



UNIVERSIDAD NACIONAL DE COLOMBIA

**Propiedades Termoeléctricas y
Transporte en Nanoestructuras:**
Aproximación Coulombiana Finita (U -finito) Para
el Modelo de la Impureza de Anderson

TESIS MAESTRÍA EN CIENCIAS-FÍSICA

Propiedades Termoeléctricas y Transporte en Nanoestructuras:

**Aproximación Coulombiana Finita (U -finito)
Para el Modelo de la Impureza de Anderson**

EDWIN RAMOS RODRÍGUEZ
Código: 835411

Tesis presentada como requisito parcial para optar al título de:
Magíster en Ciencias - Física

Director:
Dr. Roberto E. Franco Peñaloza

Universidad Nacional de Colombia
Facultad de Ciencias, Departamento de Física
Grupo de Sistemas Correlacionados
Bogotá D.C., Colombia
2014

Índice general

Índice general	I
Lista de Figuras	III
Agradecimientos	VII
Resumen	VIII
Abstract	1
Introducción	2
Modelo Atómico para la Impureza de Anderson	5
Surgimiento del Efecto Kondo	5
Efecto Kondo en puntos cuánticos	7
Modelo de Anderson para la impureza	9
Aproximación Atómica Para el modelo de Anderson	11
Descripción de la solución atómica	13
Imposición de la Regla de suma de Friedel	16
Propiedades termoeléctricas	17
Ley de Wiedemann-Franz	19
Resultados	20
Transistor de un simple electrón (TSE)	20
Efectos a bajas temperaturas	21
Efectos a altas temperaturas	23
Punto cuántico acoplado lateralmente a un hilo cuántico	29
Punto cuántico acoplado lateralmente a un Nanotubo de carbono <i>zig-zag</i> de pared simple (<i>NTCPS</i>)	33
Cálculo de Funciones de Green para el <i>NTCPS</i>	34
Conclusiones	41

Perspectivas	43
Apéndice A	44
Apéndice B	48
Bibliografía	49

Lista de Figuras

1.	Mínimo de resistividad eléctrica en el Oro (<i>Au</i>) en función de la temperatura.	6
2.	Comportamiento de la resistividad en función de la temperatura (color en línea): (Verde) En algunos metales la resistencia disminuye hasta una temperatura crítica donde ocurre un cambio de fase a estado superconductor. (Azul) En otros metales la resistencia disminuye hasta una resistencia que permanece constante y no se hace cero debido a los defectos de la red. (Roja) En los metales con impurezas magnéticas la resistencia disminuye hasta una temperatura donde los efectos de interacción con la impureza son importantes y aumentan considerablemente la resistencia.	6
3.	Esquema del tunelamiento virtual causado por el efecto Kondo en un punto cuántico. Donde $\Gamma_{L,R}$ son los acoplamientos entre el estado localizado y las bandas de conducción de la izquierda (L) y de la derecha (R) en principio pueden ser matrices, μ_s es el potencial químico de la fuente (“source”) y μ_d es el potencial químico de “drain”, ε_0 es la energía del estado localizado menor que el nivel de energía de Fermi (E_f) y U corresponde a la repulsión Coulombiana que modula la ocupación en el estado localizado. (a.) El estado localizado se encuentra en el nivel de energía ε_0 , y dos electrones con espines diferentes se encuentran en el nivel de Fermi. (b.) La impureza salta al nivel e Fermi debido a la interacción vía hibridización con los electrones de la banda de conducción. (c.) Uno de los electrones de la banda de conducción “cae” al nivel de energía ε_0 . Este fenómeno produce una resonancia en la densidad de estados alrededor del Fermi y otra resonancia en el nivel de energía ε_0 . (d.) Cuando el sistema está en equilibrio los potenciales químicos de las bandas de conducción son iguales. (e) Cuando el sistema tiene diferentes valores en los potenciales químicos se forman resonancias alrededor de estos niveles de energía y el sistema se encuentra fuera del equilibrio. (f.) Punto cuántico litográfico, 1, 2 y 3 representan los sitios donde se mantiene el voltaje de “gate” que controla el número de electrones en el PC. El voltaje “bias” que va de “source” a “drain” controla el paso de electrones en la banda de conducción de este modelo. El voltaje entre 1 y 2 controla el valor de Γ_L y el de 1 y 3 controla el valor Γ_R . El tamaño del PC controla el valor de U	8
4.	Representación esquemática del modelo de la impureza Anderson: Los electrones de conducción se encuentran llenando el nivel de Fermi. Un estado localizado con energía ε_0 por debajo del nivel de Fermi, la energía para un segundo electrón ocupara el nivel de energía $E_0 + U$	10
5.	Diagrama multinivel efectivo para la aproximación atómica	11

6.	Esquema de un punto cuántico PC inmerso en un hilo cuántico HC o Transistor de un solo electrón TSE, (o SET, por sus siglas en ingles, Single Electron Transistor). L y R hacen referencia a los electrodos de izquierda y derecha que forman el hilo cuántico. V es la hibridación del hilo cuántico con el punto cuántico, la cual se asume de igual valor para los electrodos L y R (conductores simétricos e idénticos).	20
7.	Conductancia eléctrica vs Energía del PC (E_{PC}) para un PC inmerso en HC	21
8.	Termopotencia vs Energía del PC (E_{PC}) para un PC inmerso en HC	22
9.	Conductancia térmica κ normalizada por la temperatura ($\frac{\kappa}{T}$) (L_0G_0) en función de la energía E_{PC} para diferentes temperaturas.	23
10.	En (a) se muestra la termopotencia para la misma temperatura con los puntos P_1 , P_2 y P_3 señalados en ambas gráficas. (b) Números de ocupación n_{ocup} : estado vacío n_0 , estados “up” (n_{up}) y “down” (n_{down}) y doble ocupación n_d en función de la energía E_{PC} para $T = \Delta$	24
11.	Termopotencia en función de la energía E_{PC} para valores de temperatura mayores a Δ	25
12.	Conductancia eléctrica en función de la energía E_{PC} para valores de temperatura mayores a Δ	25
13.	Conductancia térmica adimensional ($\frac{\kappa}{T}$) en función de la energía E_{PC} para valores de temperatura mayores a Δ	26
14.	Ley de Wiedemann Franz para el sistema de punto cuántico inmerso	27
15.	Producto entre la figura de mérito y la temperatura en función de la energía E_{PC} del punto cuántico para altas temperaturas.	27
16.	Esquema de un punto cuántico (PC) acoplado lateralmente a un hilo cuántico (HC) modelado como un canal balístico.	29
17.	Termopotencia (S) vs Energía del punto cuántico (E_{PC}) acoplado lateralmente a un PC	29
18.	Conductancia eléctrica por temperatura vs Energía del PC acoplado lateralmente a un HC	30
19.	Ley de Wiedemann Franz (LWF) vs Energía del (PC) acoplado lateralmente a un HC	31
20.	Figura térmica de mérito en función de la energía del punto cuántico (E_{PC}) para diferentes valores de temperatura para el caso acoplado lateralmente al nanohilo. La curva violeta corresponde al número de ocupación en el nanotubo normalizado a la mitad. En este grafico se observa que los valores máximos en ZT se encuentran en los límites de la región Kondo.	32
21.	Esquema del punto cuántico acoplado lateralmente a un nanotubo de carbono de pared simple <i>zig-zag</i> ($NTCPS$). V es la hibridización entre el nanotubo y el punto cuántico.	33
22.	Parámetros de red de una lámina de grafeno con sus respectivos vectores unitarios. Presenta simetría traslacional de dos átomos (círculos blanco y negro).	33
23.	Vectores de la red \vec{c}_1 , \vec{c}_2 y \vec{d} en función de los vectores de la red real \vec{a}	35
24.	Izq: Densidad de estados para un nanotubo de carbono de pared simple metálico (a.) y semiconductor (b.). M_{11} corresponde al espacio entre las dos primeras singularidades de Van Hove simétricas a la energía de Fermi E_F en un nanotubo metálico. S_{11} es la brecha de energía de un nanotubo semiconductor, S_{22} y S_{33} son las distancias de energía entre las siguientes singularidades simétricas a la E_F . Der: Densidad de estados para un nanotubo <i>zig-zag</i> de pared simple con un diámetro $D = 100$ y $n = 3$ con sus respectivas singularidades de Van Hove.	37
25.	Conductancia eléctrica para un PC acoplado lateralmente a un nanotubo de Carbono de pared simple en función de la E_{PC} . G es normalizada al valor $G_0 = \frac{4e^2}{h}$, que corresponde al doble del valor G_0 en el PC acoplado lateralmente a un HC . Esto se debe a la degeneración de los procesos de dispersión presentes en el nanotubo.	38
26.	Conductancia térmica κ multiplicada por $\frac{3e^2}{\pi^2T}$ en función de la energía del PC (E_{PC}).	39

27.	Termopotencia lineal $S\left(\frac{k_B}{e}\right)$ para un PC acoplado lateralmente a un nanotubo de carbono de pared simple en función de la energía del PC (E_{PC})	39
28.	Ley de Wiedemann-Franz W en función de la energía del PC (E_{PC}).	40
29.	Figura térmica de mérito por temperatura (ZT) en función de la energía del PC (E_{PC}).	40

A mis padres, Luis y Margarita.

At each stage entirely new laws, concepts, and generalizations are necessary, requiring inspiration and creativity to just as great a degree as the previous one. P. W. Anderson in "More is different".

AGRADECIMIENTOS

A mi madre Maria Margarita Rodríguez de Ramos quien con su cariño y sabiduría me ha enseñado y formado en carácter para afrontar las diferentes situaciones de mi vida, porque siempre ha estado allí apoyándome con su amor y ternura. A mi padre Luis Felipe Ramos Romero, porque con sus enseñanzas e historias que me contaba cuando caminaba de su mano, sin saberlo me inspiró a tomar este amplio camino de la física. A mis hermanos: William, Leydi y Pilar, por incentivar me a no dejar de lado mis sueños, a pesar de las dificultades en cada momento y en cada circunstancia.

A mi orientador: Roberto Emilio Franco Peñaloza, por brindarme su confianza, dedicación y paciencia durante todos estos años de trabajo, porque siempre me ha dado el apoyo necesario para avanzar en mis estudios.

A los profesores: Jereson Silva Valencia profesor de la Universidad Nacional y Marcos Sergio Figueira de la Universidad Federal Fluminense- Brasil, quienes con sus explicaciones, colaboraciones y aportes han contribuido a la culminación de esta tesis.

A mis amigos por su invaluable apoyo, por estar siempre conmigo principalmente en los peores momentos. Especialmente a Jorge Ignacio Villa, quien me ha acompañado en los momentos de alegría y tristeza, pero más por hacerme saber que siempre puedo contar con él.

A todos, muchas gracias.

Edwin Ramos Rodríguez.

RESUMEN

Se estudia la conductancia eléctrica (G), la conductancia térmica (κ), la termopotencia (S) y la figura térmica de mérito (Z) en tres diferentes nanoestructuras: punto cuántico inmerso en un hilo cuántico, punto cuántico acoplado lateralmente a un hilo cuántico y un punto cuántico acoplado lateralmente a un nanotubo de Carbono metálico de pared simple *zig-zag* ($n = 3$). Se usa el tratamiento de la aproximación atómica para el modelo de la impureza de Anderson con repulsión Coulombiana finita. El punto cuántico está asociado a los estados localizados del modelo, considerando correlación Coulombiana U finita, la banda de conducción en el modelo es asociada al hilo cuántico y al nanotubo de carbono. Los coeficientes de transporte son obtenidos en el régimen lineal con las relaciones de Onsager satisfechas, empleando resultados provenientes del formalismo de Landauer y de la ecuación de transporte de Boltzmann. Las cantidades físicas son calculadas en función de parámetros asociados a cantidades controlables experimentalmente en sistemas reales, temperatura T , energía del punto cuántico E_{PC} (asociado experimentalmente al voltaje de “gate” V_g , en puntos cuánticos litográficos), la repulsión Coulombiana U (asociada al tamaño del punto cuántico en sistemas reales). Para cada caso se discuten las condiciones que optimizan la eficiencia térmica, asociada al producto entre la figura térmica de mérito y la temperatura (ZT), cantidad que indica la posible utilidad del sistema para ser empleado en dispositivos termoeléctricos; estudiamos también la validez de la ley de Wiedemann-Franz y su relación con las condiciones que optimizan ZT para cada caso. Los resultados para bajas temperaturas están en buen acuerdo con trabajos experimentales y teóricos recientes. Los resultados para altas temperaturas, en el caso del punto cuántico inmerso en el hilo cuántico, presentan altos valores en la figura térmica de mérito lo cual puede ser un incentivo para su fabricación experimental.

ABSTRACT

We study the thermoelectric properties as: electrical (G) and thermal (κ) conductances, thermopower (S) and thermal figure of merit (Z) in three different nanostructures, quantum dot immersed in a quantum wire, quantum dot in lateral coupled with quantum wire and a quantum dot laterally coupled to a *zig-zag* Carbon nanotube ($n = 3$). We use the atomic approach treatment for the Anderson impurity model with finite Coulomb repulsion (U -finite). The quantum dot is linked to the localized states in the model, the U -finite correlation is associated with the quantum dot size and the conduction band is the quantum wire and the Carbon nanotube coupled to quantum dot. Transport coefficients are obtained in the linear regime with the Onsager relations satisfied, using the Landauer formalism and results of Boltzmann transport. The physical quantities are calculate in function of parameters associated with controllable experimental amounts in the real systems: temperature T , quantum energy E_{PC} (experimetically associated with the gate voltage V_g of lithographic quantum dots), the size of quantum dot is linked to Coulomb repulsion parameter. In each case, discuss the optimum conditions under which the highest values of thermal figure of merit by temperature (ZT) are obtained in the systems. ZT indicates a high potential for use as a thermal cooling systems or thermopower generators. Further study the validity of the Wiedemann-Franz law in relation with the optimal conditions of ZT in each system. At low temperature results are in good agreement with recent experimental and theoretical works. Results for high temperatures for immersed quantum dot case, have high values in the thermal figure od merit, which can be an incentive for their experimental production.

