text{C.6})$$

$$\begin{aligned} [T(n-1)UT(n-1)]_{11} = T_{11}(n-1) & \left[T_{11}(n-1)\left[\frac{(\epsilon_1 - E)(\epsilon_{k(n)} - E)}{t_{1,2}t_{k(n),1}} - \frac{t_{k(n),1}}{t_{1,2}}\right] \right. \\ & \left. + T_{21}(n-1)\left[\frac{(\epsilon_1 - E)t_{k(n),k(n-1)}}{t_{1,2}t_{k(n),1}}\right] \right] \\ & + T_{12}(n-1) \left[-T_{11}(n-1)\left[\frac{\epsilon_{k(n)} - E}{t_{k(n),1}}\right] - T_{21}(n-1)\left[\frac{t_{k(n),k(n-1)}}{t_{k(n),1}}\right] \right] \end{aligned} \quad (\text{C.7})$$

$$\begin{aligned} [T(n-1)UT(n-1)]_{12} = T_{11}(n-1) & \left[T_{12}(n-1)\left[\frac{(\epsilon_1 - E)(\epsilon_{k(n)} - E)}{t_{1,2}t_{k(n),1}} - \frac{t_{k(n),1}}{t_{1,2}}\right] \right. \\ & \left. + T_{22}(n-1)\left[\frac{(\epsilon_1 - E)t_{k(n),k(n-1)}}{t_{1,2}t_{k(n),1}}\right] \right] \\ & + T_{12}(n-1) \left[-T_{12}(n-1)\left[\frac{\epsilon_{k(n)} - E}{t_{k(n),1}}\right] - T_{22}(n-1)\left[\frac{t_{k(n),k(n-1)}}{t_{k(n),1}}\right] \right] \end{aligned} \quad (\text{C.8})$$

$$\begin{aligned} [T(n-1)UT(n-1)]_{21} = T_{21}(n-1) & \left[T_{11}(n-1)\left[\frac{(\epsilon_1 - E)(\epsilon_{k(n)} - E)}{t_{1,2}t_{k(n),1}} - \frac{t_{k(n),1}}{t_{1,2}}\right] \right. \\ & \left. + T_{21}(n-1)\left[\frac{(\epsilon_1 - E)t_{k(n),k(n-1)}}{t_{1,2}t_{k(n),1}}\right] \right] \\ & + T_{22}(n-1) \left[-T_{11}(n-1)\left[\frac{\epsilon_{k(n)} - E}{t_{k(n),1}}\right] - T_{21}(n-1)\left[\frac{t_{k(n),k(n-1)}}{t_{k(n),1}}\right] \right] \end{aligned} \quad (\text{C.9})$$

$$\begin{aligned}
 [T(n-1)UT(n-1)]_{22} &= T_{21}(n-1) \left[T_{12}(n-1) \left[\frac{(\epsilon_1 - E)(\epsilon_{k(n)} - E)}{t_{1,2}t_{k(n),1}} - \frac{t_{k(n),1}}{t_{1,2}} \right] \right. \\
 &\quad \left. + T_{22}(n-1) \left[\frac{(\epsilon_1 - E)t_{k(n),k(n-1)}}{t_{1,2}t_{k(n),1}} \right] \right] \\
 &\quad + T_{22}(n-1) \left[-T_{12}(n-1) \left[\frac{\epsilon_{k(n)} - E}{t_{k(n),1}} \right] - T_{22}(n-1) \left[\frac{t_{k(n),k(n-1)}}{t_{k(n),1}} \right] \right]
 \end{aligned} \tag{C.10}$$

Por último calculamos el producto $T_{k(n+1)}[T(n-1)UT(n-1)]$ con $T_{k(n+1)}$ igual a

$$T_{k(n+1)} = \begin{pmatrix} -\frac{\epsilon_{k(n)} - E}{t_{k(n),k(n+1)}} & -\frac{t_{k(n),k(n-1)}}{t_{k(n),k(n+1)}} \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \tag{C.11}$$

$$\begin{aligned}
 T_{11}(n) &= -\frac{\epsilon_{k(n)} - E}{t_{k(n),k(n+1)}} \left(T_{11}(n-1) \left[T_{11}(n-1) \left[\frac{(\epsilon_1 - E)(\epsilon_{k(n)} - E)}{t_{1,2}t_{k(n),1}} - \frac{t_{k(n),1}}{t_{1,2}} \right] \right. \right. \\
 &\quad \left. \left. + T_{21}(n-1) \left[\frac{(\epsilon_1 - E)t_{k(n),k(n-1)}}{t_{1,2}t_{k(n),1}} \right] \right] \right. \\
 &\quad \left. + T_{12}(n-1) \left[-T_{11}(n-1) \left[\frac{\epsilon_{k(n)} - E}{t_{k(n),1}} \right] - T_{21}(n-1) \left[\frac{t_{k(n),k(n-1)}}{t_{k(n),1}} \right] \right] \right) \\
 &\quad - \frac{t_{k(n),k(n-1)}}{t_{k(n),k(n+1)}} \left(T_{21}(n-1) \left[T_{11}(n-1) \left[\frac{(\epsilon_1 - E)(\epsilon_{k(n)} - E)}{t_{1,2}t_{k(n),1}} - \frac{t_{k(n),1}}{t_{1,2}} \right] \right. \right. \\
 &\quad \left. \left. + T_{21}(n-1) \left[\frac{(\epsilon_1 - E)t_{k(n),k(n-1)}}{t_{1,2}t_{k(n),1}} \right] \right] \right. \\
 &\quad \left. + T_{22}(n-1) \left[-T_{11}(n-1) \left[\frac{\epsilon_{k(n)} - E}{t_{k(n),1}} \right] - T_{21}(n-1) \left[\frac{t_{k(n),k(n-1)}}{t_{k(n),1}} \right] \right] \right)
 \end{aligned} \tag{C.12}$$

$$\begin{aligned}
 T_{12}(n) = & -\frac{\epsilon_{k(n)} - E}{t_{k(n),k(n+1)}} \left(T_{11}(n-1) \left[T_{12}(n-1) \left[\frac{(\epsilon_1 - E)(\epsilon_{k(n)} - E)}{t_{1,2}t_{k(n),1}} - \frac{t_{k(n),1}}{t_{1,2}} \right] \right. \right. \\
 & \left. \left. + T_{22}(n-1) \left[\frac{(\epsilon_1 - E)t_{k(n),k(n-1)}}{t_{1,2}t_{k(n),1}} \right] \right] \right. \\
 & \left. + T_{12}(n-1) \left[-T_{12}(n-1) \left[\frac{\epsilon_{k(n)} - E}{t_{k(n),1}} \right] - T_{22}(n-1) \left[\frac{t_{k(n),k(n-1)}}{t_{k(n),1}} \right] \right] \right) \\
 & -\frac{t_{k(n),k(n-1)}}{t_{k(n),k(n+1)}} \left(T_{21}(n-1) \left[T_{12}(n-1) \left[\frac{(\epsilon_1 - E)(\epsilon_{k(n)} - E)}{t_{1,2}t_{k(n),1}} - \frac{t_{k(n),1}}{t_{1,2}} \right] \right. \right. \\
 & \left. \left. + T_{22}(n-1) \left[\frac{(\epsilon_1 - E)t_{k(n),k(n-1)}}{t_{1,2}t_{k(n),1}} \right] \right] \right. \\
 & \left. + T_{22}(n-1) \left[-T_{12}(n-1) \left[\frac{\epsilon_{k(n)} - E}{t_{k(n),1}} \right] - T_{22}(n-1) \left[\frac{t_{k(n),k(n-1)}}{t_{k(n),1}} \right] \right] \right)
 \end{aligned} \tag{C.13}$$

$$\begin{aligned}
 T(n)_{21} = & T_{11}(n-1) \left[T_{11}(n-1) \left[\frac{(\epsilon_1 - E)(\epsilon_{k(n)} - E)}{t_{1,2}t_{k(n),1}} - \frac{t_{k(n),1}}{t_{1,2}} \right] \right. \\
 & \left. + T_{21}(n-1) \left[\frac{(\epsilon_1 - E)t_{k(n),k(n-1)}}{t_{1,2}t_{k(n),1}} \right] \right] \\
 & + T_{12}(n-1) \left[-T_{11}(n-1) \left[\frac{\epsilon_{k(n)} - E}{t_{k(n),1}} \right] - T_{21}(n-1) \left[\frac{t_{k(n),k(n-1)}}{t_{k(n),1}} \right] \right]
 \end{aligned} \tag{C.14}$$

$$\begin{aligned}
 T_{22}(n) = & T_{11}(n-1) \left[T_{12}(n-1) \left[\frac{(\epsilon_1 - E)(\epsilon_{k(n)} - E)}{t_{1,2}t_{k(n),1}} - \frac{t_{k(n),1}}{t_{1,2}} \right] \right. \\
 & \left. + T_{22}(n-1) \left[\frac{(\epsilon_1 - E)t_{k(n),k(n-1)}}{t_{1,2}t_{k(n),1}} \right] \right] \\
 & + T_{12}(n-1) \left[-T_{12}(n-1) \left[\frac{\epsilon_{k(n)} - E}{t_{k(n),1}} \right] - T_{22}(n-1) \left[\frac{t_{k(n),k(n-1)}}{t_{k(n),1}} \right] \right]
 \end{aligned} \tag{C.15}$$

Con esto tenemos renormalizada nuestra matriz de transferencia.