INTRODUCCIÓN

Los sistemas electrónicos nanoestructurados son regiones de confinamiento de 0, 1 o 2 dimensiones del orden de $10^{-9}m$ (haciendo referencia a su tamaño más que alguna otra propiedad física), donde se confinan portadores en un espacio del orden de la longitud de onda de De Broglie, por lo tanto su movimiento es cuantizado a estas dimensiones de *escala cuántica*.

Estos sistemas vienen siendo estudiados desde hace unas décadas, debido a interesantes propiedades que presentan a esta escala, y que pueden ser muy diferentes a las de materiales en “bulk”. Además, se han potencializado sus aplicaciones en todas sus diferentes formas geométricas de confinamiento, entre las más usuales están las paredes cuánticas, súper redes, nanohilos, puntos cuánticos y nanotubos.

Para la fabricación de estos dispositivos se emplean diversos materiales como semiconductores, metales, dieléctricos, materiales magnéticos, etc., en los cuales los estados de los portadores (electrones, huecos, excitones, etc.) se ven afectados, quedando confinados en las diferentes dimensiones espaciales. Para lograr este confinamiento se usan variadas técnicas como por ejemplo: litografía láser, deposición física de vapor (*PDV*), deposición química de vapor (*CVD*) entre otras [26].

A medida que el estudio de las nanoestructuras avanza, crecen las aplicaciones de estos sistemas en dispositivos que podrían ser comercialmente viables, en este espectro de aplicaciones se encuentran desde pantallas de televisión (diodos emisores de luz orgánicos, *OLEDs*), pasando por dispositivos el procesamiento de la información cuántica (computación cuántica) y la espintrónica [10, 39], hasta aplicaciones en dispositivos termoeléctricos como generadores de termopotencia y refrigeradores térmicos [6, 9, 37, 50–53, 74]. Estos dos últimos son de particular interés para el desarrollo de esta tesis.

La posibilidad de emplear sistemas nanoscópicos como rectificadores térmicos, los cuales pueden mejorar considerablemente la eficiencia de dispositivos macroscópicos a través del control del transporte de energía en una escala microscópica, ha regenerado el interés en los efectos termoeléctricos de sistemas nanoscópicos en los últimos años, tanto teórica [6, 9, 37, 50–53, 74] como experimentalmente [3, 7, 14, 25, 41, 49, 55, 61, 63, 65, 66].

La necesidad de reducir los efectos de decoherencia asociados con la temperatura, para obtener y controlar los denominados estados entrelazados (“entanglement states”), requeridos en la computación cuántica, es una de las motivaciones más fuertes para estudiar la física asociada con sistemas refrigerantes en nanoestructuras. Experimentos recientes reportan la construcción de un rectificador térmico

nanoscópico por Chang *et al.* [7] y la manipulación de procesos de refrigeración en un sistema nanoscópico, por medio del control de efectos de correlación coulombiana [63]. Otro trabajo interesante explora los límites dimensionales de las máquinas térmicas y muestra que, al menos teóricamente, es posible pensar en obtener refrigeradores auto contenidos (que no necesitan fuentes de trabajo externas), que constan de un pequeño número de qbits y/o qtrits [64].

Las nanoestructuras basadas en semiconductores, estudiadas en esta tesis, son realizables experimentalmente [25, 55, 61], y pueden ser descritas a través del modelo de la impureza de Anderson [9, 31]. En esta tesis nos centraremos en el estudio de tres nanoestructuras: Un punto cuántico (*PC*) inmerso en un hilo cuántico (*HC*) (*TSE*), un *PC* acoplado lateralmente a un (*HC*) y un *PC* acoplado lateralmente a un nanotubo *zig-zag* de carbono de pared simple (*NTCPS*). El caso de un punto cuántico inmerso en un hilo cuántico (*TSE*) fue estudiado por el grupo de Goldhaber-Gordon [11] con un completo control experimental sobre los parámetros del modelo (Single electrón transistor - SET). En dicho trabajo ellos miden la conductancia eléctrica del *TSE* y muestran su carácter universal en el régimen Kondo a bajas temperaturas. Hasta ahora sólo algunos trabajos hacen alusión a las propiedades termoeléctricas del *TSE* [55, 65, 66], recientemente un trabajo experimental realizó medidas del gradiente de temperatura en un punto cuántico (*PC*) inmerso en un hilo cuántico (*HC*) donde encuentra que el acoplamiento asimétrico a los electrodos modifica las propiedades termoeléctricas favoreciendo la rectificación térmica [3, 14, 49, 55, 61].

En trabajos realizados por el grupo de sistemas correlacionados de la universidad Nacional de Colombia sede Bogotá (SISCO), se han calculado propiedades termoeléctricas en sistemas nanoestructurados, solucionando el modelo de la impureza de Anderson empleando aproximaciones de campo medio como el X-bosón en el límite de correlación infinita (U-infinito) [18, 19, 50–52]. En ellos se estableció que existen dos escalas de temperatura: una escala a bajas temperaturas asociada con la temperatura Kondo (T_K), la cual domina el comportamiento termoeléctrico del sistema; otra escala ocurre a temperaturas $T \simeq \Delta$ asociada con los procesos de fluctuación de carga, donde $\Delta = \pi V^2 \rho_c(\mu)$ es llamado parámetro de Anderson, $\rho_c(\mu)$ es la densidad de estados evaluada en el potencial químico (μ). En este trabajo se estudia el comportamiento de la figura térmica de mérito (Z) en estos regímenes de temperatura para las diferentes nanoestructuras, de tal forma que en las regiones donde $ZT \geq 1$ se puede considerar que el sistema es un posible candidato para aplicaciones tecnológicas [6, 9, 13, 37, 64].

La figura térmica de mérito es un factor de eficiencia termoeléctrica de los materiales y depende de las propiedades termoeléctricas S (termopotencia), G (conductancia eléctrica) y κ (conductancia eléctrica). En metales ordinarios las conductancias G y κ están relacionados por los mismos procesos de dispersión con una dependencia débil de la energía, esto conlleva a la principal razón por la cual el valor de ZT es pequeño en metales ordinarios. El mejor material termoeléctrico hasta ahora encontrado (a 300K) es el Bi_2Te_3 con un valor cercano a la unidad ($ZT \approx 1$) [24, 58] esto equivale a un tercio de un sistema de refrigeración convencional. Para que un material termoeléctrico pueda competir con la tecnología actual debe tener un $ZT \approx 4$ sin embargo, un pequeño incremento por encima de la unidad ($ZT \geq 1$) puede dar lugar a muchas nuevas aplicaciones de los materiales termoeléctricos. Además se debe tener en cuenta las diferentes ventajas que ofrecen estos materiales termoeléctricos, pues la energía producida es mucho más limpia y fiable que los sistemas de refrigeración usuales (no usan componentes fluorocarbonados). De esta manera encontrar materiales y estructuras con $ZT \geq 1$ es de gran utilidad [45] y beneficio tanto para la industria como para el uso domestico. En el régimen de altas temperaturas se conocen algunos que son usados en generadores de potencia ($PbTe$, $PbTeSe$).

Para encontrar nuevos materiales con $ZT \approx 1$ se han realizado investigaciones por dos caminos: el primero por estructuras cristalinas complejas donde la conductancia térmica se reduce (súper-redes de puntos cuánticos y escuteriditas) [4, 23] y el segundo reduciendo la dimensión de los materiales [38] como es el caso de las nanoestructuras. Estas últimas además de ofrecer posibilidades de controlar el análisis, permiten aumentar la densidad de estados cerca del nivel de Fermi mejorando la termopotencia S y por consiguiente la figura térmica de Merito, entre otras formas de mejorar estas propiedades se propone introducir anisotropías en la superficie de Fermi, incrementando la dispersión de fonones en la frontera de las paredes del pozo cuántico sin aumentar la dispersión electrónica en la interfase e incrementan la movilidad de los portadores de carga cuando las condiciones de confinamiento se satisfacen [45].

En el caso específico del aumento de la densidad de estados en las nanoestructuras se presenta un fenómeno a bajas temperaturas (*efecto Kondo*) que es consecuencia de los efectos de correlación de muchos cuerpos que permite obtener valores altos en G por debajo de la temperatura Kondo, este efecto genera un aumento considerable en la densidad de estados en el nivel de Fermi, por tanto es un candidato propicio para el estudio de las propiedades termoeléctricas a bajas temperaturas.

El efecto Kondo consiste en un apantallamiento de los electrones de conducción sobre las impurezas magnéticas que se encuentran en un metal no magnético. Este fenómeno fue hallado en los años 30' en metales no magnéticos como el Mn con impurezas magnéticas de Fe , cuyo efecto fue explicado satisfactoriamente hasta los años 60's por Jun kondo [35], pero fue olvidado por un tiempo por la difícil tarea de manipular átomos reales. Después de 20 años fue reproducido en experimentos de medida de resistividad en función de la temperatura en puntos cuánticos [11] y otros sistemas mesoscópicos e impulsó gran parte de las técnicas y tratamientos teóricos en el estudio de electrones fuertemente correlacionados como grupo de renormalización numérica GRN (en ingles “Numerical Renormalization Group” NRG), teoría desarrollada por el recientemente desaparecido Kenneth Geddes Wilson [72], Boson esclavo [20], ANC Aproximación no cruzada (NCA : “Noncrossing Approximation”) [57] entre otras. Estas técnicas y tratamientos tienen un gasto computacional considerable y algunos son exactos sólo para el caso de una impureza. En esta tesis trataremos una aproximación computacionalmente ligera que reproduce todas las excitaciones fundamentales del efecto Kondo y además permite obtener resultados satisfactorios comparados con otros modelos que solucionan el modelo de Anderson tanto para el modelo la impureza como para el modelo periódico.

Para el cálculo de estas propiedades usamos la aproximación atómica (AA) para el modelo de la impureza de Anderson con correlación coulombiana finita (U-finito) [43]. Con este método es posible conservar la física a bajas temperaturas dominada por el efecto Kondo, obteniendo también una representación adecuada para la región de altas temperaturas $T \geq \Delta$, describiendo muy bien los deferentes regímenes del PC vacío, valencia intermediaria, región Kondo y doble ocupación. El tratamiento de AA tiene un carácter de muchos cuerpos en contraste con aproximaciones de campo medio los cuales describen el sistema para el límite de U-infinito del modelo de la impureza de Anderson [37, 50–52, 64]. Estos resultados son consistentes cualitativamente con los obtenidos recientemente empleando grupo de renormalización numérico (GRN) [6, 9], y con algunos resultados experimentales reportados [3, 49, 55, 61, 65, 66].

MODELO ATÓMICO PARA LA IMPUREZA DE ANDERSON

El efecto Kondo es una característica bien definida de los sistemas con impurezas magnéticas. Su mejor descripción se encuentra en el modelo de la impureza de Anderson con el cual es posible estudiar las propiedades de transporte en nanoestructuras. En esta parte del trabajo nos concentraremos en explicar el surgimiento del efecto Kondo en metales y en puntos cuánticos con sus primeras aproximaciones realizadas a lo largo de la historia, pasando por el desarrollo del modelo de la impureza de Anderson. Después trataremos la aproximación atómica para el modelo de la impureza de Anderson con correlación Coulombiana finita, la cual representa la estrategia base del desarrollado de este trabajo. También describiremos la inclusión de la regla de suma de Friedel, la deducción de las propiedades termoeléctricas como resultado de la ecuación de transporte de Boltzmann y el formalismo de Landauer así como la ley de Wiedemann Franz, piezas clave para el tratamiento de la aproximación atómica.

Surgimiento del Efecto Kondo

El efecto Kondo, llamado así por Jun Kondo quien desarrollaría un tratamiento parcialmente satisfactorio para describir el comportamiento de este efecto, casi 30 años después de sus primeras observaciones experimentales que datan de los años 30 [12]. El fenómeno de la anomalía en la resistencia eléctrica en el Oro puro (*Au*) en función de la temperatura que presenta un mínimo entre los $5K$ y $10K$ como se muestra en la figura 1 [35].

Durante los siguientes 30 años después de su primera observación, su procedencia permaneció sin resolverse. Era un fenómeno extraño pues se sabía del comportamiento de los metales con la temperatura, que la resistividad disminuye conforme disminuye la temperatura hasta llegar a una resistencia de saturación (causada por los defectos en el metal), sin embargo para algunos metales no magnéticos con impurezas magnéticas, al bajar hasta cierta temperatura (T_K) la resistencia formaba un mínimo de nuevo se incrementa como muestra la figura 1.

Hasta ese momento se sabía que al disminuir la temperatura los efectos de dispersión electrón-fonón disminuían, haciendo que la resistencia disminuyera hasta un valor de resistencia menor y constante debido a los defectos del metal. Experimentos posteriores con *Cu – Mn* en función de la temperatura variando la concentración del metal magnético (*Mn*) (llamado más adelante impureza magnética) en el metal no magnético (*Cu*) evidenciaron que este efecto de mínimo de resistencia, está asociado a la concentración de impurezas magnéticas (figuras 1 y 2). Años después (en 1964), Kondo notó que existía un proceso fundamental y diferente debido a la interacción de los electrones del metal con las

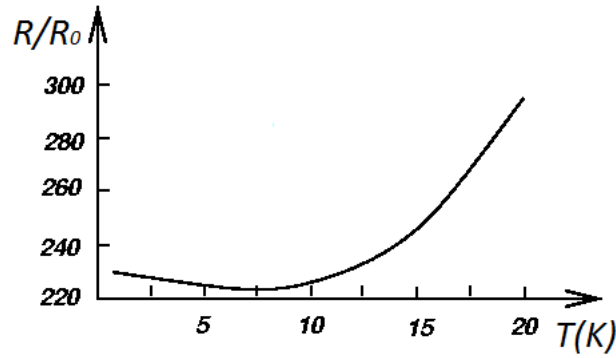


Figura 1: Mínimo de resistividad eléctrica en el Oro (Au) en función de la temperatura.

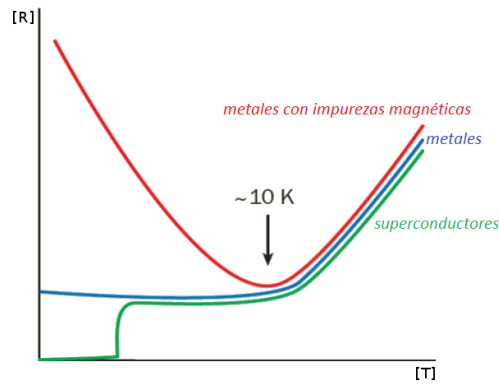


Figura 2: Comportamiento de la resistividad en función de la temperatura (color en línea): (Verde) En algunos metales la resistencia disminuye hasta una temperatura crítica donde ocurre un cambio de fase a estado superconductor. (Azul) En otros metales la resistencia disminuye hasta una resistencia que permanece constante y no se hace cero debido a los defectos de la red. (Roja) En los metales con impurezas magnéticas la resistencia disminuye hasta una temperatura donde los efectos de interacción con la impureza son importantes y aumentan considerablemente la resistencia.

impurezas magnéticas, después de calcular la amplitud de dispersión causada por un espín localizado debido a la interacción de intercambio. Desarrollando el hamiltoniano del modelo $s-d$ (Zener 1951) para diluidos magnéticos usando la aproximación de Born hasta segundo orden, Kondo encontró una dependencia logarítmica de la temperatura en la resistencia. Asumiendo de esta forma una expresión fenomenológica para la resistividad como se describe en la ecuación (1) [36].

$$\rho(T) = c\rho_0 + aT^5 - c\rho_1 \ln(T). \quad (1)$$

donde $c\rho_0$ resume la resistencia propia de la red independiente de la temperatura, también incluye la resistencia resultante de los efectos de redistribución de los electrones de conducción alrededor de la impureza magnética y la distorsión de la red. El segundo término corresponde a la contribución de los fonones y el último término es la contribución a segundo orden de la dispersión del espín con la impureza magnética. En esta expresión c corresponde a la concentración de impurezas magnéticas.

Al derivar la ecuación (1) respecto a la temperatura (T) se encuentra la temperatura a la cual ocurre el mínimo en la resistencia T_{min} (también llamada *temperatura Kondo* T_k),

$$T_{min} = \left(\frac{\rho_1}{5a} \right)^{\frac{1}{5}} c^{\frac{1}{5}} \quad (2)$$

En esta ecuación se observa que la temperatura mínima (T_{min}) depende débilmente de la concentración de impurezas c . Lo que permite afirmar que el mínimo en la resistencia se debe a la presencia de una impureza y no a la interacción de momentos magnéticos localizados de las impurezas.

Sin embargo hasta ahora surgían más dudas, por ejemplo: ¿Por qué ocurre este fenómeno?. ¿Cómo solucionar la divergencia en la resistencia cuando $T = 0$?. Respecto a la primera pregunta la razón se debe a la repulsión electrostática de los orbitales d que no están completamente llenos en metales como el Hierro (Fe) o el Cobalto (Co), estos hacen que sus espines se alineen para reducir su repulsión formando un momento magnético diferente de cero y al sumergirlos en un metal no magnético como el Cobre (Cu), los electrones s más externos de la impureza se disocian con las ondas s de la banda de la red. Respecto a la segunda pregunta, la divergencia se resolvió por cálculos no perturbativos realizados por Nagaoka [48] entre otros autores. De los resultados se obtuvo el siguiente valor para la energía que se gana cuando se forma el estado fundamental de singlete en términos de la temperatura Kondo

$$|\epsilon| = k_B T_K = D e^{\frac{-\epsilon_f}{2|V_{cf}|^2 n_F(\epsilon_F)}}, \quad (3)$$

donde D es el ancho de la banda, ϵ_f es la energía del nivel localizado respecto al nivel de Fermi ϵ_F , $n_F(\epsilon_F)$ es la densidad de estados por celda y por espín al nivel de Fermi y V_{cf} es el elemento de matriz entre los estados de la banda de conducción y la impureza que se supone independiente de \mathbf{k} . Más adelante Mattis [46] demostró que se generaba un estado fundamental no degenerado de tipo singlete cuando el acoplamiento de intercambio era antiferromagnético.

Efecto Kondo en puntos cuánticos

Gracias al desarrollo tecnológico y la capacidad para crear nanoestructuras en el laboratorio se lograron crear nuevos sistemas para estudiar el efecto Kondo, con la ventaja que estos sistemas son fácilmente manipulables, como es el caso de los puntos cuánticos. Un punto cuántico con un espín desapareado fuertemente acoplado a las bandas de conducción puede describir la misma física que la impureza magnética inmersa en un metal [11, 34, 73]. En la figura 3d se representa la densidad de estados justo cuando la energía de Fermi es del valor de los potenciales químicos μ_s y μ_d , mostrando un pico delgado y alto y otro pico más amplio alrededor del nivel de energía ϵ_0 . Cuando los potenciales químicos son diferentes surge un voltaje $eV = \mu_s - \mu_d$ y presentan un pico en la densidad de estados justo sobre cada potencial químico (figura 3e). En la figura 3f se muestra un punto cuántico litográfico inmerso en una banda de conducción definida por un voltaje entre los electrodos “source” y “drain” que controla la energía en la banda de conducción. El confinamiento en el PC se realiza mediante la modulación del voltaje “gate” entre 1-2 y entre 1-3.

El electrón desapareado es una impureza magnética en el estado localizado ϵ_0 , la energía de repulsión de Coulomb desplaza al siguiente electrón que entra al punto al estado inmediatamente superior (U ,

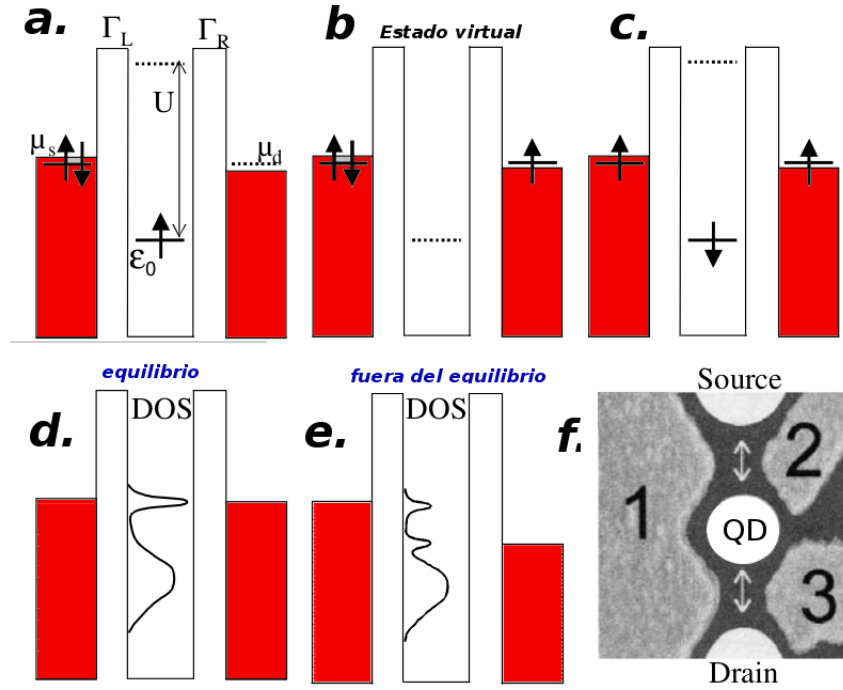


Figura 3: Esquema del tunelamiento virtual causado por el efecto Kondo en un punto cuántico. Donde $\Gamma_{L,R}$ son los acoplamientos entre el estado localizado y las bandas de conducción de la izquierda (L) y de la derecha (R) en principio pueden ser matrices, μ_s es el potencial químico de la fuente (“source”) y μ_d es el potencial químico de “drain”, ε_0 es la energía del estado localizado menor que el nivel de energía de Fermi (E_f) y U corresponde a la repulsión Coulombiana que modula la ocupación en el estado localizado. (a.) El estado localizado se encuentra en el nivel de energía ε_0 , y dos electrones con espines diferentes se encuentran en el nivel de Fermi. (b.) La impureza salta al nivel e Fermi debido a la interacción vía hibridización con los electrones de la banda de conducción. (c.) Uno de los electrones de la banda de conducción “cae” al nivel de energía ε_0 . Este fenómeno produce una resonancia en la densidad de estados alrededor del Fermi y otra resonancia en el nivel de energía ε_0 . (d.) Cuando el sistema está en equilibrio los potenciales químicos de las bandas de conducción son iguales. (e.) Cuando el sistema tiene diferentes valores en los potenciales químicos se forman resonancias alrededor de estos niveles de energía y el sistema se encuentra fuera del equilibrio. (f.) Punto cuántico litográfico, 1, 2 y 3 representan los sitios donde se mantiene el voltaje de “gate” que controla el número de electrones en el PC. El voltaje “bias” que va de “source” a “drain” controla el paso de electrones en la banda de conducción de este modelo. El voltaje entre 1 y 2 controla el valor de Γ_L y el de 1 y 3 controla el valor Γ_R . El tamaño del PC controla el valor de U .

para esta tesis U es fuerte pero de valor finito, de mayor pero comparable con el valor de V) por encima del nivel de Fermi. Los electrones de la banda de conducción son los electrones deslocalizados. Esto permite estudiar una impureza magnética artificial y ajustar *in-situ* los parámetros que describen el efecto Kondo como: la temperatura, el voltaje, el campo magnético, el acoplamiento entre la impureza y la banda de conducción (en esta tesis el acoplamiento entre las bandas está descrita por el parámetro V), y los efectos de repulsión de Coulomb (U), de igual forma que la energía del estado localizado por debajo del nivel de Fermi. El primer experimento que mostró el efecto Kondo en puntos cuánticos fue reportado por Gordon *et al.* (1998) [11]. En la Figura 3 se muestra un esquema del Modelo de Anderson para la formación de estados localizados en un punto cuántico. Un punto cuántico con un espín degenerado en el nivel de energía ε_0 ocupado por un electrón. U es la energía de repulsión

de Coulomb, Γ_L y Γ_R son los acoplamientos del punto cuántico con la banda de conducción de la izquierda y la derecha. Los parámetros ε_0 , Γ_L y Γ_R pueden ser controlados por los voltajes “gate”. Los estados “source” y “drain” están continuamente llenándose hasta el potencial electroquímico μ_s y μ_d , las figuras 3a, 3b y 3c muestran el tunelamiento virtual, donde el espín-“up” del electrón tunela fuera del punto y el espín-“down” tunela dentro del punto cuántico. Este tunelamiento muestra un giro virtual del espín (“spin-flip”), creando un efecto correlacionado visto macroscópicamente con propiedades conocidas como el efecto Kondo.

Modelo de Anderson para la impureza

Una explicación inicial aceptada del estado localizado mostraba como el efecto Kondo causaba la formación de un estado base resultado de la interacción de las impurezas magnéticas inmersas en el metal no magnético con los electrones de conducción. Lo que daba lugar al aumento de la resistividad para baja temperaturas. Esta solución fue propuesta en 1961 por P. W. Anderson [2] donde tiene en cuenta la energía de los electrones de los estados localizados (E_d), la energía de los electrones libres ($E_{\mathbf{k}}$), una hibridación de estados electrónicos ($V_{\mathbf{k},\sigma}$) y una repulsión Coulombiana dentro del nivel localizado (U). Este modelo a diferencia del modelo $s - d$ tiene en cuenta los efectos de muchos cuerpos y describe fluctuaciones de carga más allá de las fluctuaciones de espín consideradas en el modelo $s - d$, hecho importante que permitió describir los regímenes de valencia intermedia y el régimen Kondo presentes en el sistema. Este modelo de la impureza de Anderson se representa por el Hamiltoniano

$$H = \sum_{\mathbf{k},\sigma} E_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k},\sigma}^{\dagger} c_{\mathbf{k},\sigma} + \sum_{\sigma} E_d f_{\sigma}^{\dagger} f_{\sigma} + U f_{\sigma}^{\dagger} f_{\sigma} f_{\bar{\sigma}}^{\dagger} f_{\bar{\sigma}} + \sum_{\mathbf{k},\sigma} \left(V_{\mathbf{k},\sigma} f_{\sigma}^{\dagger} c_{\mathbf{k},\sigma} + V_{\mathbf{k},\sigma}^{*} c_{\mathbf{k},\sigma}^{\dagger} f_{\sigma} \right), \quad (4)$$

en (4) $c_{\mathbf{k},\sigma}^{\dagger}$ y $c_{\mathbf{k},\sigma}$ son los operadores creación y destrucción en los estados de la banda, f_{σ}^{\dagger} y f_{σ} crean y destruyen un electrón con espín σ en estado de la impureza. El primer término de (4) representa los electrones libres con energía $E_{\mathbf{k}}$, el segundo término a los electrones localizados o las impurezas magnéticas con energía E_d , el tercero es la energía de repulsión Coulombiana en el estado localizado y por último la hibridación entre los electrones libres y los electrones en el estado localizado.

Del Hamiltoniano (4) se deduce el modelo de Anderson no interactuante que se obtiene sustrayendo el término de repulsión Coulombiana ($U f_{\sigma}^{\dagger} f_{\sigma} f_{\bar{\sigma}}^{\dagger} f_{\bar{\sigma}}$),

$$H = \sum_{\mathbf{k},\sigma} E_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k},\sigma}^{\dagger} c_{\mathbf{k},\sigma} + \sum_{\sigma} E_d f_{\sigma}^{\dagger} f_{\sigma} + \sum_{\mathbf{k},\sigma} \left(V_{\mathbf{k},\sigma} f_{\sigma}^{\dagger} c_{\mathbf{k},\sigma} + V_{\mathbf{k},\sigma}^{*} c_{\mathbf{k},\sigma}^{\dagger} f_{\sigma} \right), \quad (5)$$

este Hamiltoniano posee solución analítica y fue usado por Anderson como una aproximación para el Hamiltoniano de Hartree-Fock de campo medio, que contiene operadores de muchos cuerpos transformándolos en el Hamiltoniano de un único cuerpo.