Apéndice D

Renormalizacion, IPR

Para encontrar el *IPR* de la cadena de generación n debemos primero calcular el *IPR* de las primeras dos generaciones.

$$IPR(1) = \frac{|\alpha_1|^4 + |\alpha_2|^4}{(|\alpha_1|^2 + |\alpha_2|^2)^2} \quad (D.1)$$

$$IPR(2) = \frac{|\alpha_1|^4 + |\alpha_2|^4 + |\alpha_3|^4 + |\alpha_4|^4 + |\alpha_5|^4}{(|\alpha_1|^2 + |\alpha_2|^2 + |\alpha_3|^2 + |\alpha_4|^2 + |\alpha_5|^2)^2} \quad (D.2)$$

De acuerdo a la ecuación de Schrödinger 1.72 se calcula el coeficiente α_{i+1} en términos de α_i y α_{i-1}

$$\alpha_2 = \alpha_1 \frac{t_{12}}{E - \epsilon_2} + \alpha_3 \frac{t_{12}}{E - \epsilon_2} \quad (D.3)$$

$$\alpha_3 = \alpha_2 \frac{t_{12}}{E - \epsilon_1} + \alpha_4 \frac{t_{12}}{E - \epsilon_1} \quad (D.4)$$

$$\alpha_4 = \alpha_3 \frac{t_{12}}{E - \epsilon_2} + \alpha_5 \frac{t_{22}}{E - \epsilon_2}. \quad (D.5)$$

Con las ecuaciones D.3, D.4 y D.5 escribimos α_2 , α_3 , α_4 en términos de α_1 y α_5 .

$$\alpha_2 = \alpha_1 \frac{t_{12}}{E - \epsilon_2 - t_{12}^2(E - \epsilon_2)W_{12}} + \alpha_5 \frac{t_{12}^2 t_{22} W_{12}}{E - \epsilon_2 - t_{12}^2(E - \epsilon_2)W_{12}} \quad (\text{D.6})$$

$$\alpha_3 = \alpha_1 t_{12}^2 X_{12} + \alpha_5 t_{12} t_{22} X_{12} \quad (\text{D.7})$$

$$\alpha_4 = \alpha_1 \frac{t_{12}^3 W_{12}}{E - \epsilon_2 - t_{12}^2(E - \epsilon_2)W_{12}} + \alpha_5 \frac{t_{22}}{E - \epsilon_2 - t_{12}^2(E - \epsilon_2)W_{12}} \quad (\text{D.8})$$

con $W_{12} = \frac{1}{(E - \epsilon_1)(E - \epsilon_2) - t_{12}^2}$ y $X_{12} = \frac{1}{(E - \epsilon_1)(E - \epsilon_2) - 2t_{12}^2}$.

Por lo que expresamos el $IPR(2)$ en términos de α_1 y α_5

$$IPR(2) = \frac{|\alpha_1|^4 + |\alpha_1 A_2 + \alpha_5 B_2|^4 + |\alpha_1 A_3 + \alpha_5 B_3|^4 + |\alpha_1 A_4 + \alpha_5 B_4|^4 + |\alpha_5|^4}{(|\alpha_1|^2 + |\alpha_1 A_2 + \alpha_5 B_2|^2 + |\alpha_1 A_3 + \alpha_5 B_3|^2 + |\alpha_1 A_4 + \alpha_5 B_4|^2 + |\alpha_5|^2)^2} \quad (\text{D.9})$$

con A_i, B_i de acuerdo a D.6, D.7, D.8. Expandiendo las potencias de los módulos agrupando términos.

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^5 |\alpha_i|^4 &= \Omega_1(2)|\alpha_1|^4 + \Omega_2(2)|\alpha_5|^4 + \Omega_3(2)(\alpha_1 \bar{\alpha}_5)^2 + \Omega_4(2)(\alpha_5 \bar{\alpha}_1)^2 \\ &+ \Omega_5(2)|\alpha_1|^2(\alpha_1 \bar{\alpha}_5) + \Omega_6(2)|\alpha_1|^2(\alpha_5 \bar{\alpha}_1) + \Omega_7(2)|\alpha_1|^2|\alpha_5|^2 \\ &+ \Omega_8(2)|\alpha_5|^2(\alpha_1 \bar{\alpha}_5) + \Omega_9(2)|\alpha_5|^2(\alpha_5 \bar{\alpha}_1) \end{aligned} \quad (\text{D.10})$$

$$\sum_{i=1}^5 |\alpha_i|^2 = \omega_1(2)|\alpha_1|^2 + \omega_2(2)|\alpha_5|^2 + \omega_3(2)\alpha_1 \bar{\alpha}_5 + \omega_4(2)\alpha_5 \bar{\alpha}_1 \quad (\text{D.11})$$

con

$$\Omega_1(2) = 1 + |A_2|^4 + |A_3|^4 + |A_4|^4 \quad (\text{D.12})$$

$$\Omega_2(2) = 1 + |B_2|^4 + |B_3|^4 + |B_4|^4 \quad (\text{D.13})$$

$$\Omega_3(2) = (A_2\overline{B_2})^2 + (A_3\overline{B_3})^2 + (A_4\overline{B_4})^2 \quad (\text{D.14})$$

$$\Omega_4(2) = (B_2\overline{A_2})^2 + (B_3\overline{A_3})^2 + (B_4\overline{A_4})^2 \quad (\text{D.15})$$

$$\Omega_5(2) = 2|A_2|^2 A_2\overline{B_2} + 2|A_3|^2 A_3\overline{B_3} + 2|A_4|^2 A_4\overline{B_4} \quad (\text{D.16})$$

$$\Omega_6(2) = 2|A_2|^2 B_2\overline{A_2} + 2|A_3|^2 B_3\overline{A_3} + 2|A_4|^2 B_4\overline{A_4} \quad (\text{D.17})$$

$$\Omega_7(2) = 4|A_2|^2 |B_2|^2 + 4|A_3|^2 |B_3|^2 + 4|A_4|^2 |B_4|^2 \quad (\text{D.18})$$

$$\Omega_8(2) = 2|B_2|^2 A_2\overline{B_2} + 2|B_3|^2 A_3\overline{B_3} + 2|B_4|^2 A_4\overline{B_4} \quad (\text{D.19})$$

$$\Omega_9(2) = 2|B_2|^2 B_2\overline{A_2} + 2|B_3|^2 B_3\overline{A_3} + 2|B_4|^2 B_4\overline{A_4} \quad (\text{D.20})$$

$$\omega_1(2) = 1 + |A_2|^2 + |A_3|^2 + |A_4|^2 \quad (\text{D.21})$$

$$\omega_2(2) = 1 + |B_2|^2 + |B_3|^2 + |B_4|^2 \quad (\text{D.22})$$

$$\omega_3(2) = A_2\overline{B_2} + A_3\overline{B_3} + A_4\overline{B_4} \quad (\text{D.23})$$

$$\omega_4(2) = B_2\overline{A_2} + B_3\overline{A_3} + B_4\overline{A_4} \quad (\text{D.24})$$

Sean G_n y F_n tales que

$$G_n(x, y) = \omega_1(n)|x|^2 + \omega_2(n)|y|^2 + \omega_3(n)x\overline{y} + \omega_4(n)y\overline{x} \quad (\text{D.25})$$

$$\begin{aligned} F_n(x, y) = & \Omega_1(n)|x|^4 + \Omega_2(n)|y|^4 + \Omega_3(n)(x\overline{y})^2 + \Omega_4(n)(y\overline{x})^2 \\ & + \Omega_5(n)|x|^2(x\overline{y}) + \Omega_6(n)|x|^2(y\overline{x}) + \Omega_7(n)|x|^2|y|^2 + \Omega_8(n)|y|^2(x\overline{y}) \\ & + \Omega_9(n)|y|^2(y\overline{x}) \end{aligned} \quad (\text{D.26})$$

con lo que $IPR(n)$ queda de la siguiente forma

$$IPR(n) = \frac{F_{n-1}(\alpha_1, \alpha_{3*2^{n-2}-1}) + F_{n-1}(\alpha_{3*2^{n-2}}, \alpha_{3*2^{n-1}-2}) + |\alpha_{3*2^{n-1}-1}|^4}{(G_{n-1}(\alpha_1, \alpha_{3*2^{n-2}-1}) + G_{n-1}(\alpha_{3*2^{n-2}}, \alpha_{3*2^{n-1}-2}) + |\alpha_{3*2^{n-1}-1}|^2)^2}, \quad (D.27)$$

lo que buscamos es expresar ahora a $\alpha_{3*2^{n-2}-1}$, $\alpha_{3*2^{n-2}}$ y $\alpha_{3*2^{n-1}-2}$ en términos de α_1 y $|\alpha_{3*2^{n-1}-1}|^4$ para poder escribirlo como

$$IPR(n) = \frac{F_n(\alpha_1, \alpha_{3*2^{n-1}-1})}{(G_n(\alpha_1, \alpha_{3*2^{n-1}-1}))^2} \quad (D.28)$$

Por lo que tenemos que buscar las expresiones para $\Omega_i(n)$ ($\omega_i(n)$) en función de $\Omega_j(n-1)$ ($\omega_j(n)$). Partiendo de esta idea

$$-\alpha_{3*2^{n-2}-2}t_{k(n),k(n-1)} + (E - \epsilon_{k(n)})\alpha_{3*2^{n-2}-1} - \alpha_{3*2^{n-2}}t_{k(n),k(1)} = 0 \quad (D.29)$$

$$\alpha_{3*2^{n-2}-2} = A(n-1)\alpha_1 + B(n-1)\alpha_{3*2^{n-2}-1} \quad (D.30)$$

$$-\alpha_{3*2^{n-2}-1}t_{k(n),k(1)} + (E - \epsilon_1)\alpha_{3*2^{n-2}} - \alpha_{3*2^{n-2}+1}t_{1,2} = 0 \quad (D.31)$$

$$\alpha_{3*2^{n-2}+1} = A_C(n-1)\alpha_{3*2^{n-2}} + B_C(n-1)\alpha_{3*2^{n-1}-2} \quad (D.32)$$

$$-\alpha_{3*2^{n-1}-3}t_{k(n),k(n-1)} + (E - \epsilon_{k(n)})\alpha_{3*2^{n-1}-2} - \alpha_{3*2^{n-1}-1}t_{k(n),k(n+1)} = 0 \quad (D.33)$$

$$\alpha_{3*2^{n-1}-3} = A(n-1)\alpha_{3*2^{n-2}} + B(n-1)\alpha_{3*2^{n-1}-2} \quad (D.34)$$

reduciendo el número de ecuaciones

$$-A(n-1)t_{k(n),k(n-1)}\alpha_1 + X_B\alpha_{3*2^{n-2}-1} - t_{k(n),k(1)}\alpha_{3*2^{n-2}} = 0 \quad (D.35)$$

$$-t_{k(n),k(1)}\alpha_{3*2^{n-2}-1} + X_{AC}\alpha_{3*2^{n-2}} - B_C(n-1)t_{1,2}\alpha_{3*2^{n-1}-2} = 0 \quad (D.36)$$

$$-A(n-1)t_{k(n),k(n-1)}\alpha_{3*2^{n-2}} + X_B\alpha_{3*2^{n-1}-2} - t_{k(n),k(n+1)}\alpha_{3*2^{n-1}-1} = 0 \quad (D.37)$$

$$X_B = E - \epsilon_{k(n)} - B(n-1)t_{k(n),k(n-1)} \quad (\text{D.38})$$

$$X_{AC} = E - \epsilon_1 - A_C(n-1)t_{1,2} \quad (\text{D.39})$$

Despejando $\alpha_{3*2^{n-2}-1}$ en términos de α_1 y $\alpha_{3*2^{n-1}-1}$

$$\alpha_{3*2^{n-1}-2} = \frac{A(n-1)t_{k(n),k(n-1)}}{X_B} \alpha_{3*2^{n-2}} + \frac{t_{k(n),k(n+1)}}{X_B} \alpha_{3*2^{n-1}-1} \quad (\text{D.40})$$

$$\alpha_{3*2^{n-2}} = X_B W_{AB} t_{k(n),k(1)} \alpha_{3*2^{n-2}-1} + W_{AB} B_C(n-1) t_{1,2} t_{k(n),k(n+1)} \alpha_{3*2^{n-1}-1} \quad (\text{D.41})$$

$$\begin{aligned} \alpha_{3*2^{n-2}-1} &= \frac{A(n-1)t_{k(n),k(n-1)}}{X_B - W_{AB} X_B t_{k(n),k(1)}^2} \alpha_1 \\ &+ \frac{W_{AB} B_C(n-1) t_{1,2} t_{k(n),k(1)} t_{k(n),k(n+1)}}{X_B - W_{AB} X_B t_{k(n),k(1)}^2} \alpha_{3*2^{n-1}-1} \end{aligned} \quad (\text{D.42})$$

$$W_{AB} = \frac{1}{X_B X_{AC} - A(n-1) B_C(n-1) t_{1,2} t_{k(n),k(n-1)}} \quad (\text{D.43})$$

Despejando $\alpha_{3*2^{n-2}}$ en términos de α_1 y $\alpha_{3*2^{n-1}-1}$

$$\alpha_{3*2^{n-2}-1} = \frac{A(n-1)t_{k(n),k(n-1)}}{X_B} \alpha_1 + \frac{t_{k(n),k(1)}}{X_B} \alpha_{3*2^{n-2}} \quad (\text{D.44})$$

$$\alpha_{3*2^{n-1}-2} = \frac{A(n-1)t_{k(n),k(n-1)}}{X_B} \alpha_{3*2^{n-2}} + \frac{t_{k(n),k(n+1)}}{X_B} \alpha_{3*2^{n-1}-1} \quad (\text{D.45})$$

$$\begin{aligned} \alpha_{3*2^{n-2}} &= A(n-1) t_{k(n),k(1)} t_{k(n),k(n-1)} W_X \alpha_1 \\ &+ B_C(n-1) t_{1,2} t_{k(n),k(n+1)} W_X \alpha_{3*2^{n-1}-1} \end{aligned} \quad (\text{D.46})$$

$$W_X = \frac{1}{X_{AC}X_B - t_{k(n),k(1)}^2 - A(n-1)B_C(n-1)t_{1,2}t_{k(n),k(n-1)}} \quad (D.47)$$

Despejando $\alpha_{3*2^{n-1}-2}$ en términos de α_1 y $\alpha_{3*2^{n-1}-1}$

$$\alpha_{3*2^{n-2}-1} = \frac{A(n-1)t_{k(n),k(n-1)}}{X_B}\alpha_1 + \frac{t_{k(n),k(1)}}{X_B}\alpha_{3*2^{n-2}} \quad (D.48)$$

$$\alpha_{3*2^{n-2}} = A(n-1)t_{k(n),k(1)}t_{k(n),k(n-1)}W\alpha_1 + X_B B_C(n-1)t_{1,2}W\alpha_{3*2^{n-1}-2} \quad (D.49)$$

$$\alpha_{3*2^{n-1}-2} = A(n-1)^2 t_{k(n),k(1)} t_{k(n),k(n-1)}^2 W W_B \alpha_1 + t_{k(n),k(n+1)} W_B \alpha_{3*2^{n-1}-1} \quad (D.50)$$

$$W = \frac{1}{X_{AC}X_B - t_{k(n),k(1)}^2} \quad (D.51)$$

$$W_B = \frac{1}{X_B - A(n-1)B_C(n-1)t_{1,2}t_{k(n),k(n-1)}X_B W} \quad (D.52)$$

Y con ello también encontramos $A(n)$ y $B(n)$

$$A(n) = A(n-1)^2 t_{k(n),k(1)} t_{k(n),k(n-1)}^2 W W_B \quad (D.53)$$

$$B(n) = t_{k(n),k(n+1)} W_B \quad (D.54)$$

Para encontrar $A_c(n)$ y $B_c(n)$

$$\alpha_2 = A_C(n-1)\alpha_1 + B_C(n-1)\alpha_{3*2^{n-2}-1} \quad (D.55)$$

$$\begin{aligned} \alpha_2 = & [A_C(n-1) + \frac{A(n-1)B_C(n-1)t_{k(n),k(n-1)}}{X_B - W_{AB}X_B t_{k(n),k(1)}^2}] \alpha_1 \\ & + \frac{W_{AB}B_C(n-1)^2 t_{1,2} t_{k(n),k(1)} t_{k(n),k(n+1)}}{X_B - W_{AB}X_B t_{k(n),k(1)}^2} \alpha_{3*2^{n-1}-1} \end{aligned} \quad (D.56)$$

$$A_C(n) = A_C(n-1) + \frac{A(n-1)B_C(n-1)t_{k(n),k(n-1)}}{X_B - W_{AB}X_B t_{k(n),k(1)}^2} \quad (\text{D.57})$$

$$B_c(n) = \frac{W_{AB}B_C(n-1)^2 t_{1,2} t_{k(n),k(1)} t_{k(n),k(n+1)}}{X_B - W_{AB}X_B t_{k(n),k(1)}^2} \quad (\text{D.58})$$

Si el *IPR* es

$$\begin{aligned} IPR(n) = & \\ & \frac{F_{n-1}(\alpha_1, \Gamma_{L1}\alpha_1 + \Gamma_{L2}\alpha_{3*2^{n-1-1}}) + F_{n-1}(\Gamma_{C1}\alpha_1 + \Gamma_{C2}\alpha_{3*2^{n-1-1}}, \Gamma_{R1}\alpha_1 + \Gamma_{R2}\alpha_{3*2^{n-1-1}}) + |\alpha_{3*2^{n-1-1}}|^4}{(G_{n-1}(\alpha_1, \Gamma_{L1}\alpha_1 + \Gamma_{L2}\alpha_{3*2^{n-1-1}}) + G_{n-1}(\Gamma_{C1}\alpha_1 + \Gamma_{C2}\alpha_{3*2^{n-1-1}}, \Gamma_{R1}\alpha_1 + \Gamma_{R2}\alpha_{3*2^{n-1-1}}) + |\alpha_{3*2^{n-1-1}}|^2)^2} \end{aligned} \quad (\text{D.59})$$

desarrollamos las potencias los módulos y reagrupamos

$$\begin{aligned} & F_{n-1}(\alpha_1, (\Gamma_{L1}\alpha_1 + \Gamma_{L2}\alpha_{3*2^{n-1-1}})) = \\ & \Omega_1(n-1)|\alpha_1|^4 + \Omega_2(n-1)|(\Gamma_{L1}\alpha_1 + \Gamma_{L2}\alpha_{3*2^{n-1-1}})|^4 \\ & \quad + \Omega_3(n-1)(\alpha_1 \overline{(\Gamma_{L1}\alpha_1 + \Gamma_{L2}\alpha_{3*2^{n-1-1}})})^2 \\ & \quad + \Omega_4(n-1)((\Gamma_{L1}\alpha_1 + \Gamma_{L2}\alpha_{3*2^{n-1-1}})\overline{\alpha_1})^2 \\ & \quad + \Omega_5(n-1)|\alpha_1|^2(\alpha_1 \overline{(\Gamma_{L1}\alpha_1 + \Gamma_{L2}\alpha_{3*2^{n-1-1}})}) \\ & \quad + \Omega_6(n-1)|\alpha_1|^2((\Gamma_{L1}\alpha_1 + \Gamma_{L2}\alpha_{3*2^{n-1-1}})\overline{\alpha_1}) \\ & \quad + \Omega_7(n-1)|\alpha_1|^2|(\Gamma_{L1}\alpha_1 + \Gamma_{L2}\alpha_{3*2^{n-1-1}})|^2 \\ & + \Omega_8(n-1)|(\Gamma_{L1}\alpha_1 + \Gamma_{L2}\alpha_{3*2^{n-1-1}})|^2(\alpha_1 \overline{(\Gamma_{L1}\alpha_1 + \Gamma_{L2}\alpha_{3*2^{n-1-1}})}) + \\ & \quad \Omega_9(n-1)|(\Gamma_{L1}\alpha_1 + \Gamma_{L2}\alpha_{3*2^{n-1-1}})|^2((\Gamma_{L1}\alpha_1 + \Gamma_{L2}\alpha_{3*2^{n-1-1}})\overline{\alpha_1}) \end{aligned} \quad (\text{D.60})$$