Una explicación esquemática de este modelo se encuentra en la figura 4. Los electrones localizados están sumergidos en el mar de Fermi de un metal con una energía ε_0 menor que la energía de Fermi E_F (esta energía en el hamiltoniano 5 esta descrita por E_d). Un espín localizado está en un estado degenerado con una energía ε_0 por debajo de la energía de Fermi y está ocupado por un electrón (en este caso con espín “up”). La doble ocupación está limitada por la repulsión de Coulomb U , que aumenta la energía de doble ocupación a $\varepsilon_0 + U$ por encima de la energía de Fermi.

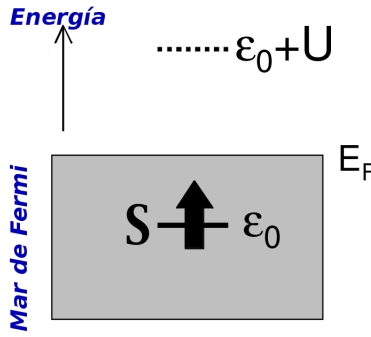


Figura 4: Representación esquemática del modelo de la impureza Anderson: Los electrones de conducción se encuentran llenando el nivel de Fermi. Un estado localizado con energía ϵ_0 por debajo del nivel de Fermi, la energía para un segundo electrón ocupara el nivel de energía $E_0 + U$.

Anderson determinó que una impureza atómica con una repulsión Coulombiana U , y una hibridación bastante débil V entre el estado localizado y la banda de conducción puede retener un momento magnético finito en este modelo.

Teniendo este modelo de espín localizado se consideran interacciones entre el estado localizado y los electrones de conducción. El electrón en el estado localizado puede disminuir su energía cinética por medio de un salto (“hopping”) virtual a los estados desocupados en la superficie de Fermi (el electrón extiende su función de onda) [2]. Esto ocurre solo si hay estado habilitado del mismo espín en la energía de Fermi, esto se debe a un exceso de electrones con espín opuesto en el nivel de energía de Fermi del “bulk” para permitir esta transición (debido al principio de exclusión de Pauli) [62]. Pero para crear estados locales con exceso de espines en la vecindad de la impureza es necesario que exista un número de electrones semilocalizados, y este proceso tiene un costo de energía. Por lo tanto se tiene una competición entre la energía ganada para deslocalizar al electrón en la impureza y el costo de energía para localizar a los electrones de conducción alrededor de la impureza (este electrón queda saltando entre localizado y deslocalizado). A temperaturas suficientemente bajas predomina la deslocalización de la impureza [27]. Los electrones en el bulk metálico tratan de apantallar el espín de la impureza formando un estado singlete (“spin-singlet”) con la impureza electrónica [28, 46] (figura 4). Este enlace antiferromagnético entre el estado de la impureza y los electrones de conducción tiene una escala de energía característica de KT_K . Este estado singlete es frecuentemente llamado “*nube Kondo*” y es asociado a una larga escala que tiene la forma $\xi_K = \hbar v_F / (k_B T_K)$ donde v_F es la velocidad de Fermi, esta longitud es frecuentemente estimada teóricamente entre los 0,1 y 1 micrones pero experimentalmente no se ha observado [1]. A temperaturas $T \gg T_K$ el sistema no es energéticamente favorable y el estado singlete no se forma y por lo tanto la resistencia es proporcional a T^5 debido a la dispersión de los fonones. A medida que la temperatura se acerca a T_K la resistividad llega a su mínimo y aumenta logarítmicamente como se mostró en la dependencia de la resistencia con la temperatura (ecuación 1). Gracias a los desarrollos teóricos acerca del tema se pueden hacer predicciones para la dependencia de la resistividad de muchos parámetros del sistema metal-impureza como: el voltaje, el campo magnético, y la penetración de la impureza magnética por debajo del nivel de Fermi [35, 72]. Sin embargo estas predicciones no son fácilmente probadas en sistemas metálicos porque los parámetros de los metales reales son difíciles de cambiar o esto es simplemente imposible, por ejemplo, no es posible cambiar la energía de la impureza relativa al nivel de Fermi, ni para crear un voltaje de polarización grande a través de una impureza que está rodeada por una estructura

metálica. Por esto se había dejado de lado las investigaciones acerca del efecto Kondo en los metales hasta el desarrollo experimental de los puntos cuánticos litográficos, sistemas en donde se puede tener el control experimental de los principales parámetros, algunas veces estos sistemas son llamados átomos artificiales.

Aproximación Atómica Para el modelo de Anderson

Los sistemas con interacciones electrón-electrón fuerte, cobran importancia a partir de los años setenta a causa de los fenómenos de valencia intermedia en los sistemas Kondo. Uno de los primeros modelos para describir estos sistemas fue propuesto por Hubbard [29], que tiene solución exacta para parámetros muy particulares. Con el tiempo se desarrollaron otros modelos para el estudio de estos sistemas fuertemente correlacionados, como el de la impureza de Anderson [8], y el de la red de Anderson [16, 21]. En esta tesis emplearemos un nuevo método que soluciona el hamiltoniano de Anderson (tanto para la red, como para la impureza) al que llamaremos *aproximación atómica* (*AA*) con un potencial de Coulomb finito (U -finito) (*AAUF*).

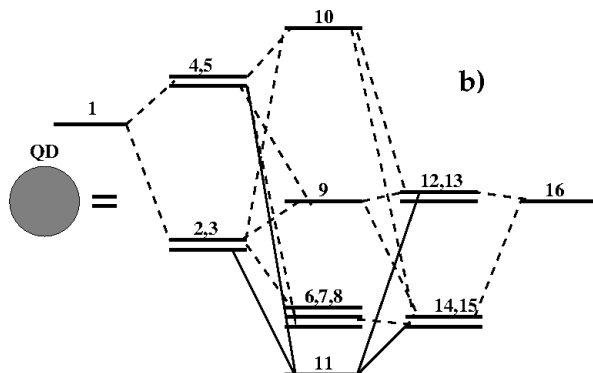


Figura 5: Diagrama multinivel efectivo para la aproximación atómica .

El límite atómico para el modelo de Anderson, consiste en considerar el ancho de banda para los electrones de conducción, tendiendo a cero, esto es “colapsar” toda la banda de conducción, en un único nivel energético, entorno al nivel de Fermi. El límite atómico puede ser resuelto analíticamente, obteniéndose 16 autoenergías y 16 autoestados que contienen todas las excitaciones fundamentales que generan el efecto Kondo. La *AAUF* aplica la solución del límite atómico para el modelo de Anderson como una “semilla” que genera la solución aproximada para los casos de la impureza y de la red de Anderson, en esta tesis solo consideraremos la solución *AAUF* para el caso de la impureza.

Esta estructura multinivel corresponde al límite Kondo a temperatura T por debajo de la temperatura Kondo T_K . El singlete Kondo está representado por el nivel 11 (figura 5). Las líneas sólidas están asociadas a transiciones entre estados que producen residuos diferentes de cero para las funciones de Green atómicas a muy bajas temperaturas (Apéndice A) y que generan el pico Kondo. Las transiciones representadas por las líneas discontinuas producen residuos iguales a cero y son irrelevantes a bajas temperaturas. Esta estructura de autoestados no es estática y cambia con la energía del nivel localizado (E_{PC}) siguiendo los diferentes regímenes del modelo de Anderson para la impureza: *PC*

vacío, valencia intermediaria, régimen Kondo y doble ocupación; además los residuos asociados a las posibles transiciones dependen de la temperatura. La estructura presentada en la figura 5 es la correspondiente al punto simétrico del modelo ($E_{PC} = -U/2$, $\mu = Ef = 0,0$) a temperaturas por debajo de la temperatura Kondo T_K .

El modelo de Anderson periódico describe una banda de conducción, c -electrones (primer término de 6), la energía en un estado localizado f -electrones (segundo término), en el caso de una red de estados localizados se representa como una sumatoria sobre los sitios j con espín σ , una repulsión coulombiana en cada uno de los sitios de los estados localizados (tercer término) y una hibridación de los estados localizados con la banda de conducción (H_h). Este modelo se escribe de la siguiente forma

$$H = \sum_{\mathbf{k},\sigma} E_{\mathbf{k},\sigma} C_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger C_{\mathbf{k},\sigma} + \sum_{j,\sigma} E_d f_{j,\sigma}^\dagger f_{j,\sigma} + U \sum_j n_{j,\sigma} n_{j,\bar{\sigma}} + H_h, \quad (6)$$

los operadores $C_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger$ y $C_{\mathbf{k},\sigma}$ son los operadores creación y destrucción de los electrones en la banda de conducción (c -electrons) con vector de onda \mathbf{k} , componente de espín σ y energía $E_{\mathbf{k},\sigma}$. Los operadores $f_{j,\sigma}$ y $f_{j,\sigma}^\dagger$ corresponden a los operadores para los electrones localizados (f -electrons) en la base de Wannier en el sitio j , componente de espín σ y energía E_σ . La tercera componente de 6 es la repulsión de Coulomb entre los electrones localizados en cada sitio, donde $n_{j,\sigma} = f_{j,\sigma}^\dagger f_{j,\sigma}$ es el operador número de los electrones f y $\bar{\sigma}$ es la componente de espín opuesta a σ . El cuarto término describe la hibridación entre los electrones de conducción y los electrones localizados y se escribe como [16]:

$$H_h = \sum_{j,\mathbf{k}\sigma} \left(V_{j,\mathbf{k}\sigma} f_{j,\sigma}^\dagger C_{\mathbf{k},\sigma} + V_{j,\mathbf{k}\sigma}^* C_{\mathbf{k},\sigma} f_{j,\sigma} \right), \quad (7)$$

con el factor de acoplamiento $V_{j,\mathbf{k}\sigma}$ dado por

$$V_{j,\mathbf{k}\sigma} = \frac{1}{\sqrt{N_s}} V_\sigma(\mathbf{k}) \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_j). \quad (8)$$

Empleando los operadores de Hubbard $X_{j,ba} = |j, b\rangle\langle j, a|$ que transforman el estado $|a\rangle$ del sitio j a estado $|b\rangle$ de mismo sitio, siendo $|a\rangle$ y $|b\rangle$ estados propios del número de electrones. El álgebra de estos operadores está definida por la regla del producto cuando están en el mismo sitio [21]:

$$X_{j,ab} X_{j,cd} = \delta_{bc} \cdot X_{j,ad}, \quad (9)$$

$$X_{j,0\sigma} X_{j,0\sigma} = X_{j,\sigma\sigma} \quad (10)$$

con estos operadores es posible generalizar la ecuación (7) para diferentes configuraciones usando muchas otras elecciones de estados, así el hamiltoniano (6) queda escrito por

$$H = \sum_{\mathbf{k},\sigma} E_{\mathbf{k},\sigma} C_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger C_{\mathbf{k},\sigma} + \sum_{j,\sigma} E_{j,\sigma} X_{j,\sigma\sigma} + H_h \quad (11)$$

donde

$$H_h = \sum_{j,\mathbf{k},\sigma} \left(V_{j,\mathbf{k},\sigma} X_{j,0\sigma}^\dagger C_{\mathbf{k},\sigma} + V_{j,\mathbf{k},\sigma}^* C_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger X_{j,0\sigma} \right) \quad (12)$$

El segundo término la energía $E_{j,\sigma}$ de la ecuación (11) contiene la repulsión de Coulomb descrita en el tercer término de la ecuación (7) y los términos \mathbf{k} y σ en la suma indican que se suma sobre todos los estados $|\mathbf{k}\rangle$ y $|\sigma\rangle$ que se desean incluir en el modelo. En general $X_{j,ab}$ (donde a y b

son números cuánticos) tiene un carácter fermiónico si la diferencia entre el número de ocupación de los estados $|a\rangle$ y $|b\rangle$ es un número impar y de carácter bosónico si dicha diferencia es un número par.

En el modelo de Anderson para U finito hay cuatro estados $|0\rangle$ (estado vacío), $|+\rangle$ (estado “up”), $|-\rangle$ (estado “down”) y doble ocupación $|d\rangle = |+-\rangle$ ¹, existen cuatro operadores de Hubbard (X) que destruyen un electrón en un sitio dado [17]. La relación de identidad en el espacio de los estados localizados en el sitio j es

$$X_{j,00} + X_{j,\sigma\sigma} + X_{j,\bar{\sigma}\bar{\sigma}} + X_{j,dd} = I, \quad (13)$$

donde $\bar{\sigma} = -\sigma$, y los cuatro operadores $X_{j,aa}$ son los proyectores para los estados $|j, a\rangle$ ($a = 0, \sigma, \bar{\sigma}, d$). Los números de ocupación de la impureza (promediando cada uno de los operadores de 13), $n_{j,a} = \langle X_{j,aa} \rangle$ satisfacen la relación de completéz

$$n_{j,0} + n_{j,\sigma} + n_{j,\bar{\sigma}} + n_{j,d} = 1. \quad (14)$$

Descripción de la solución atómica

Para resolver el modelo de Anderson de la ecuación (6) en el límite de la banda de conducción nula se elimina la contribución del “hopping” [15], como se mencionó previamente, en estas condiciones es posible determinar analíticamente todo el espectro del sistema, obteniendo un total de 16 autoestados con sus respectivos autovectores (ver Apéndice A). Empleando el formalismo de Zubarev es posible obtener expresiones analíticas exactas para las funciones de Green del sistema a temperatura finita en este caso límite [47] (ver Apéndice A).