$$\begin{aligned}
 F_{n-1}(\alpha_1, (\Gamma_{L1}\alpha_1 + \Gamma_{L2}\alpha_{3*2^{n-1-1}})) = & \\
 & \left[\Omega_1(n-1) + \Omega_2(n-1)|\Gamma_{L1}|^4 + \Omega_3(n-1)\overline{\Gamma_{L1}}^2 + \Omega_4(n-1)\Gamma_{L1}^2 \right. \\
 & \quad \left. + \Omega_5(n-1)\overline{\Gamma_{L1}} + \Omega_6(n-1)\Gamma_{L1} + \Omega_7(n-1)|\Gamma_{L1}|^2 \right. \\
 & \quad \left. + \Omega_8(n-1)|\Gamma_{L1}|^2\overline{\Gamma_{L1}} + \Omega_9(n-1)|\Gamma_{L1}|^2\Gamma_{L1} \right] |\alpha_1|^4 + \left[\Omega_2(n-1)|\Gamma_{L2}|^4 \right] |\alpha_{3*2^{n-1-1}}|^4 \\
 & + \left[\Omega_2(n-1)(\Gamma_{L1}\overline{\Gamma_{L2}})^2 + \Omega_3(n-1)\overline{\Gamma_{L2}}^2 + \Omega_8(n-1)\Gamma_{L1}\overline{\Gamma_{L2}}^2 \right] (\alpha_1\overline{\alpha_{3*2^{n-1-1}}})^2 \\
 & + \left[\Omega_2(n-1)(\Gamma_{L2}\overline{\Gamma_{L1}})^2 + \Omega_4(n-1)\Gamma_{L2}^2 + \Omega_9(n-1)\overline{\Gamma_{L1}}\Gamma_{L2}^2 \right] (\alpha_{3*2^{n-1-1}}\overline{\alpha_1})^2 \\
 + & \left[2\Omega_2(n-1)|\Gamma_{L1}|^2\Gamma_{L1}\overline{\Gamma_{L2}} + 2\Omega_3(n-1)\overline{\Gamma_{L1}}\overline{\Gamma_{L2}} + \Omega_5(n-1)\overline{\Gamma_{L2}} + \Omega_7(n-1)\Gamma_{L1}\overline{\Gamma_{L2}} \right. \\
 & \quad \left. + 2\Omega_8(n-1)|\Gamma_{L1}|^2\overline{\Gamma_{L2}} + \Omega_9(n-1)\Gamma_{L1}^2\overline{\Gamma_{L2}} \right] |\alpha_1|^2\alpha_1\overline{\alpha_{3*2^{n-1-1}}} \\
 + & \left[2\Omega_2(n-1)|\Gamma_{L1}|^2\Gamma_{L2}\overline{\Gamma_{L1}} + 2\Omega_4(n-1)\Gamma_{L1}\Gamma_{L2} + \Omega_6(n-1)\Gamma_{L2} + \Omega_7(n-1)\Gamma_{L2}\overline{\Gamma_{L1}} \right. \\
 & \quad \left. + \Omega_8(n-1)\overline{\Gamma_{L1}}^2\Gamma_{L2} + 2\Omega_9(n-1)|\Gamma_{L1}|^2\Gamma_{L2} \right] |\alpha_1|^2\alpha_{3*2^{n-1-1}}\overline{\alpha_1} \\
 & + \left[4\Omega_2(n-1)|\Gamma_{L1}|^2|\Gamma_{L2}|^2 + \Omega_7(n-1)|\Gamma_{L2}|^2 + 2\Omega_8(n-1)|\Gamma_{L2}|^2\overline{\Gamma_{L1}} \right. \\
 & \quad \left. + 2\Omega_9(n-1)|\Gamma_{L2}|^2\Gamma_{L1} \right] |\alpha_1|^2|\alpha_{3*2^{n-1-1}}|^2 \\
 + & \left[2\Omega_2(n-1)|\Gamma_{L2}|^2\Gamma_{L1}\overline{\Gamma_{L2}} + \Omega_8(n-1)|\Gamma_{L2}|^2\overline{\Gamma_{L2}} \right] |\alpha_{3*2^{n-1-1}}|^2\alpha_1\overline{\alpha_{3*2^{n-1-1}}} + \\
 & \left[2\Omega_2(n-1)|\Gamma_{L2}|^2\Gamma_{L2}\overline{\Gamma_{L1}} + \Omega_9(n-1)|\Gamma_{L2}|^2\Gamma_{L2} \right] |\alpha_{3*2^{n-1-1}}|^2\alpha_{3*2^{n-1-1}}\overline{\alpha_1}
 \end{aligned}
 \tag{D.61}$$

$$\begin{aligned}
 & F_{n-1}(\Gamma_{C1}\alpha_1 + \Gamma_{C2}\alpha_{3*2^{n-1-1}}, \Gamma_{R1}\alpha_1 + \Gamma_{R2}\alpha_{3*2^{n-1-1}}) = \\
 & \Omega_1(n-1)|(\Gamma_{C1}\alpha_1 + \Gamma_{C2}\alpha_{3*2^{n-1-1}})|^4 + \Omega_2(n-1)|(\Gamma_{R1}\alpha_1 + \Gamma_{R2}\alpha_{3*2^{n-1-1}})|^4 \\
 & + \Omega_3(n-1)((\Gamma_{C1}\alpha_1 + \Gamma_{C2}\alpha_{3*2^{n-1-1}})\overline{(\Gamma_{R1}\alpha_1 + \Gamma_{R2}\alpha_{3*2^{n-1-1}})})^2 \\
 & + \Omega_4(n-1)((\Gamma_{R1}\alpha_1 + \Gamma_{R2}\alpha_{3*2^{n-1-1}})\overline{(\Gamma_{C1}\alpha_1 + \Gamma_{C2}\alpha_{3*2^{n-1-1}})})^2 \\
 & + \Omega_5(n-1)|(\Gamma_{C1}\alpha_1 + \Gamma_{C2}\alpha_{3*2^{n-1-1}})|^2((\Gamma_{C1}\alpha_1 + \Gamma_{C2}\alpha_{3*2^{n-1-1}})\overline{(\Gamma_{R1}\alpha_1 + \Gamma_{R2}\alpha_{3*2^{n-1-1}})}) \\
 & + \Omega_6(n-1)|(\Gamma_{C1}\alpha_1 + \Gamma_{C2}\alpha_{3*2^{n-1-1}})f|^2((\Gamma_{R1}\alpha_1 + \Gamma_{R2}\alpha_{3*2^{n-1-1}})\overline{(\Gamma_{C1}\alpha_1 + \Gamma_{C2}\alpha_{3*2^{n-1-1}})}) \\
 & + \Omega_7(n-1)|(\Gamma_{C1}\alpha_1 + \Gamma_{C2}\alpha_{3*2^{n-1-1}})|^2|(\Gamma_{R1}\alpha_1 + \Gamma_{R2}\alpha_{3*2^{n-1-1}})|^2 \\
 & + \Omega_8(n-1)|(\Gamma_{R1}\alpha_1 + \Gamma_{R2}\alpha_{3*2^{n-1-1}})|^2((\Gamma_{C1}\alpha_1 \\
 & + \Gamma_{C2}\alpha_{3*2^{n-1-1}})\overline{(\Gamma_{R1}\alpha_1 + \Gamma_{R2}\alpha_{3*2^{n-1-1}})}) + \Omega_9(n-1)|(\Gamma_{R1}\alpha_1 + \Gamma_{R2}\alpha_{3*2^{n-1-1}})|^2((\Gamma_{R1}\alpha_1 \\
 & + \Gamma_{R2}\alpha_{3*2^{n-1-1}})\overline{(\Gamma_{C1}\alpha_1 + \Gamma_{C2}\alpha_{3*2^{n-1-1}})}) = \\
 & \hspace{15em} (D.62)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 & F_{n-1}(\Gamma_{C1}\alpha_1 + \Gamma_{C2}\alpha_{3*2^{n-1}}, \Gamma_{R1}\alpha_1 + \Gamma_{R2}\alpha_{3*2^{n-1}}) = \\
 & \left[\Omega_1(n-1)|\Gamma_{C1}|^4 + \Omega_2(n-1)|\Gamma_{R1}|^4 + \Omega_3(n-1)\Gamma_{C1}^2\overline{\Gamma_{R1}^2} + \Omega_4(n-1)\Gamma_{R1}^2\overline{\Gamma_{C1}^2} \right. \\
 & \quad + \Omega_5(n-1)|\Gamma_{C1}|^2\Gamma_{C1}\overline{\Gamma_{R1}} + \Omega_6(n-1)|\Gamma_{C1}|^2\Gamma_{R1}\overline{\Gamma_{C1}} + \Omega_7(n-1)|\Gamma_{C1}|^2|\Gamma_{R1}|^2 \\
 & \quad \left. + \Omega_8(n-1)|\Gamma_{R1}|^2\Gamma_{C1}\overline{\Gamma_{R1}} + \Omega_9(n-1)|\Gamma_{R1}|^2\Gamma_{R1}\overline{\Gamma_{C1}} \right] |\alpha_1|^4 \\
 & + \left[\Omega_1(n-1)|\Gamma_{C2}|^4 + \Omega_2(n-1)|\Gamma_{R2}|^4 + \Omega_3(n-1)\Gamma_{C2}^2\overline{\Gamma_{R2}^2} + \Omega_4(n-1)\Gamma_{R2}^2\overline{\Gamma_{C2}^2} \right. \\
 & \quad + \Omega_5(n-1)|\Gamma_{C2}|^2\Gamma_{C2}\overline{\Gamma_{R2}} + \Omega_6(n-1)|\Gamma_{C2}|^2\Gamma_{R2}\overline{\Gamma_{C2}} + \Omega_7(n-1)|\Gamma_{C2}|^2|\Gamma_{R2}|^2 \\
 & \quad \left. + \Omega_8(n-1)|\Gamma_{R2}|^2\Gamma_{C2}\overline{\Gamma_{R2}} + \Omega_9(n-1)|\Gamma_{R2}|^2\Gamma_{R2}\overline{\Gamma_{C2}} \right] |\alpha_{3*2^{n-1}}|^4 \\
 & + \left[\Omega_1(n-1)\Gamma_{C1}^2\overline{\Gamma_{C2}^2} + \Omega_2(n-1)\Gamma_{R1}^2\overline{\Gamma_{R2}^2} + \Omega_3(n-1)\Gamma_{C1}^2\overline{\Gamma_{R2}^2} + \Omega_4(n-1)\Gamma_{R1}^2\overline{\Gamma_{C2}^2} \right. \\
 & \quad + \Omega_5(n-1)\Gamma_{C1}^2\overline{\Gamma_{C2}\Gamma_{R2}} + \Omega_6(n-1)\overline{\Gamma_{C2}^2}\Gamma_{C1}\Gamma_{R1} + \Omega_7(n-1)\Gamma_{C1}\Gamma_{R1}\overline{\Gamma_{C2}\Gamma_{R2}} \\
 & \quad \left. + \Omega_8(n-1)\overline{\Gamma_{R2}^2}\Gamma_{C1}\Gamma_{R1} + \Omega_9(n-1)\Gamma_{R1}^2\overline{\Gamma_{R2}\Gamma_{C2}} \right] (\alpha_1\alpha_{3*2^{n-1}})^2 \\
 & + \left[\Omega_1(n-1)\Gamma_{C2}^2\overline{\Gamma_{C1}^2} + \Omega_2(n-1)\Gamma_{R2}^2\overline{\Gamma_{R1}^2} + \Omega_3(n-1)\Gamma_{C2}^2\overline{\Gamma_{R1}^2} + \Omega_4(n-1)\Gamma_{R2}^2\overline{\Gamma_{C1}^2} \right. \\
 & \quad + \Omega_5(n-1)\Gamma_{C2}^2\overline{\Gamma_{C1}\Gamma_{R1}} + \Omega_6(n-1)\Gamma_{C2}\Gamma_{R2}\overline{\Gamma_{C1}^2} + \Omega_7(n-1)\Gamma_{C2}\Gamma_{R2}\overline{\Gamma_{C1}\Gamma_{R1}} \\
 & \quad \left. + \Omega_8(n-1)\overline{\Gamma_{R1}^2}\Gamma_{C2}\Gamma_{R2} + \Omega_9(n-1)\Gamma_{R2}^2\overline{\Gamma_{R1}\Gamma_{C1}} \right] (\alpha_{3*2^{n-1}}\overline{\alpha_1})^2 \\
 & + \left[2\Omega_1(n-1)|\Gamma_{C1}|^2\Gamma_{C1}\overline{\Gamma_{C2}} + 2\Omega_2(n-1)|\Gamma_{R1}|^2\Gamma_{R1}\overline{\Gamma_{R2}} + 2\Omega_3(n-1)\Gamma_{C1}^2\overline{\Gamma_{R1}\Gamma_{R2}} \right. \\
 & \quad + 2\Omega_4(n-1)\Gamma_{R1}^2\overline{\Gamma_{C1}\Gamma_{C2}} + \Omega_5(n-1)(|\Gamma_{C1}|^2\Gamma_{C1}\overline{\Gamma_{R2}} + \Gamma_{C1}^2\overline{\Gamma_{R1}\Gamma_{C2}}) \\
 & \quad + 2\Omega_6(n-1)|\Gamma_{C1}|^2\Gamma_{R1}\overline{\Gamma_{C2}} \\
 & \quad + \Omega_7(n-1)(|\Gamma_{C1}|^2\Gamma_{R2}\overline{\Gamma_{R1}} + |\Gamma_{R1}|^2\Gamma_{C2}\overline{\Gamma_{C1}}) + 2\Omega_8(n-1)|\Gamma_{R1}|^2\Gamma_{C1}\overline{\Gamma_{R2}} \\
 & \quad \left. + \Omega_9(n-1)(|\Gamma_{R1}|^2\Gamma_{R1}\overline{\Gamma_{C2}} + \Gamma_{R1}^2\overline{\Gamma_{C1}\Gamma_{R2}}) \right] |\alpha_1|^2\alpha_1\overline{\alpha_{3*2^{n-1}}}
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 & + \left[2\Omega_1(n-1)|\Gamma_{C1}|^2\Gamma_{C2}\overline{\Gamma_{C1}} + 2\Omega_2(n-1)|\Gamma_{R1}|^2\Gamma_{R2}\overline{\Gamma_{R1}} + 2\Omega_3(n-1)\Gamma_{C1}\Gamma_{C2}\overline{\Gamma_{R1}}^2 \right. \\
 & \quad + 2\Omega_4(n-1)\Gamma_{R1}\Gamma_{R2}\overline{\Gamma_{C1}}^2 + 2\Omega_5(n-1)|\Gamma_{C1}|^2\Gamma_{C2}\overline{\Gamma_{R1}} \\
 & \quad \quad + \Omega_6(n-1)(|\Gamma_{C1}|^2\Gamma_{R2}\overline{\Gamma_{C1}} + \overline{\Gamma_{C1}}^2\Gamma_{R1}\Gamma_{C2}) \\
 & + \Omega_7(n-1)(|\Gamma_{C1}|^2\Gamma_{R1}\overline{\Gamma_{R2}} + |\Gamma_{R1}|^2\Gamma_{C1}\overline{\Gamma_{C2}}) + \Omega_8(n-1)(|\Gamma_{R1}|^2\Gamma_{C2}\overline{\Gamma_{R1}} + \overline{\Gamma_{R1}}^2\Gamma_{R2}\Gamma_{C1}) \\
 & \quad \quad \quad \left. + 2\Omega_9(n-1)|\Gamma_{R1}|^2\Gamma_{R2}\overline{\Gamma_{C1}} \right] |\alpha_1|^2 \alpha_{3*2^{n-1-1}} \overline{\alpha_1} \\
 & + \left[4\Omega_1(n-1)|\Gamma_{C1}|^2|\Gamma_{C2}|^2 + 4\Omega_2(n-1)|\Gamma_{R1}|^2|\Gamma_{R2}|^2 + 4\Omega_3(n-1)\Gamma_{C1}\Gamma_{C2}\overline{\Gamma_{R1}\Gamma_{R2}} \right. \\
 & \quad + 4\Omega_4(n-1)\Gamma_{R1}\Gamma_{R2}\overline{\Gamma_{C1}\Gamma_{C2}} + 2\Omega_5(n-1)(|\Gamma_{C1}|^2\Gamma_{C2}\overline{\Gamma_{R2}} + |\Gamma_{C2}|^2\Gamma_{C1}\overline{\Gamma_{R1}}) \\
 & \quad \quad + 2\Omega_6(n-1)(|\Gamma_{C1}|^2\Gamma_{R2}\overline{\Gamma_{C2}} + |\Gamma_{C2}|^2\Gamma_{R1}\overline{\Gamma_{C1}}) \\
 & \quad \quad + \Omega_7(|\Gamma_{C1}|^2|\Gamma_{R2}|^2 + |\Gamma_{R1}|^2|\Gamma_{C2}|^2 + \Gamma_{C1}\Gamma_{R2}\overline{\Gamma_{C2}\Gamma_{R1}} + \Gamma_{R1}\Gamma_{C2}\overline{\Gamma_{R2}\Gamma_{C1}}) \\
 & \quad \quad + 2\Omega_8(n-1)(|\Gamma_{R1}|^2\Gamma_{C2}\overline{\Gamma_{R2}} + |\Gamma_{R2}|^2\Gamma_{C1}\overline{\Gamma_{R1}}) \\
 & \quad \quad \quad \left. + 2\Omega_9(n-1)(|\Gamma_{R1}|^2\Gamma_{R2}\overline{\Gamma_{C2}} + |\Gamma_{R2}|^2\Gamma_{R1}\overline{\Gamma_{C1}}) \right] |\alpha_1|^2 |\alpha_{3*2^{n-1-1}}|^2 + \\
 & \left[2\Omega_1(n-1)|\Gamma_{C2}|^2\Gamma_{C1}\overline{\Gamma_{C2}} + 2\Omega_2(n-1)|\Gamma_{R2}|^2\Gamma_{R1}\overline{\Gamma_{R2}} + 2\Omega_3(n-1)\overline{\Gamma_{R2}}^2\Gamma_{C1}\Gamma_{C2} \right. \\
 & \quad + 2\Omega_4(n-1)\overline{\Gamma_{C2}}^2\Gamma_{R1}\Gamma_{R2} + 2\Omega_5(n-1)|\Gamma_{C2}|^2\Gamma_{C1}\overline{\Gamma_{R2}} \\
 & \quad \quad + \Omega_6(n-1)(|\Gamma_{C2}|^2\Gamma_{R1}\overline{\Gamma_{C2}} + \overline{\Gamma_{C2}}^2\Gamma_{C1}\Gamma_{R2}) \\
 & + \Omega_7(n-1)(|\Gamma_{C2}|^2\Gamma_{R1}\overline{\Gamma_{R2}} + |\Gamma_{R2}|^2\Gamma_{C1}\overline{\Gamma_{C2}}) + \Omega_8(n-1)(|\Gamma_{R2}|^2\Gamma_{C1}\overline{\Gamma_{R2}} + \overline{\Gamma_{R2}}^2\Gamma_{R1}\Gamma_{C2}) \\
 & \quad \quad \quad \left. + 2\Omega_9(n-1)|\Gamma_{R2}|^2\Gamma_{R1}\overline{\Gamma_{C2}} \right] |\alpha_{3*2^{n-1-1}}|^2 \alpha_1 \overline{\alpha_{3*2^{n-1-1}}} + \\
 & \left[2\Omega_1(n-1)|\Gamma_{C2}|^2\Gamma_{C2}\overline{\Gamma_{C1}} + 2\Omega_2(n-1)|\Gamma_{R2}|^2\Gamma_{R2}\overline{\Gamma_{R1}} + 2\Omega_3(n-1)\Gamma_{C2}^2\overline{\Gamma_{R1}\Gamma_{R2}} \right. \\
 & \quad + 2\Omega_4(n-1)\Gamma_{R2}^2\overline{\Gamma_{C1}\Gamma_{C2}} + \Omega_5(n-1)(|\Gamma_{C2}|^2\Gamma_{C2}\overline{\Gamma_{R1}} + \Gamma_{C2}^2\overline{\Gamma_{C1}\Gamma_{R2}}) \\
 & + 2\Omega_6(n-1)|\Gamma_{C2}|^2\Gamma_{R2}\overline{\Gamma_{C1}} + \Omega_7(n-1)(|\Gamma_{C2}|^2\Gamma_{R2}\overline{\Gamma_{R1}} + |\Gamma_{R2}|^2\Gamma_{C2}\overline{\Gamma_{C1}}) \\
 & \quad \quad \quad + 2\Omega_8(n-1)|\Gamma_{R2}|^2\Gamma_{C2}\overline{\Gamma_{R1}} \\
 & \quad \quad \quad \left. + \Omega_9(n-1)(|\Gamma_{R2}|^2\Gamma_{R2}\overline{\Gamma_{C1}} + \Gamma_{R2}^2\overline{\Gamma_{C2}\Gamma_{R1}}) \right] |\alpha_1|^2 \alpha_{3*2^{n-1-1}} \overline{\alpha_1}
 \end{aligned}
 \tag{D.63}$$