Formalmente las funciones de Green, validas para el modelo periódico (MAP) y la impureza (MIA), se describen por la ecuación de Dyson

$$\mathbf{G}_\sigma^{PC} = \mathbf{M}_\sigma \cdot (\mathbf{I} - \mathbf{A}_\sigma)^{-1}, \quad (15)$$

en esta ecuación $\mathbf{A}_\sigma = \mathbf{W}_\sigma \cdot \mathbf{M}_\sigma^{at}$, y las funciones de Green forman la matriz

$$\mathbf{G}^{PC} = \begin{pmatrix} \mathbf{G}_\uparrow^{ff} & 0 \\ 0 & \mathbf{G}_\downarrow^{ff} \end{pmatrix} \quad (16)$$

y

$$\mathbf{M}_\sigma = (\mathbf{I} + \mathbf{G}_\sigma^{PC} \cdot \mathbf{W}_\sigma)^{-1} \cdot \mathbf{G}_\sigma^{PC} \quad (17)$$

con $\mathbf{W}_\sigma = \mathbf{W}_\uparrow, \mathbf{W}_\downarrow$ definidas respectivamente

$$\mathbf{W}_\uparrow(\mathbf{k}, z) = |V|^2 g_{c,\uparrow}^0(\mathbf{k}, z) \mathbf{I} \quad (18)$$

$$\mathbf{W}_\downarrow(\mathbf{k}, z) = |V|^2 g_{c,\downarrow}^0(\mathbf{k}, z) \mathbf{I}' \quad (19)$$

con

$$\mathbf{I} = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} \quad \mathbf{I}' = \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ -1 & 1 \end{pmatrix} \quad (20)$$

¹En el caso de repulsión de Coulomb infinita $U \rightarrow \infty$ no existe doble ocupación ($|d\rangle$)

en esta ecuación la función de Green \mathbf{G}_σ^{PC} en (17) es en principio desconocida. La matriz \mathbf{M}_σ está definida por los cumulantes

$$\mathbf{M}_\uparrow = \begin{pmatrix} m_{11} & m_{13} \\ m_{31} & m_{33} \end{pmatrix} \quad (21)$$

$$\mathbf{M}_\downarrow = \begin{pmatrix} m_{22} & m_{24} \\ m_{42} & m_{44} \end{pmatrix} \quad (22)$$

usando estas definiciones de las funciones de Green exactas $\mathbf{G}_\sigma^{PC}(i\omega)$ de los electrones en los estados localizados PC desarrollando la matriz de inversión en (16), usando (18),(19), (21) y (22):

$$\begin{aligned} \mathbf{G}_\uparrow^{PC} &= \begin{pmatrix} G_{11}^{PC} & G_{13}^{PC} \\ G_{31}^{PC} & G_{33}^{PC} \end{pmatrix} \\ &= \frac{\begin{pmatrix} m_{11} & m_{13} \\ m_{31} & m_{33} \end{pmatrix} - |V|^2 \varphi_\uparrow(i\omega)(m_{11}m_{33} - m_{13}m_{31}) \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ -1 & 1 \end{pmatrix}}{1 - |V|^2 \varphi_\uparrow(i\omega)(m_{11} + m_{33} + m_{13} + m_{31})} \end{aligned} \quad (23)$$

$$\begin{aligned} \mathbf{G}_\downarrow^{PC} &= \begin{pmatrix} G_{22}^{PC} & G_{24}^{PC} \\ G_{42}^{PC} & G_{44}^{PC} \end{pmatrix} \\ &= \frac{\begin{pmatrix} m_{22} & m_{24} \\ m_{42} & m_{44} \end{pmatrix} - |V|^2 \varphi_\downarrow(i\omega)(m_{22}m_{44} - m_{24}m_{42}) \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}}{1 - |V|^2 \varphi_\downarrow(i\omega)(m_{22} + m_{44} - m_{24} - m_{42})} \end{aligned} \quad (24)$$

φ_σ , con $\sigma = \uparrow, \downarrow$ es la función de Green para la banda de conducción que para este caso es modelada como una banda cuadrada de ancho $D = [A, B]$

$$\varphi_\sigma(z) = \frac{1}{2D} \ln \left(\frac{z - B + \mu}{z - A + \mu} \right) \quad (25)$$

aquí μ es el potencial químico, $z = i\omega$, A y B los extremos del ancho de la banda de conducción. De forma similar como se calcularon (23) y (24) es posible encontrar las funciones de Green de los electrones de conducción $\mathbf{G}_\sigma^{cc}(\mathbf{k}, \mathbf{k}', i\omega)$ y la FG cruzada $\mathbf{G}_\sigma^{cf}(\mathbf{k}, i\omega)$

$$\begin{aligned} \mathbf{G}_\uparrow^{cc}(\mathbf{k}, \mathbf{k}', i\omega) &= g_{c,\uparrow}^0(\mathbf{k}, i\omega) \delta(\mathbf{k}, \mathbf{k}') + \frac{|V|^2}{N_s} g_{c,\uparrow}^0(\mathbf{k}, i\omega) \times \\ &\quad \frac{(m_{11} + m_{33} + m_{13} + m_{31})}{1 - |V|^2 \varphi_\uparrow(i\omega)(m_{11} + m_{33} + m_{13} + m_{31})} \times g_{c,\uparrow}^0(\mathbf{k}', i\omega) \end{aligned} \quad (26)$$

$$\begin{aligned} \mathbf{G}_\downarrow^{cc}(\mathbf{k}, \mathbf{k}', i\omega) &= g_{c,\downarrow}^0(\mathbf{k}, i\omega) \delta(\mathbf{k}, \mathbf{k}') + \frac{|V|^2}{N_s} g_{c,\downarrow}^0(\mathbf{k}, i\omega) \times \\ &\quad \frac{(m_{22} + m_{24} + m_{42} + m_{44})}{1 - |V|^2 \varphi_\downarrow(i\omega)(m_{22} + m_{44} - m_{24} - m_{42})} \times g_{c,\downarrow}^0(\mathbf{k}', i\omega) \end{aligned} \quad (27)$$

la función de Green \mathbf{G}_σ^{cf} está definida por el vector columna con dos componentes [67]

$$\mathbf{G}_\sigma^{cf} = (\mathbf{G}_{0\sigma,\sigma}^{cf}, \mathbf{G}_{\bar{\sigma}d,\sigma}^{cf}), \quad (28)$$

$$\mathbf{G}_{\uparrow}^{cf}(\mathbf{k}, i\omega) = \frac{V}{\sqrt{N_s}} g_{c,\uparrow}^0(\mathbf{k}, i\omega) \times \frac{(m_{11} + m_{33} + m_{13} + m_{31})}{1 - |V|^2 \varphi_{\uparrow}(i\omega)(m_{11} + m_{33} + m_{13} + m_{31})} \quad (29)$$

$$\mathbf{G}_{\downarrow}^{cf}(\mathbf{k}, i\omega) = \frac{V}{\sqrt{N_s}} g_{c,\downarrow}^0(\mathbf{k}, i\omega) \times \frac{(m_{22} + m_{24} + m_{42} + m_{31})}{1 - |V|^2 \varphi_{\downarrow}(i\omega)(m_{22} + m_{44} - m_{24} - m_{42})} \quad (30)$$

el procedimiento para calcular los cumulantes exactos efectivos M_{σ} es tan complicado como obtener las funciones de Green exactas \mathbf{G}_{σ}^{ff} . Se debe destacar que obtener los cumulantes exactos efectivos es equivalente a sumar todas las contribuciones que al realizar la expansión diagramática asociada al problema, generan diagramas no irreducibles, teniendo en cuenta las reglas para la construcción de diagramas asociadas al álgebra de los operadores de Hubbard [44]. Es decir obtener una solución exacta para los cumulantes efectivos es equivalente a obtener una solución analítica exacta para el problema.

El límite atómico del modelo tiene la misma forma funcional para la ecuación de Dyson 15.

$$\mathbf{G}_{\sigma}^{PC,at} = \mathbf{M}_{\sigma}^{at} \cdot (\mathbf{I} - \mathbf{W}_{\sigma}^0 \mathbf{M}_{\sigma}^{at})^{-1} \quad (31)$$

de estas ecuaciones, dado que se conoce la solución analítica exacta para las funciones de Green, es posible calcular los cumulantes exactos en este caso límite

$$\mathbf{M}_{\sigma}^{at} = (\mathbf{I} + \mathbf{G}_{\sigma}^{PC,at} \cdot \mathbf{W}_{\sigma}^0)^{-1} \mathbf{G}_{\sigma}^{PC,at}. \quad (32)$$

Para el nivel localizado en el origen las ecuaciones (18) y (19) son definidas

$$\mathbf{W}_{\uparrow}^0(z) = |\Delta|^2 \varphi_{\uparrow}(z) = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} \quad (33)$$

$$\mathbf{W}_{\downarrow}^0(z) = |\Delta|^2 \varphi_{\downarrow}(z) = \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ -1 & 1 \end{pmatrix} \quad (34)$$

donde la contribución de los electrones de conducción $c-$ está sobrestimada [15], porque se concentran en un solo nivel de energía ε_0 (consecuencia de “colapsar” la banda de conducción en un único nivel). Para alivianar estos efectos se reemplaza $V \sim \Delta$ en (33) y (34) y la función φ_{σ} es

$$\varphi_{\sigma}(z) = \frac{1}{N_s} \sum_{\mathbf{k}} g_{c,\sigma}^0(\mathbf{k}, z) \quad (35)$$

$$\varphi_{\sigma}^0(z) = \frac{-1}{z - \varepsilon_0 - \mu} \quad (36)$$

donde el potencial químico μ aparece en $\varphi_{\sigma}(z)$ porque $\varepsilon(\mathbf{k}, z) = E_{\mathbf{k},\sigma} - \mu$ en $g_{c,\sigma}^0(\mathbf{k}, z)$. Y la función $\varphi_{\sigma}^0(z)$ se obtiene por sustituir $g_{c,\sigma}^0(\mathbf{k}, z)$ en (35) por la función de Green no perturbada correspondiente a la banda de conducción de longitud cero, localizada en ε_0 (ver Apéndice A).

La esencia de la presente aproximación consiste en sustituir el cumulante efectivo M_{σ} desconocido, por el cumulante del límite atómico M_{σ}^{at} conocido, teniendo en cuenta (33) y (34) después se construye el cumulante aproximado M_{σ}^{at} como sigue

$$M_{\sigma} \longrightarrow M_{\sigma}^{at} \quad (37)$$

procediendo con la inversión de la matriz de inversión (32) empleando (33) y (34) reescribimos la matriz \mathbf{M}_σ para la solución atómica

$$\begin{aligned} \mathbf{M}_\uparrow^{at} &= \begin{pmatrix} m_{11}^{at} & m_{13}^{at} \\ m_{31}^{at} & m_{33}^{at} \end{pmatrix} \\ &= \frac{\begin{pmatrix} g_{11} & g_{13} \\ g_{31} & g_{33} \end{pmatrix} + |\Delta|^2 \varphi_\uparrow^0(i\omega)(g_{11}g_{33} - g_{13}g_{31}) \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ -1 & 1 \end{pmatrix}}{1 - |\Delta|^2 \varphi_\uparrow^0(i\omega)(g_{11} + g_{33} - g_{13} - g_{31})} \end{aligned} \quad (38)$$

$$\begin{aligned} \mathbf{M}_\downarrow^{at} &= \begin{pmatrix} m_{22}^{at} & m_{24}^{at} \\ m_{42}^{at} & m_{44}^{at} \end{pmatrix} \\ &= \frac{\begin{pmatrix} g_{22} & g_{24} \\ g_{42} & g_{44} \end{pmatrix} + |\Delta|^2 \varphi_\downarrow^0(i\omega)(g_{22}g_{44} - g_{24}g_{42}) \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}}{1 - |\Delta|^2 \varphi_\downarrow^0(i\omega)(g_{22} + g_{44} - g_{24} - g_{42})} \end{aligned} \quad (39)$$

reemplazando M_\uparrow^{at} y M_\downarrow^{at} en las ecuaciones (23) y (24) se obtienen las funciones de Green para el modelo atómico. Las funciones de Green: FG de conducción G_σ^{cc} y cruzada G_σ^{cf} son encontradas de forma similar. Las funciones g_{ij} son calculadas considerando: la banda de conducción en el límite de longitud cero y U-finito entre los electrones f (localizados) (Apéndice A). Los valores de m_{ij} son los residuos de los electrones f (Tabla 3 del apéndice A). En este límite todas las contribuciones en la integral de transferencia entre los sitios electrónicos en la red son eliminados en el hamiltoniano, por esta razón $V_\alpha = V$ en (7).

Imposición de la Regla de suma de Friedel

La interacción entre una impureza magnética, ligada a un estado localizado y la banda de conducción, puede verse dentro del formalismo general de teoría de dispersión en mecánica cuántica, dentro de esta, la satisfacción de los principios de conservación de la carga, el espín y el momentum magnético orbital son consecuencia de la denominada regla de suma de Friedel [75], que admite la expresión matemática

$$\rho_{f\sigma}(\mu) = \frac{\sin^2(\pi n_{f\sigma})}{\Delta\pi} \quad (40)$$

donde $\rho_{f\sigma}(\mu)$ es la densidad de estados en el nivel localizado evaluada en el potencial químico [33]. La regla de suma de Friedel [40] en $T = 0$ relaciona los estados extras por debajo del nivel de Fermi producidos por la dispersión de electrones de conducción, electrones localizados y el corrimiento de fase $\delta(\mu)$ en el potencial químico obtenido mediante el cálculo de la matriz de transferencia $T_{f,\sigma}(z) = V^2 G^{ff,\sigma}(z)$ para la impureza donde V es el potencial de dispersión.

La diferencia entre las funciones de de Green exacta y aproximada radica en las energías $\varepsilon_{\mathbf{k}}$ están asociadas a los propagadores de los electrones c en el cálculo de los cumulantes efectivos $\mathbf{M}_\sigma^{eff}(z)$, mientras que para la aproximación estas energías son concentradas en el nivel de conducción atómico

ε_0 en $\mathbf{M}_\sigma^{at}(z)$. A pesar que $\mathbf{M}_\sigma^{at}(z)$ es sólo una aproximación, contiene todos los cumulantes de la solución exacta. De este modo se puede esperar que las funciones de Green correspondientes tengan características muy realistas. Sin embargo se debe decidir que valor de ε_0 elegir. Para esto se considera que la posición del nivel atómico de conducción debe ser dado por $\varepsilon_0 = \mu \pm \delta_{\varepsilon_0}$. Esto deja la libertad de escoger el valor de ε_0 que satisfaga la regla de suma de Friedel definida en la ecuación (40) [67], asegurando que el valor de ε_0 sea el más próximo al potencial químico (nivel de Fermi en este caso).

Propiedades termoeléctricas

Para calcular el transporte termoeléctrico, en condiciones estacionarias, a través de todas las nanoestructuras se aplica un voltaje “bias” ($\Delta V = V_L - V_R$) a través de los conductores de la izquierda (L) y de la derecha (R), además de una pequeña diferencia de temperatura ($\Delta T = T_L - T_R$). De la teoría de respuesta lineal podemos saber que: una corriente J_α fluye por el sistema debido a gradientes de temperatura $\vec{\nabla}T$ o por la existencia de campos eléctricos $\vec{E} = -\vec{\nabla}V$. En los sistemas estudiados en esta tesis se fija el potencial químico en cero ($\mu = 0$) y por lo tanto las contribuciones debida a los gradientes del potencial químico desaparecen ($\vec{\nabla}\mu = 0$). Así la corriente de carga (J_e) y la corriente de calor (J_Q) que circulan por el sistema vienen dadas por [9]:

$$J_e = e^2 L_0(T)(-\Delta V) + \frac{e}{T} L_1(T)(-\Delta T), \quad (41)$$

$$J_Q = e L_1(T)(-\Delta V) + \frac{1}{T} L_2(T)(-\Delta T), \quad (42)$$

donde e es la magnitud de la carga eléctrica y $L_0(T)$, $L_1(T)$ y $L_2(T)$ son los coeficientes de transporte. La conductancia de electrones es medida en condiciones isotérmicas ($\Delta T = 0$). Así la ecuación (41) queda de la forma

$$J_e = e^2 L_0(T)(-\Delta V), \quad (43)$$

de la definición de la conductancia eléctrica [9]

$$G(T) = - \lim_{\Delta V \rightarrow 0} \frac{J_e}{\Delta V} \Big|_{\Delta T=0} = e^2 L_0(T). \quad (44)$$

La contribución de la conductancia térmica (κ) es usualmente medida situando la muestra en un circuito eléctrico abierto de tal forma que $J_e = 0$. Reemplazando $J_e = 0$ e la ecuación (41)

$$-\Delta V = \frac{1}{eT} \frac{L_1(T)}{L_0(T)} \Delta T. \quad (45)$$

Substituyendo este resultado en la ecuación (42) se obtiene

$$J_Q = \frac{1}{T} \left(L_2(T) - \frac{L_1^2(T)}{L_0(T)} \right) (-\Delta T) \quad (46)$$

y de la definición de la conductancia térmica [9]

$$\kappa(T) = - \lim_{\Delta T \rightarrow 0} \frac{J_Q}{\Delta T} \Big|_{J_e=0} = \frac{1}{T} \left(L_2(T) - \frac{L_1^2(T)}{L_0(T)} \right). \quad (47)$$

Por simplicidad no se considera la contribución debida a los fonones en la conductancia eléctrica. Generalmente existen efectos de interacción entre las corrientes eléctrica y térmica. La termopotencia (o coeficiente Seebeck) es definida por la relación

$$S = \lim_{\Delta T \rightarrow 0} \frac{\Delta V}{\Delta T} \Big|_{J_e=0} = \frac{-1}{eT} \left(\frac{L_1(T)}{L_0(T)} \right). \quad (48)$$

Para calcular los coeficientes $L_0(T)$, $L_1(T)$ y $L_2(T)$ seguimos el artículo de Dong y X. L. Lei [13] el cual deriva la corriente de partículas y las formulas de flujo térmico de un *PC* conectado a dos conductores con el formalismos de Keldysh para las funciones de Green fuera del equilibrio. Los coeficientes de transporte eléctrico y termoelectricos fueron obtenidos en presencia de un potencial químico y gradientes de temperatura con la relación de Onsager en el régimen lineal automáticamente satisfecha. Los coeficientes de transporte son consistentes con las formulas termoelectricas generales derivadas con anterioridad dadas por

$$L_n(T) = \frac{2}{h} \int \left(\frac{\partial n_F(T)}{\partial \omega} \right) \omega^n \tau_\sigma(\omega) d\omega, \quad (49)$$

donde, n_F es la función de distribución de Fermi-Dirac, $\tau_\sigma(\omega) = \gamma^2 |G_{00,\sigma}(\omega)|^2$ es la transmitancia para la electrones con espín σ , con $\gamma = V^2/\Delta$ es la constante de acoplamiento entre la banda de conducción y el punto cuántico, Δ es el parámetro de Anderson. $G_{00,\sigma}(\omega)$ es la función de Green local en el *PC*, la cual es diferente para cada nanoestructura.

Funciones de Green locales para cada nanoestructura

Estas funciones de Green se contruyen con todas las probabilidades de transición que puedan realizar los electrones en la nanoestructura.

- $G_{00,\sigma}(\omega)$ para el PC inmerso en el HC.

$$G_{00,\sigma}(\omega) = (G_\sigma^c(\omega))^2 V^2 G_\sigma^{QD}(\omega) \quad (50)$$

- $G_{00,\sigma}(\omega)$ para el PC acoplado lateralmente al HC.

$$G_{00,\sigma}(\omega) = G_\sigma^c(\omega) + (G_\sigma^c(\omega))^2 V^2 G_\sigma^{QD}(\omega) \quad (51)$$

- $G_{00,\sigma}(\omega)$ para el nanotubo de Carbono zig zag de pared simple acoplado lateralmente al PC.

$$G_{00,\sigma}(\omega) = G_\sigma^c(\omega) + (G_\sigma^c(\omega))^2 V^2 G_\sigma^{QD}(\omega) \quad (52)$$

donde $G_\sigma^c(\omega)$ corresponde a la función de Green de la banda de conducción, que ne los dos primeros casos corresponde a la función de Green de una banda de conducción cuadrada (ver ecuación 25). Para el caso de el nanotubo corresponde a la función de Green del nanotubo de Carbono de pared simple zig – zag (ecuación 74).

Ley de Wiedemann-Franz

Para metales ordinarios el estado de la ley de Wiedemann Franz (LWF) describe una relación entre la conductancia eléctrica y la conductancia térmica definida por el número de Lorentz (\mathcal{L})

$$\mathcal{L} = \frac{\kappa}{GT}, \quad (53)$$

que asume un valor universal independiente de la temperatura dado por $\mathcal{L}_0 = \left(\frac{\pi^2}{3}\right) \left(\frac{k_B}{e}\right)^2 = 2,45 \times 10^{-8} W\Omega/K^2$, donde k_B es la constante de Boltzmann y e la carga eléctrica. Este resultado es consecuencia del comportamiento de los electrones en el metal como un líquido de Fermi, y expresa básicamente el hecho que los electrones libres soportan el transporte de carga y el transporte de calor (sin considerar la contribución de los fonones). En esta tesis se trabaja la LWF en la forma

$$W = \frac{\mathcal{L}(T)}{\mathcal{L}_0} \quad (54)$$

Para metales ordinarios, las conductancias eléctrica y térmica están relacionadas con los mismos procesos de dispersión y solamente una débil dependencia con la energía. Esta es la principal razón porque los metales ordinarios muestran bajos valores en ZT . Sin embargo en el caso de las nanoestructuras la situación es completamente diferente debido al nivel de cuantización y la interacción coulombiana, las cuales cambian drásticamente las propiedades de termoelectricas del sistema. En el caso del TSE (figura 6) se mostrará que la violación de LWF es asociada con la interacción de Coulomb [56]. Además se muestra que la violación de LWF a temperaturas $T \sim \Delta$ conduce a un fuerte incremento en ZT .

RESULTADOS

Transistor de un simple electrón (TSE)

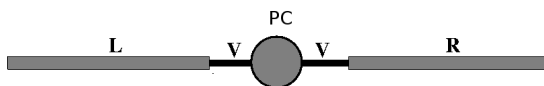


Figura 6: Esquema de un punto cuántico PC inmerso en un hilo cuántico HC o Transistor de un solo electrón TSE, (o SET, por sus siglas en inglés, Single Electron Transistor). L y R hacen referencia a los electrodos de izquierda y derecha que forman el hilo cuántico. V es la hibridación del hilo cuántico con el punto cuántico, la cual se asume de igual valor para los electrodos L y R (conductores simétricos e idénticos).

En un trabajo anterior [52], se calcularon las propiedades termoeléctricas de un punto cuántico con conductores paramagnéticos modelados como un canal balístico para el cual se empleó la aproximación de campo medio X -boson [21] en el límite de correlación de Coulomb infinita, donde se identificó una escala de temperatura $T \sim \Delta$ asociada con los procesos de fluctuación de carga, con Δ definido por $\Delta = \pi V^2 \rho_c(\mu) = \frac{\pi V^2}{2D}$ ², evaluado en el potencial químico $\mu = 0,0$ y el ancho medio de la banda $D = 100\Delta$. Para esta escala de temperatura la figura térmica de mérito tenía valores mayores que la unidad justo en la transición de la región de punto cuántico vacío a la región de valencia intermedia. Los resultados obtenidos fueron atractivos pero con limitaciones en el tratamiento de campo medio a bajas temperaturas.

Para el caso de la Aproximación Atómica es posible obtener la física a bajas temperaturas dominada por el efecto Kondo, dentro de una aproximación con un carácter “many-body”, que además describe bastante bien la región de fluctuación de carga a temperaturas $T \sim \Delta$. Además se satisface la ley de Wiedemann-Franz (LWF) que es asociada al carácter de líquido de Fermi del sistema [9, 13, 37, 52].

Para nuestros cálculos se eligieron los siguientes parámetros: $\Delta = \pi V^2 \rho_c(\mu) = \frac{\pi V^2}{2D} = 1$, con potencial químico $\mu = 0,0$ y $D = 100\Delta$, el ancho medio de la banda de conducción. La correlación U -finita se define en dos niveles del sistema; un nivel localizado en el punto cuántico E_{PC} y el otro ubicado en $E_{PC} + U$, esto determinará las propiedades termoeléctricas del TSE. La energía de correlación electrónica está descrita por $U = 20\Delta$, y el límite simétrico del modelo de Anderson se alcanzado

²De igual forma como se definió en la introducción.

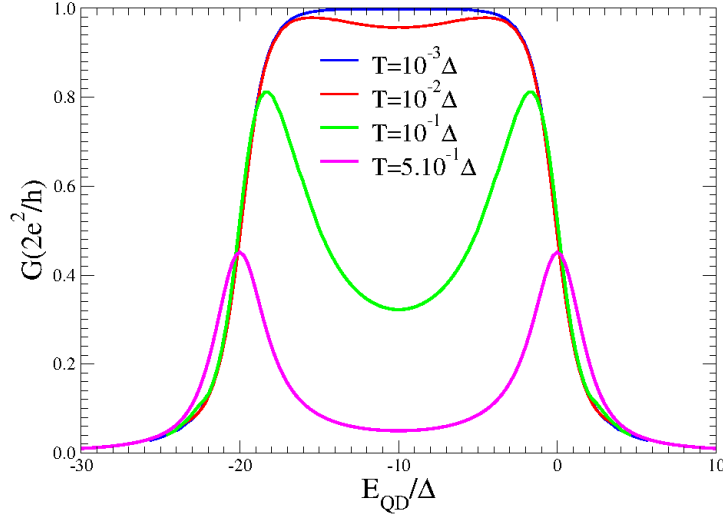


Figura 7: Conductancia eléctrica vs Energía del PC (E_{PC}) para un PC inmerso en HC .

cuando $E_{PC} = E_2 = -10,0\Delta$. Estos parámetros definen dos energías $E_1 = E_{PC} - U/2 = -20,0\Delta$ y $E_3 = E_{PC} + U/2 = 0$. Todos los valores de energía son expresados en unidades de Δ . Estos resultados muestran el comportamiento de las propiedades termoeléctricas en dos regímenes: bajas y altas temperaturas.

Efectos a bajas temperaturas

En la figura 7 se muestra el comportamiento de la conductancia eléctrica (G) para bajas temperaturas en función del voltaje “gate” del PC , representado por E_{PC} . A bajas temperaturas $T = 10^{-3}\Delta$ se presenta una meseta en el máximo de conductancia G ($2e^2/h$) al rededor del límite simétrico ($E_{PC} = -U/2 = -10\Delta$) que corresponde justo al régimen Kondo, donde se manifiesta el efecto Kondo en la conductancia eléctrica [9, 13, 68, 74]. Este es el límite unitario de la conductancia eléctrica y se obtiene experimentalmente en sistemas de PC reales a temperaturas del orden de $10mK$, W. G. van der Wiel *et al.* [71] obtuvo el límite unitario en un PC semiconductor a $T = 15mK$ con un campo magnético aplicado de $B = 0,4T$. Por otro lado A. V. Kretinin *et al.* [3] obtuvo el mismo límite en un dispositivo basado en nanohilos y PC s suspendido a una temperatura de $10mK$, sin campo magnético.

Dado que nuestros resultados indican que se alcanza el límite unitario a $T = 10^{-3}\Delta \sim 10mK$ estimamos que nuestro parámetro Δ es del orden de $\sim 10K$. Para temperaturas intermedias ($T = [10^{-2} - 5 \times 10^{-1}]\Delta$, figura 7), surgen dos picos alrededor de las regiones donde existen fuertes fluctuaciones de carga en el PC , asociadas a la entrada de un electrón en el PC (pico de la derecha en $E_{PC}/\Delta = 0$), y la entrada del segundo electrón (pico de la izquierda en $E_{PC}/\Delta = -20$), el mínimo en G entre los dos picos es asociado a la competencia entre el bloqueo de Coulomb y el efecto Kondo.