$$\begin{aligned}
 & G_{n-1}(\alpha_1, (\Gamma_{L1}\alpha_1 + \Gamma_{L2}\alpha_{3*2^{n-1}-1})) = \\
 & \omega_1(n-1)|\alpha_1|^2 + \omega_2(n-1)|(\Gamma_{L1}\alpha_1 + \Gamma_{L2}\alpha_{3*2^{n-1}-1})|^2 \\
 & \quad + \omega_3(n-1)\alpha_1\overline{(\Gamma_{L1}\alpha_1 + \Gamma_{L2}\alpha_{3*2^{n-1}-1})} \\
 & \quad + \omega_4(n-1)(\Gamma_{L1}\alpha_1 + \Gamma_{L2}\alpha_{3*2^{n-1}-1})\overline{\alpha_1} = \\
 & \left[\omega_1(n-1) + \omega_2(n-1)|\Gamma_{L1}|^2 + \omega_3(n-1)\overline{\Gamma_{L1}} + \omega_4(n-1)\Gamma_{L1} \right] |\alpha_1|^2 + \\
 & \quad \left[\omega_2(n-1)|\Gamma_{L2}|^2 \right] |\alpha_{3*2^{n-1}-1}|^2 + \\
 & \quad \left[\omega_2(n-1)\Gamma_{L1}\overline{\Gamma_{L2}} + \omega_3(n-1)\overline{\Gamma_{L2}} \right] \alpha_1\overline{\alpha_{3*2^{n-1}-1}} + \\
 & \quad \left[\omega_2(n-1)\Gamma_{L2}\overline{\Gamma_{L1}} + \omega_4(n-1)\Gamma_{L2} \right] \alpha_{3*2^{n-1}-1}\overline{\alpha_1}
 \end{aligned} \tag{D.64}$$

$$\begin{aligned}
 & G_{n-1}((\Gamma_{C1}\alpha_1 + \Gamma_{C2}\alpha_{3*2^{n-1}-1}), (\Gamma_{R1}\alpha_1 + \Gamma_{R2}\alpha_{3*2^{n-1}-1})) = \\
 & \omega_1(n-1)|(\Gamma_{C1}\alpha_1 + \Gamma_{C2}\alpha_{3*2^{n-1}-1})|^2 + \omega_2(n-1)|(\Gamma_{R1}\alpha_1 + \Gamma_{R2}\alpha_{3*2^{n-1}-1})|^2 + \\
 & \quad \omega_3(n-1)(\Gamma_{C1}\alpha_1 + \Gamma_{C2}\alpha_{3*2^{n-1}-1})\overline{(\Gamma_{R1}\alpha_1 + \Gamma_{R2}\alpha_{3*2^{n-1}-1})} + \\
 & \quad \omega_4(n-1)(\Gamma_{R1}\alpha_1 + \Gamma_{R2}\alpha_{3*2^{n-1}-1})\overline{(\Gamma_{C1}\alpha_1 + \Gamma_{C2}\alpha_{3*2^{n-1}-1})} = \\
 & \quad \left[\omega_1(n-1)|\Gamma_{C1}|^2 + \omega_2(n-1)|\Gamma_{R1}|^2 + \omega_3(n-1)\Gamma_{C1}\overline{\Gamma_{R1}} \right. \\
 & \quad \quad \left. + \omega_4(n-1)\Gamma_{R1}\overline{\Gamma_{C1}} \right] |\alpha_1|^2 + \\
 & \quad \left[\omega_1(n-1)|\Gamma_{C2}|^2 + \omega_2(n-1)|\Gamma_{R2}|^2 \right. \\
 & \quad \quad \left. + \omega_3(n-1)\Gamma_{C2}\overline{\Gamma_{R2}} + \omega_4(n-1)\Gamma_{R2}\overline{\Gamma_{C2}} \right] |\alpha_{3*2^{n-1}-1}|^2 + \\
 & \quad \left[\omega_1(n-1)\Gamma_{C1}\overline{\Gamma_{C2}} + \omega_2(n-1)\Gamma_{R1}\overline{\Gamma_{R2}} + \omega_3(n-1)\Gamma_{C1}\overline{\Gamma_{R2}} \right. \\
 & \quad \quad \left. + \omega_4(n-1)\Gamma_{R1}\overline{\Gamma_{C2}} \right] \alpha_1\overline{\alpha_{3*2^{n-1}-1}} + \\
 & \quad \left[\omega_1(n-1)\Gamma_{C2}\overline{\Gamma_{C1}} + \omega_2(n-1)\Gamma_{R2}\overline{\Gamma_{R1}} \right. \\
 & \quad \quad \left. + \omega_3(n-1)\Gamma_{C2}\overline{\Gamma_{R1}} + \omega_4(n-1)\Gamma_{R2}\overline{\Gamma_{C1}} \right] \alpha_{3*2^{n-1}-1}\overline{\alpha_1}
 \end{aligned} \tag{D.65}$$

Así

$$\begin{aligned}
 \Omega_1(n) = & \\
 & \Omega_1(n-1) + \Omega_2(n-1)|\Gamma_{L1}|^4 + \Omega_3(n-1)\overline{\Gamma_{L1}}^2 + \Omega_4(n-1)\Gamma_{L1}^2 + \Omega_5(n-1)\overline{\Gamma_{L1}} \\
 & + \Omega_6(n-1)\Gamma_{L1} + \Omega_7(n-1)|\Gamma_{L1}|^2 + \Omega_8(n-1)|\Gamma_{L1}|^2\overline{\Gamma_{L1}} + \Omega_9(n-1)|\Gamma_{L1}|^2\Gamma_{L1} \\
 & + \Omega_1(n-1)|\Gamma_{C1}|^4 + \Omega_2(n-1)|\Gamma_{R1}|^4 \\
 & + \Omega_3(n-1)\Gamma_{C1}^2\overline{\Gamma_{R1}}^2 + \Omega_4(n-1)\Gamma_{R1}^2\overline{\Gamma_{C1}}^2 + \Omega_5(n-1)|\Gamma_{C1}|^2\Gamma_{C1}\overline{\Gamma_{R1}} \\
 & + \Omega_6(n-1)|\Gamma_{C1}|^2\Gamma_{R1}\overline{\Gamma_{C1}} + \Omega_7(n-1)|\Gamma_{C1}|^2|\Gamma_{R1}|^2 \\
 & + \Omega_8(n-1)|\Gamma_{R1}|^2\Gamma_{C1}\overline{\Gamma_{R1}} + \Omega_9(n-1)|\Gamma_{R1}|^2\Gamma_{R1}\overline{\Gamma_{C1}}
 \end{aligned} \tag{D.66}$$

$$\begin{aligned}
 \Omega_2(n) = & \\
 & 1 + \Omega_2(n-1)|\Gamma_{L2}|^4 + \Omega_1(n-1)|\Gamma_{C2}|^4 + \Omega_2(n-1)|\Gamma_{R2}|^4 + \Omega_3(n-1)\Gamma_{C2}^2\overline{\Gamma_{R2}}^2 \\
 & + \Omega_4(n-1)\Gamma_{R2}^2\overline{\Gamma_{C2}}^2 + \Omega_5(n-1)|\Gamma_{C2}|^2\Gamma_{C2}\overline{\Gamma_{R2}} \\
 & + \Omega_6(n-1)|\Gamma_{C2}|^2\Gamma_{R2}\overline{\Gamma_{C2}} + \Omega_7(n-1)|\Gamma_{C2}|^2|\Gamma_{R2}|^2 \\
 & + \Omega_8(n-1)|\Gamma_{R2}|^2\Gamma_{C2}\overline{\Gamma_{R2}} + \Omega_8(n-1)|\Gamma_{R2}|^2\Gamma_{R2}\overline{\Gamma_{C2}}
 \end{aligned} \tag{D.67}$$

$$\begin{aligned}
 \Omega_3(n) = & \\
 & \Omega_2(n-1)(\Gamma_{L1}\overline{\Gamma_{L2}})^2 + \Omega_3(n-1)\overline{\Gamma_{L2}}^2 \\
 & + \Omega_8(n-1)\Gamma_{L1}\overline{\Gamma_{L2}}^2 + \Omega_1(n-1)\Gamma_{C1}^2\overline{\Gamma_{C2}}^2 \\
 & + \Omega_2(n-1)\Gamma_{R1}^2\overline{\Gamma_{R2}}^2 + \Omega_3(n-1)\Gamma_{C1}^2\overline{\Gamma_{R2}}^2 \\
 & + \Omega_4(n-1)\Gamma_{R1}^2\overline{\Gamma_{C2}}^2 + \Omega_5(n-1)\Gamma_{C1}^2\overline{\Gamma_{C2}}\overline{\Gamma_{R2}} \\
 & + \Omega_6(n-1)\overline{\Gamma_{C2}}^2\Gamma_{C1}\Gamma_{R1} + \Omega_7(n-1)\Gamma_{C1}\Gamma_{R1}\overline{\Gamma_{C2}}\overline{\Gamma_{R2}} \\
 & + \Omega_8(n-1)\overline{\Gamma_{R2}}^2\Gamma_{C1}\Gamma_{R1} + \Omega_9(n-1)\Gamma_{R1}^2\overline{\Gamma_{R2}}\overline{\Gamma_{C2}}
 \end{aligned} \tag{D.68}$$

$$\begin{aligned}
 \Omega_4(n) = & \\
 & \Omega_2(n-1)(\Gamma_{L2}\overline{\Gamma_{L1}})^2 + \Omega_4(n-1)\Gamma_{L2}^2 \\
 & + \Omega_9(n-1)\overline{\Gamma_{L1}}\Gamma_{L2}^2 + \Omega_1(n-1)\Gamma_{C2}^2\overline{\Gamma_{C1}}^2 \\
 & + \Omega_2(n-1)\Gamma_{R2}^2\overline{\Gamma_{R1}}^2 + \Omega_3(n-1)\Gamma_{C2}^2\overline{\Gamma_{R1}}^2 \\
 & + \Omega_4(n-1)\Gamma_{R2}^2\overline{\Gamma_{C1}}^2 + \Omega_5(n-1)\Gamma_{C2}^2\overline{\Gamma_{C1}}\overline{\Gamma_{R1}} \\
 & + \Omega_6(n-1)\Gamma_{C2}\Gamma_{R2}\overline{\Gamma_{C1}}^2 + \Omega_7(n-1)\Gamma_{C2}\Gamma_{R2}\overline{\Gamma_{C1}}\overline{\Gamma_{R1}} \\
 & + \Omega_8(n-1)\overline{\Gamma_{R1}}^2\Gamma_{C2}\Gamma_{R2} + \Omega_9(n-1)\Gamma_{R2}^2\overline{\Gamma_{R1}}\overline{\Gamma_{C1}}
 \end{aligned} \tag{D.69}$$

$$\begin{aligned}
 \Omega_5(n) = & \\
 & 2\Omega_2(n-1)|\Gamma_{L1}|^2\Gamma_{L1}\overline{\Gamma_{L2}} + 2\Omega_3(n-1)\overline{\Gamma_{L1}}\overline{\Gamma_{L2}} + \Omega_5(n-1)\overline{\Gamma_{L2}} \\
 & + \Omega_7(n-1)\Gamma_{L1}\overline{\Gamma_{L2}} \\
 & + 2\Omega_8(n-1)|\Gamma_{L1}|^2\overline{\Gamma_{L2}} + \Omega_9(n-1)\Gamma_{L1}^2\overline{\Gamma_{L2}} \\
 & + 2\Omega_1(n-1)|\Gamma_{C1}|^2\Gamma_{C1}\overline{\Gamma_{C2}} + 2\Omega_2(n-1)|\Gamma_{R1}|^2\Gamma_{R1}\overline{\Gamma_{R2}} \\
 & + 2\Omega_3(n-1)\Gamma_{C1}^2\overline{\Gamma_{R1}}\overline{\Gamma_{R2}} + 2\Omega_4(n-1)\Gamma_{R1}^2\overline{\Gamma_{C1}}\overline{\Gamma_{C2}} \\
 & + \Omega_5(n-1)(|\Gamma_{C1}|^2\Gamma_{C1}\overline{\Gamma_{R2}} + \Gamma_{C1}^2\overline{\Gamma_{R1}}\overline{\Gamma_{C2}}) \\
 & + 2\Omega_6(n-1)|\Gamma_{C1}|^2\Gamma_{R1}\overline{\Gamma_{C2}} + \Omega_7(n-1)(|\Gamma_{C1}|^2\Gamma_{R1}\overline{\Gamma_{R2}} + |\Gamma_{R1}|^2\Gamma_{C1}\overline{\Gamma_{C2}}) \\
 & + 2\Omega_8(n-1)|\Gamma_{R1}|^2\Gamma_{C1}\overline{\Gamma_{R2}} + \Omega_9(n-1)(|\Gamma_{R1}|^2\Gamma_{R1}\overline{\Gamma_{C2}} + \Gamma_{R1}^2\overline{\Gamma_{C1}}\overline{\Gamma_{R2}})
 \end{aligned} \tag{D.70}$$

$$\begin{aligned}
 \Omega_6(n) = & \\
 & 2\Omega_2(n-1)|\Gamma_{L1}|^2\Gamma_{L2}\overline{\Gamma_{L1}} + 2\Omega_4(n-1)\Gamma_{L1}\Gamma_{L2} \\
 & \quad + \Omega_6(n-1)\Gamma_{L2} + \Omega_7(n-1)\Gamma_{L2}\overline{\Gamma_{L1}} \\
 & \quad + \Omega_8(n-1)\overline{\Gamma_{L1}}^2\Gamma_{L2} + 2\Omega_9(n-1)|\Gamma_{L1}|^2\Gamma_{L2} \\
 & + 2\Omega_1(n-1)|\Gamma_{C1}|^2\Gamma_{C2}\overline{\Gamma_{C1}} + 2\Omega_2(n-1)|\Gamma_{R1}|^2\Gamma_{R2}\overline{\Gamma_{R1}} \\
 & \quad + 2\Omega_3(n-1)\Gamma_{C1}\Gamma_{C2}\overline{\Gamma_{R1}}^2 + 2\Omega_4(n-1)\Gamma_{R1}\Gamma_{R2}\overline{\Gamma_{C1}}^2 \\
 & + 2\Omega_5(n-1)|\Gamma_{C1}|^2\Gamma_{C2}\overline{\Gamma_{R1}} + \Omega_6(n-1)(|\Gamma_{C1}|^2\Gamma_{R2}\overline{\Gamma_{C1}} + \overline{\Gamma_{C1}}^2\Gamma_{R1}\Gamma_{C2}) \\
 & \quad + \Omega_7(n-1)(|\Gamma_{C1}|^2\Gamma_{R1}\overline{\Gamma_{R2}} + |\Gamma_{R1}|^2\Gamma_{C1}\overline{\Gamma_{C2}}) \\
 & \quad + \Omega_8(n-1)(|\Gamma_{R1}|^2\Gamma_{C2}\overline{\Gamma_{R1}} + \overline{\Gamma_{R1}}^2\Gamma_{R2}\Gamma_{C1}) \\
 & \quad + 2\Omega_9(n-1)|\Gamma_{R1}|^2\Gamma_{R2}\overline{\Gamma_{C1}}
 \end{aligned} \tag{D.71}$$

$$\begin{aligned}
 \Omega_7(n) = & \\
 & 4\Omega_2(n-1)|\Gamma_{L1}|^2|\Gamma_{L2}|^2 + \Omega_7(n-1)|\Gamma_{L2}|^2 \\
 & \quad + 2\Omega_8(n-1)|\Gamma_{L2}|^2\overline{\Gamma_{L1}} + 2\Omega_9(n-1)|\Gamma_{L2}|^2\Gamma_{L1} \\
 & \quad + 4\Omega_1(n-1)|\Gamma_{C1}|^2|\Gamma_{C2}|^2 + 4\Omega_2(n-1)|\Gamma_{R1}|^2|\Gamma_{R2}|^2 \\
 & + 4\Omega_3(n-1)\Gamma_{C1}\Gamma_{C2}\overline{\Gamma_{R1}\Gamma_{R2}} + 4\Omega_4(n-1)\Gamma_{R1}\Gamma_{R2}\overline{\Gamma_{C1}\Gamma_{C2}} \\
 & \quad + 2\Omega_5(n-1)(|\Gamma_{C1}|^2\Gamma_{C2}\overline{\Gamma_{R2}} + |\Gamma_{C2}|^2\Gamma_{C1}\overline{\Gamma_{R1}}) \\
 & \quad + 2\Omega_6(n-1)(|\Gamma_{C1}|^2\Gamma_{R2}\overline{\Gamma_{C2}} + |\Gamma_{C2}|^2\Gamma_{R1}\overline{\Gamma_{C1}}) \\
 & + \Omega_7(|\Gamma_{C1}|^2|\Gamma_{R2}|^2 + |\Gamma_{R1}|^2|\Gamma_{C2}|^2 + \Gamma_{C1}\Gamma_{R2}\overline{\Gamma_{C2}\Gamma_{R1}} + \Gamma_{R1}\Gamma_{C2}\overline{\Gamma_{R2}\Gamma_{C1}}) \\
 & \quad + 2\Omega_8(n-1)(|\Gamma_{R1}|^2\Gamma_{C2}\overline{\Gamma_{R2}} + |\Gamma_{R2}|^2\Gamma_{C1}\overline{\Gamma_{R1}}) \\
 & \quad + 2\Omega_9(n-1)(|\Gamma_{R1}|^2\Gamma_{R2}\overline{\Gamma_{C2}} + |\Gamma_{R2}|^2\Gamma_{R1}\overline{\Gamma_{C1}})
 \end{aligned} \tag{D.72}$$

$$\begin{aligned}
 \Omega_8(n) = & \\
 & 2\Omega_2(n-1)|\Gamma_{L2}|^2\Gamma_{L1}\overline{\Gamma_{L2}} \\
 & +\Omega_8(n-1)|\Gamma_{L2}|^2\overline{\Gamma_{L2}} \\
 & +2\Omega_1(n-1)|\Gamma_{C2}|^2\Gamma_{C1}\overline{\Gamma_{C2}} + 2\Omega_2(n-1)|\Gamma_{R2}|^2\Gamma_{R1}\overline{\Gamma_{R2}} \\
 & +2\Omega_3(n-1)\overline{\Gamma_{R2}}^2\Gamma_{C1}\Gamma_{C2} + 2\Omega_4(n-1)\overline{\Gamma_{C2}}^2\Gamma_{R1}\Gamma_{R2} + 2\Omega_5(n-1)|\Gamma_{C2}|^2\Gamma_{C1}\overline{\Gamma_{R2}} \\
 & +\Omega_6(n-1)(|\Gamma_{C2}|^2\Gamma_{R1}\overline{\Gamma_{C2}} + \overline{\Gamma_{C2}}^2\Gamma_{C1}\Gamma_{R2}) \\
 & +\Omega_7(n-1)(|\Gamma_{C2}|^2\Gamma_{R1}\overline{\Gamma_{R2}} + |\Gamma_{R2}|^2\Gamma_{C1}\overline{\Gamma_{C2}}) \\
 & +\Omega_8(n-1)(|\Gamma_{R2}|^2\Gamma_{C1}\overline{\Gamma_{R2}} + \overline{\Gamma_{R2}}^2\Gamma_{R1}\Gamma_{C2}) \\
 & +2\Omega_9(n-1)|\Gamma_{R2}|^2\Gamma_{R1}\overline{\Gamma_{C2}}
 \end{aligned} \tag{D.73}$$