Cuando la temperatura se incrementa por encima de la temperatura Kondo, el efecto Kondo des-

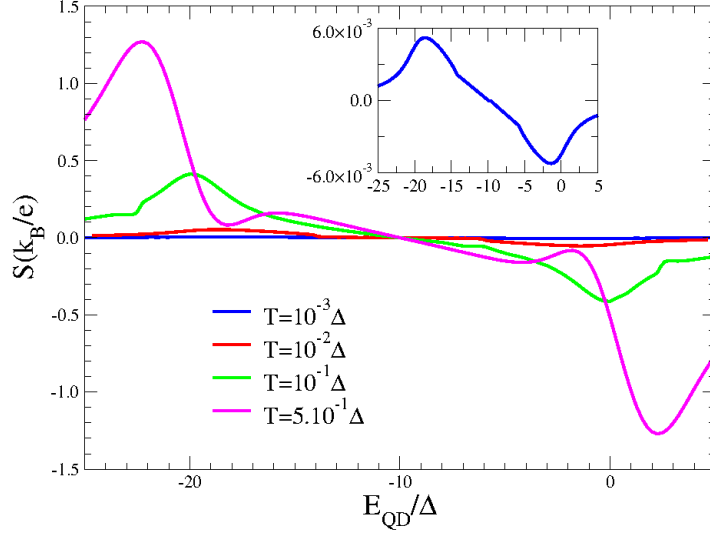


Figura 8: Termopotencia vs Energía del PC (E_{PC}) para un PC inmerso en HC .

aparece y el bloqueo de Coulomb domina haciéndose responsable del mínimo en G . Estos resultados están de acuerdo a los obtenidos por el tratamiento de GRN [9, 74].

La figura 8 muestra el comportamiento oscilatorio de la termopotencia en función de la energía E_{PC} , donde se evidencia la simetría electrón-hueco alrededor del límite simétrico $S_{-E_{PC}} = -S_{E_{PC}}$ [9]. Este comportamiento es asociado a la competición entre los diferentes portadores de carga presentes en el sistema (electrones y huecos). A muy bajas temperaturas ($k_B \ll \Delta$), las cargas pueden tunelar a través de un solo nivel y en este caso el sistema se comporta como un único nivel. La región entre E_1 y E_2 es la más relevante, debido a la disminución de la termopotencia dada por el tunelamiento de los electrones de la banda del lado izquierdo al lado derecho atravesando el nivel de doble ocupación, E_2 es igual al número de huecos que tunelan del lado izquierdo al lado derecho a través del nivel de simple ocupación E_1 . Este es el efecto bipolar reportado por J. Liu *et al.* [32] para diferentes regímenes del modelo de la impureza de Anderson. La oscilación del lado derecho es asociada al paso de PC vacío a valencia intermedia, mientras la oscilación del lado izquierdo es asociada a la transición de la región Kondo a la región de doble ocupación. Es interesante observar que en torno al límite simétrico (región Kondo, $E_{PC} = -10\Delta$) no hay oscilación, debido a que en estas condiciones no hay fluctuaciones de carga, solamente existen fluctuaciones de espín características del efecto Kondo.

En la figura 9 muestra el comportamiento de la cantidad adimensional κ/T , en unidades de $L_0 G_0$ en función de la energía del punto cuántico E_{PC} , donde L_0 es el número de Lorenz y G_0 es la conductancia balística, para diferentes valores bajos de temperatura. En la región Kondo ($T = 10^{-3}\Delta$) el comportamiento de κ/T es similar al comportamiento obtenido en la conductancia eléctrica (figura 7). Este comportamiento es una consecuencia de la ley de Wiedemann-Franz y es válida a bajas temperaturas [9, 13, 37, 42, 64, 74]. A temperaturas mayores a T_K , hay una formación de dos máximos (ver curva para $T = 10^{-1}\Delta$) los cuales surgen al cruzar de la región de PC vacío a la región de valencia intermedia y al pasar de la región Kondo a la región de doble ocupación.

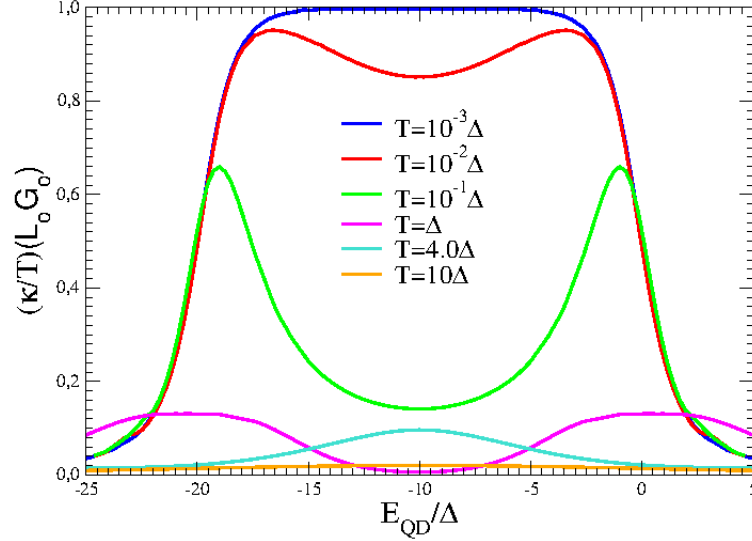


Figura 9: Conductancia térmica κ normalizada por la temperatura $(\frac{\kappa}{T})(L_0G_0)$ en función de la energía E_{PC} para diferentes temperaturas.

Efectos a altas temperaturas

Este régimen compete al intervalo de temperaturas entre $T = [1 - 10]\Delta$ y se caracteriza por las fuertes fluctuaciones de carga. Para el TSE esta es una región interesante porque la cantidad adimensional de la figura térmica de mérito (Z) adquiere valores significativamente altos.

En la figura 10 se muestran los diferentes regímenes de ocupación del sistema: estado vacío (n_0), simple ocupación $n_{up} + n_{down}$ y estado de doble ocupación (n_d), en función de la energía del PC E_{PC} para $T = \Delta$. El cambio de signo de S ocurre alrededor de los puntos P_1 , P_2 y P_3 representados en la figura 10. En el régimen de PC vacío (a la derecha del punto P_3) para valores alejados de P_3 , la termopotencia toma valores cercanos a cero $S \simeq 0,0$. A medida que E_{PC} se acerca al punto P_3 entorno al potencial químico, estados accesibles en el PC empiezan a ser ocupados por los electrones que tunelan desde el canal de conducción, incrementándose la conductancia eléctrica y obteniéndose valores de termopotencia negativos ($S < 0$) provenientes de la contribución electrónica. Cuando el voltaje E_{PC} se ubica a la izquierda del punto P_3 , la ocupación electrónica en el PC es superior a $1/2$, los estados vacíos disminuyen pues el PC empieza a llenarse y con ello el tunelamiento electrónico decae, la principal contribución para la termopotencia se debe ahora a los huecos $S > 0$. Alrededor del punto P_2 la ocupación de electrones $n_{up} + n_{down}$ es cercana a uno y prácticamente no hay estados accesibles para los electrones, por lo que se suprime la fluctuación de carga, lo que origina que entorno a P_2 $S \sim 0,0$. Cabe notar que el punto P_2 coincide con el punto simétrico del modelo ($E_{PC} = -U/2 = -10\Delta$) asociado a la ocupación unitaria en el PC , lo que origina el efecto Kondo y por estar en una condición de simetría electrón-hueco, el efecto bipolar hace que $S = 0,0$ a cualquier temperatura.

La conductancia eléctrica G es diferente de cero a bajas temperaturas debido únicamente al efecto

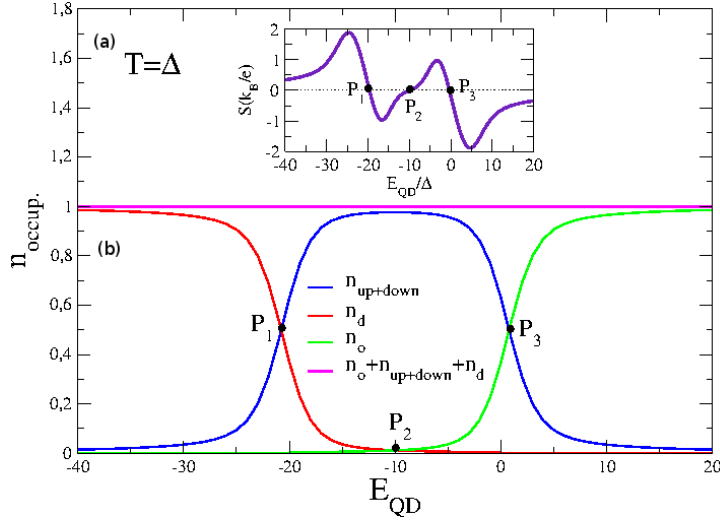


Figura 10: En (a) se muestra la termopotencia para la misma temperatura con los puntos P_1 , P_2 y P_3 señalados en ambas gráficas. (b) Números de ocupación n_{occup} : estado vacío n_0 , estados “up” (n_{up}) y “down” (n_{down}) y doble ocupación n_d en función de la energía E_{PC} para $T = \Delta$.

Kondo (ver figura. 7). La oscilación que aparece a la izquierda de P_2 es asociada al surgimiento del estado de doble ocupación que comienza a convertirse en un estado accesible para los electrones. Entre los puntos P_1 y P_2 la termopotencia es negativa porque hay una mayoría de estados con energía $E_{PC} + U$ que ahora son accesibles para los electrones (ver figura 11), lo que nuevamente genera valores de $S < 0$. Cuando se varía el voltaje E_{PC} hacia el lado izquierdo de P_1 , la doble ocupación tiende a ser completamente alcanzada, la entrada de electrones al PC disminuye y empieza a ser importante la contribución de los huecos ($S > 0$). Para valores de E_{PC} muy hacia la izquierda, alejados de P_1 , la termopotencia tiende a cero, pues al alcanzarse la doble ocupación en el PC se suprime la fluctuación de carga, la conductancia eléctrica G (ver figura 12) y la termopotencia S tienden a cero (figura 11). Los estados accesibles para los electrones se encuentran en el régimen de estado vacío y doble ocupación (inset figura 11). Alrededor de P_1 aparece una nueva oscilación análoga al punto P_3 , pero esta vez es asociada con los estados de doble ocupación. Entre los puntos P_1 y P_2 la termopotencia es negativa porque en esta región el número de estados de doble ocupación con energía $E_{PC} + U$ aumenta y los electrones pueden acceder y la termopotencia se vuelve negativa ($S < 0$). Al variar la energía E_{PC} hacia la izquierda del punto P_2 los estados de doble ocupación son iguales a los estados de simple ocupación y para los valores de E_{PC} de la izquierda de P_1 , la contribución de S proviene de los huecos y la termopotencia se vuelve positiva ($S > 0$).

En la figura 11 se muestra la termopotencia lineal en función del voltaje E_{PC} para diferentes valores de temperatura por encima de $T = \Delta$. En este régimen de temperatura la termopotencia y al figura térmica de mérito (ZT) adquieren valores altos lo cual es conveniente para la aplicación en sistemas de refrigeración y generadores de termopotencia. Se muestran fuertes variaciones de la termopotencia principalmente en las regiones de PC vacío y doble ocupación. Las dos oscilaciones al rededor de $E_{PC} = -10\Delta$ son asociadas a los procesos de fluctuación de carga vinculados con el cambio de los

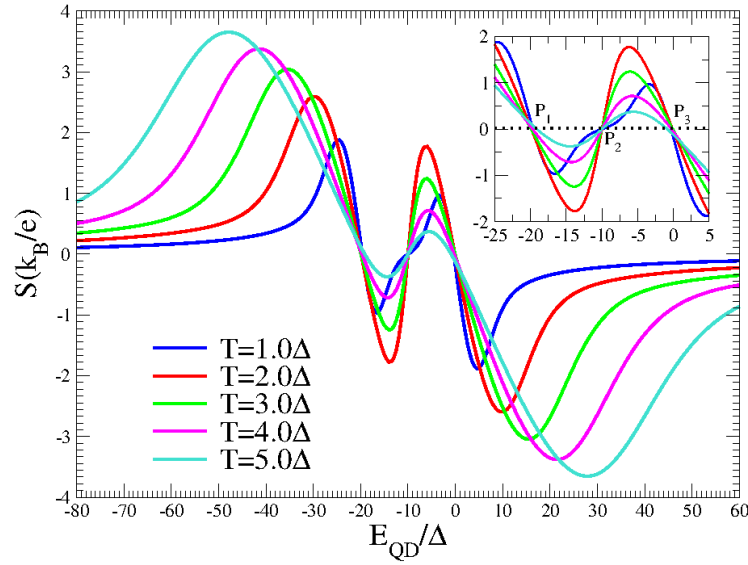


Figura 11: Termopotencia en función de la energía E_{PC} para valores de temperatura mayores a Δ .

números de ocupación. Todas las curvas para los diferentes valores de temperatura cruzan por el valor cero en la termopotencia ($S = 0$) en los mismos valores de energía: E_1 , E_2 y E_3 . Este tipo de oscilaciones fue observado recientemente por R. Scheibner *et al.* (figura 2b de la referencia [66]).