$$\begin{aligned}
 \Omega_9(n) = & \\
 & 2\Omega_2(n-1)|\Gamma_{L2}|^2\Gamma_{L2}\overline{\Gamma_{L1}} + \Omega_9(n-1)|\Gamma_{L2}|^2\Gamma_{L2} \\
 & +2\Omega_1(n-1)|\Gamma_{C2}|^2\Gamma_{C2}\overline{\Gamma_{C1}} + 2\Omega_2(n-1)|\Gamma_{R2}|^2\Gamma_{R2}\overline{\Gamma_{R1}} \\
 & +2\Omega_3(n-1)\Gamma_{C2}^2\overline{\Gamma_{R1}\Gamma_{R2}} + 2\Omega_4(n-1)\Gamma_{R2}^2\overline{\Gamma_{C1}\Gamma_{C2}} \\
 & +\Omega_5(n-1)(|\Gamma_{C2}|^2\Gamma_{C2}\overline{\Gamma_{R1}} + \Gamma_{C2}^2\overline{\Gamma_{C1}\Gamma_{R2}}) \\
 & +2\Omega_6(n-1)|\Gamma_{C2}|^2\Gamma_{R2}\overline{\Gamma_{C1}} + \Omega_7(n-1)(|\Gamma_{C2}|^2\Gamma_{R2}\overline{\Gamma_{R1}} + |\Gamma_{R2}|^2\Gamma_{C2}\overline{\Gamma_{C1}}) \\
 & +2\Omega_8(n-1)|\Gamma_{R2}|^2\Gamma_{C2}\overline{\Gamma_{R1}} + \Omega_9(n-1)(|\Gamma_{R2}|^2\Gamma_{R2}\overline{\Gamma_{C1}} + \Gamma_{R2}^2\overline{\Gamma_{C2}\Gamma_{R1}})
 \end{aligned} \tag{D.74}$$

$$\begin{aligned}
 \omega_1(n) = & \\
 & \omega_1(n-1) + \omega_2(n-1)|\Gamma_{L1}|^2 + \omega_3(n-1)\overline{\Gamma_{L1}} \\
 & +\omega_4(n-1)\Gamma_{L1} + \omega_1(n-1)|\Gamma_{C1}|^2 + \omega_2(n-1)|\Gamma_{R1}|^2 \\
 & +\omega_3(n-1)\Gamma_{C1}\overline{\Gamma_{R1}} + \omega_4(n-1)\Gamma_{R1}\overline{\Gamma_{C1}}
 \end{aligned} \tag{D.75}$$

$$\begin{aligned}
 \omega_2(n) = & \\
 1 + \omega_2(n-1)|\Gamma_{L2}|^2 + \omega_1(n-1)|\Gamma_{C2}|^2 & \\
 + \omega_2(n-1)|\Gamma_{R2}|^2 + \omega_3(n-1)\Gamma_{C2}\overline{\Gamma_{R2}} & \\
 + \omega_4(n-1)\Gamma_{R2}\overline{\Gamma_{C2}} &
 \end{aligned} \tag{D.76}$$

$$\begin{aligned}
 \omega_3(n) = & \\
 \omega_2(n-1)\Gamma_{L1}\overline{\Gamma_{L2}} + \omega_3(n-1)\overline{\Gamma_{L2}} & \\
 + \omega_1(n-1)\Gamma_{C1}\overline{\Gamma_{C2}} + \omega_2(n-1)\Gamma_{R1}\overline{\Gamma_{R2}} & \\
 + \omega_3(n-1)\Gamma_{C1}\overline{\Gamma_{R2}} + \omega_4(n-1)\Gamma_{R1}\overline{\Gamma_{C2}} &
 \end{aligned} \tag{D.77}$$

$$\begin{aligned}
 \omega_4(n) = & \\
 \omega_2(n-1)\Gamma_{L2}\overline{\Gamma_{L1}} + \omega_4(n-1)\Gamma_{L2} & \\
 + \omega_1(n-1)\Gamma_{C2}\overline{\Gamma_{C1}} + \omega_2(n-1)\Gamma_{R2}\overline{\Gamma_{R1}} & \\
 + \omega_3(n-1)\Gamma_{C2}\overline{\Gamma_{R1}} + \omega_4(n-1)\Gamma_{R2}\overline{\Gamma_{C1}} &
 \end{aligned} \tag{D.78}$$

Con esto obtenemos el *IPR* de la cadena de generación n de acuerdo a la ecuación D.28 .

Bibliografía

- [Abrahams et al., 1979] Abrahams, E., Anderson, P., Licciardello, D., and Ramakrishnan, T. (1979). Scaling theory of localization: Absence of quantum diffusion in two dimensions. *Physical Review Letters*, 42(10):673.
- [Anderson, 1958] Anderson, P. W. (1958). Absence of diffusion in certain random lattices. *Physical review*, 109(5):1492.
- [Aragón, 1993] Aragón, J. (1993). La estructura atómica de los cuasicristales. *Revista Mexicana de Física*, 40(3):339–365.
- [Ashcroft et al., 1976] Ashcroft, N. W., Mermin, N. D., et al. (1976). Solid state physics [by] neil w. ashcroft [and] n. david mermin.
- [Callaway, 2013] Callaway, J. (2013). *Quantum theory of the solid state*. Academic Press.
- [Cohen and Chelikowsky, 2012] Cohen, M. L. and Chelikowsky, J. R. (2012). *Electronic structure and optical properties of semiconductors*, volume 75. Springer Science & Business Media.
- [De La Peña, 2014] De La Peña, L. (2014). *Introducción a la mecánica cuántica*. Fondo de Cultura económica.
- [Dick, 2012] Dick, R. (2012). *Advanced quantum mechanics: materials and photons*. Springer Science & Business Media.
- [Economou, 2006] Economou, E. N. (2006). *Green's functions in quantum physics*, volume 7. Springer Science & Business Media.

- [Fesenko, 2014] Fesenko, V. (2014). Aperiodic birefringent photonic structures based on kolakoski sequence. *Waves in Random and Complex Media*, 24(2):174–190.
- [Fesenko and Tuz, 2016] Fesenko, V. I. and Tuz, V. R. (2016). Dispersion blue-shift in an aperiodic bragg reflection waveguide. *Optics Communications*, 365:225–230.
- [Grundmann, 2010] Grundmann, M. (2010). *Physics of semiconductors*, volume 11. Springer.
- [IUCr, 2017a] IUCr (2017a). Online Dictionary of Crystallography. https://dictionary.iucr.org/Aperiodic_crystal. [Visto el 17-abril-2020].
- [IUCr, 2017b] IUCr (2017b). Online Dictionary of Crystallography. <https://dictionary.iucr.org/Quasicrystal>. [Visto el 17-abril-2020].
- [Kittel et al., 1976] Kittel, C. et al. (1976). *Introduction to solid state physics*, volume 8. Wiley New York.
- [Kolakoski and Üçoluk, 1966] Kolakoski, W. and Üçoluk, N. (1966). 5304. *The American Mathematical Monthly*, 73(6):681–682.
- [Landauer, 1957] Landauer, R. (1957). Spatial variation of currents and fields due to localized scatterers in metallic conduction. *IBM Journal of Research and Development*, 1(3):223–231.
- [Landauer, 1970] Landauer, R. (1970). Electrical resistance of disordered one-dimensional lattices. *Philosophical magazine*, 21(172):863–867.
- [Landauer, 1992] Landauer, R. (1992). Conductance from transmission: common sense points. *Physica Scripta*, 1992(T42):110.
- [Lifshitz, 2000] Lifshitz, R. (2000). The definition of quasicrystals. *arXiv preprint cond-mat/0008152*.
- [Marzari and Vanderbilt, 1997] Marzari, N. and Vanderbilt, D. (1997). Maximally localized generalized wannier functions for composite energy bands. *Physical review B*, 56(20):12847.

- [Peierls, 1996] Peierls, R. E. (1996). *Quantum theory of solids*. Clarendon Press.
- [Razeghi, 2006] Razeghi, M. (2006). *Fundamentals of solid state engineering*. Springer.
- [Sánchez et al., 2016] Sánchez, F., Sánchez, V., and Wang, C. (2016). Renormalization approach to the electronic localization and transport in macroscopic generalized fibonacci lattices. *Journal of Non-Crystalline Solids*, 450:194–208.
- [Sánchez et al., 2018] Sánchez, F., Sánchez, V., and Wang, C. (2018). Ballistic transport in aperiodic labyrinth tiling proven through a new convolution theorem. *The European Physical Journal B*, 91(6):132.
- [Sánchez et al., 2001] Sánchez, V., Pérez, L. A., Oviedo-Roa, R., and Wang, C. (2001). Renormalization approach to the kubo formula in fibonacci systems. *Physical Review B*, 64(17):174205.
- [Sánchez and Wang, 2004] Sánchez, V. and Wang, C. (2004). Application of renormalization and convolution methods to the kubo-greenwood formula in multidimensional fibonacci systems. *Physical Review B*, 70(14):144207.
- [Shechtman et al., 1984] Shechtman, D., Blech, I., Gratias, D., and Cahn, J. W. (1984). Metallic phase with long-range orientational order and no translational symmetry. *Physical review letters*, 53(20):1951.
- [Sing, 2004] Sing, B. (2004). Kolakoski sequences—an example of aperiodic order. *Journal of non-crystalline solids*, 334:100–104.
- [Vaidya et al., 1965] Vaidya, A. M., Simon, H., Garrett, P., Shapiro, H. S., Kolakoski, W., Dapkus, F., Gross, F., Cohen, M. J., Comtet, L., and Feller, E. H. (1965). Advanced problems: 5300-5309. *The American Mathematical Monthly*, 72(6):673–675.
- [Vargas Beltrán, 2013] Vargas Beltrán, J. H. (2013). *Método generalizado de la matriz de transferencia (Mgmt); método de las funciones de Green de superficie (Mfgs)*,

relaciones y aplicaciones en sistemas semiconductores periódicos. PhD thesis, Universidad Nacional de Colombia.

[Ziman, 1972] Ziman, J. M. (1972). *Principles of the Theory of Solids*. Cambridge university press.