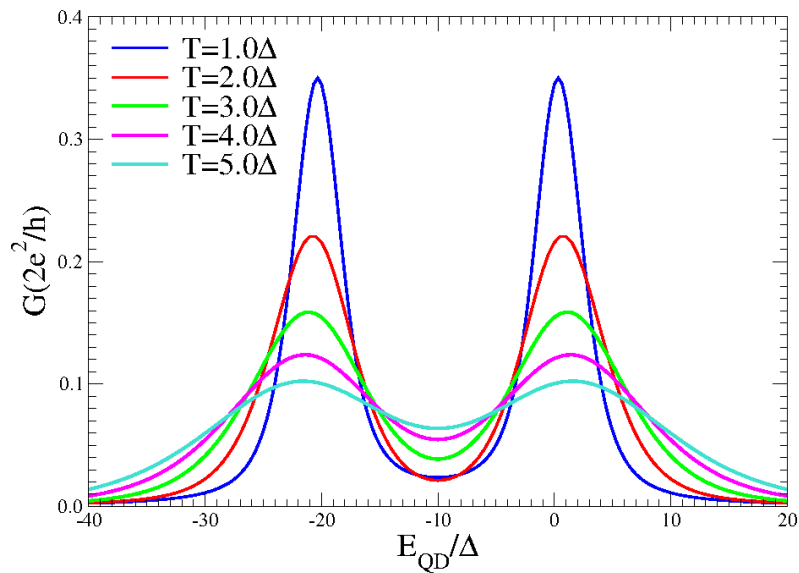


Figura 12: Conductancia eléctrica en función de la energía E_{PC} para valores de temperatura mayores a Δ .

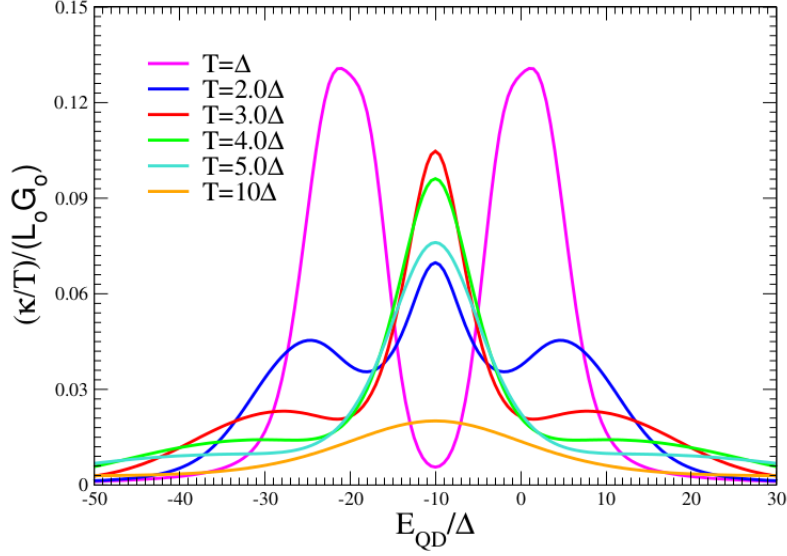


Figura 13: Conductancia térmica adimensional ($\frac{\kappa}{T}$) en función de la energía E_{PC} para valores de temperatura mayores a Δ .

En el rango de temperaturas $T = [1 - 10]\Delta$ la evolución de las conductancias eléctrica y térmica con la temperatura (figura 12 y 13), es similar al comportamiento mostrado en las conductancias a temperaturas $T > 10^{-1}\Delta$ (figuras 7 y 9). En la figura 13 se muestra la conductancia térmica adimensional en unidades de $L_0 G_0$ en función de la energía E_{PC} para valores de temperatura mayores a Δ . En el límite simétrico se presenta un pico debido al régimen de bloqueo de Coulomb. Inicialmente este pico aumenta con la temperatura hasta el valor de temperatura $T = 3\Delta$, donde obtiene el pico central más alto, al seguir aumentando la temperatura este pico disminuye. Un resultado similar a este fue obtenido por R. Świrkowicz *et al.* [30] para un sistema de un PC conectado a conductores ferromagnéticos. El origen de este comportamiento se debe a que los electrones contribuyen a la conductancias de carga y calor diferencialmente. Para la conductancia eléctrica la energía de tunelamiento de los electrones o huecos es irrelevante, pero para la conductancia térmica determina el comportamiento mostrado en la figura 13.

En la figura 14 se muestra la ley de Wiedemann-Franz normalizada al número de Lorenz \mathcal{L}_0 , descrita por la expresión

$$W = \frac{\mathcal{L}}{\mathcal{L}_0} = \frac{\kappa}{TG} \left(\frac{3}{\pi^2} \right) \left(\frac{e}{k_B} \right)^2.$$

Se obtienen valores de W en función de la energía E_{PC} para diferentes valores de temperaturas. A bajas temperaturas se puede ver que W siempre se satisface. Pero para altas temperaturas esta ley ya no es válida. En el inset de 14 se muestra la desviación estándar δ del valor W dado por la ecuación (54) se incrementa con la temperatura.

$$\delta = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^N (W - 1)^2}{N - 1}}. \quad (55)$$

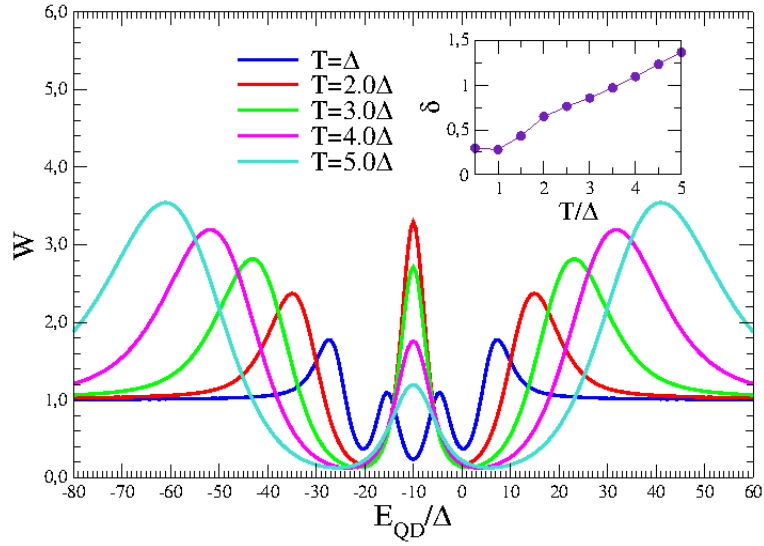


Figura 14: Ley de Wiedemann Franz para el sistema de punto cuántico inmerso

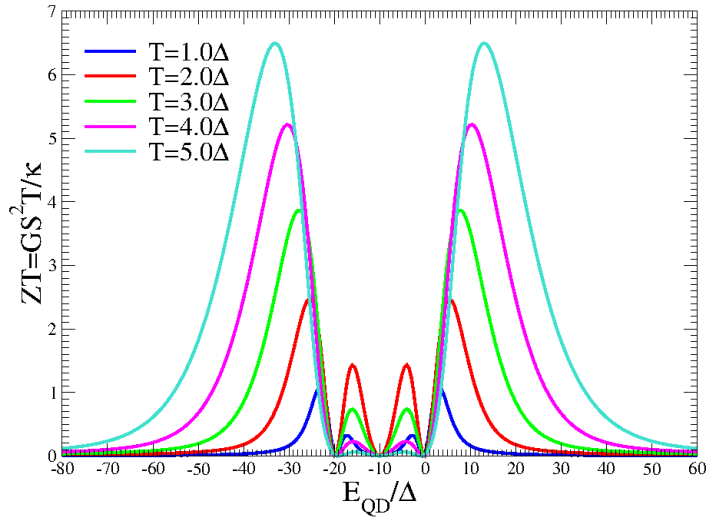


Figura 15: Producto entre la figura de mérito y la temperatura en función de la energía E_{PC} del punto cuántico para altas temperaturas.

En 55 N es el número de puntos considerados en el cálculo numérico. Esta desviación δ se incrementa conforme aumenta la temperatura. La importancia de este detalle es que asocia la violación de la LWF con el incremento de la figura térmica de mérito ZT , como se presenta en la figura 15 y es también discutido en literatura reciente por otros autores [5, 22, 70]. En la figura 15 se muestra ZT en función de E_{PC} para diferentes temperaturas. A bajas temperaturas el sistema tiene una pobre eficiencia en todos los regímenes, pero para temperaturas del orden de $T \simeq \Delta$, en las regiones de fuerte

fluctuación de carga, tanto en la transición del régimen de PC vacío a valencia intermedia como para la transición del régimen Kondo a doble ocupación ZT alcanza valores elevados. El TSE en estas regiones muestra un buen potencial para ser empleado o implementado en aplicaciones tecnológicas. Similares conclusiones se obtuvieron en un trabajo previo, empleando una aproximación tipo campo medio para tratar los efectos asociados a la correlación electrónica [52].

Punto cuántico acoplado lateralmente a un hilo cuántico

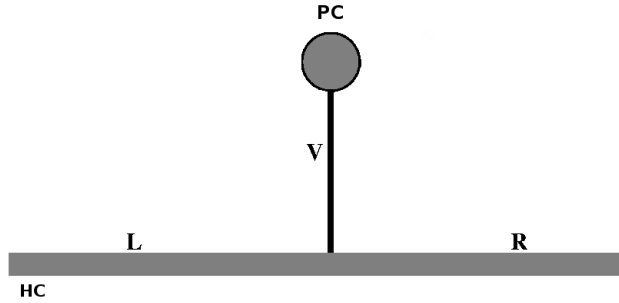


Figura 16: Esquema de un punto cuántico (PC) acoplado lateralmente a un hilo cuántico (HC) modelado como un canal balístico.

El sistema consiste en un punto cuántico acoplado lateralmente a un hilo cuántico con un potencial de hibridación V_1 entre el PC y el HC y el hilo cuántico con un potencial V como se muestra en la figura 16.

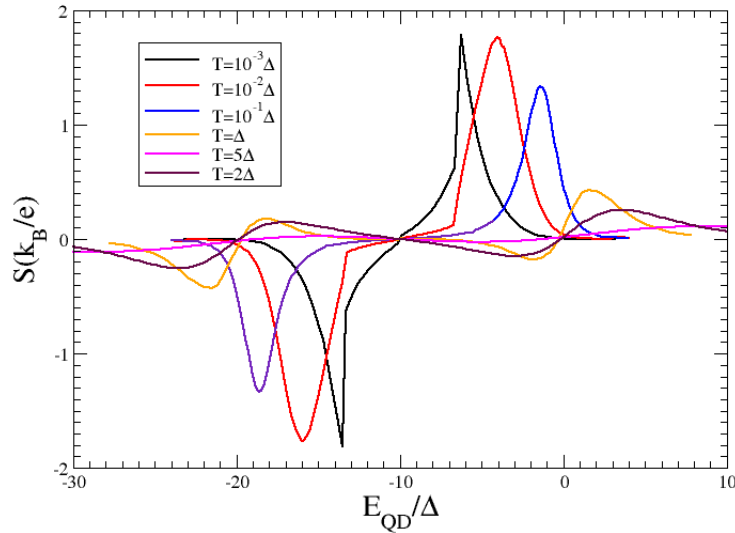


Figura 17: Termopotencia (S) vs Energía del punto cuántico (E_{PC}) acoplado lateralmente a un PC .

En la figura 17 se presenta la termopotencia lineal S en función del voltaje “gate” representado por la energía del PC (E_{PC}) para diferentes temperaturas. De igual forma que para el caso del TSE, S tiene un comportamiento oscilatorio característico similar al caso del PC inmerso, pero en este caso hay un cambio de signo a bajas temperaturas, lo cual es consecuencia del carácter Fano antirresonante del sistema, asociado a la presencia de un canal resonante asociado al PC y un canal no resonante asociado al hilo cuántico (HC) para el transporte electrónico. Este carácter antirresonante

se manifiesta como pequeños *picos* en la densidad de estados asociados a la función de Green local del *PC* en el régimen Kondo y a las condiciones de fluctuación de carga en el *PC* [19], originando un mínimo en el coeficiente de transmisión $\tau_\sigma(\omega)$ y en la conductancias eléctrica (G) y térmica (κ) a bajas temperaturas en el régimen Kondo [9, 42, 50].

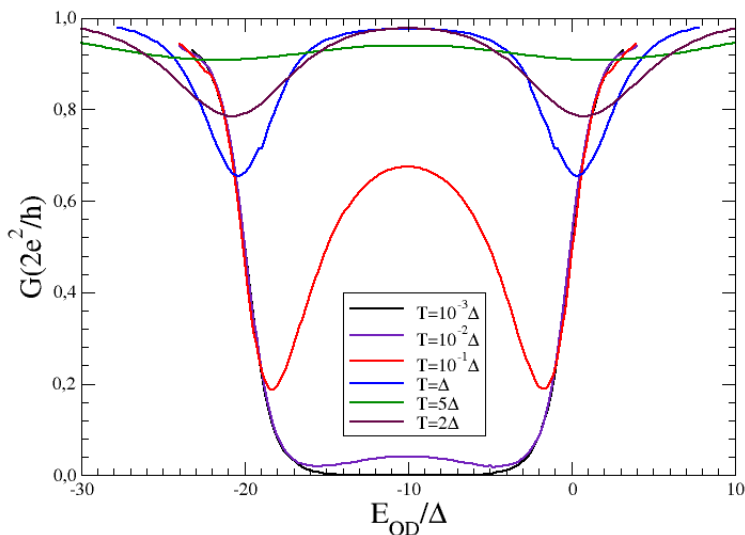


Figura 18: Conductancia eléctrica por temperatura vs Energía del *PC* acoplado lateralmente a un *HC*.

En la figura 18 se muestra la conductancia eléctrica (G) en función de la energía E_{PC} a diferentes temperaturas. Para bajas temperaturas ($T < \Delta$) es evidente una meseta en el valor mínimo de $G(0,0)$ alrededor del límite simétrico $E_{PC} = -U/2 = -10\Delta$, que es como un sello del efecto Kondo en la conductancia eléctrica para esta configuración [9, 42, 50]. Se debe tener en cuenta que para este caso el efecto Kondo es asociado a procesos de interferencia cuántica destructiva, vinculados al carácter Fano antirresonante del sistema, lo que origina la destrucción de la conductancia eléctrica y el transporte térmico a través del sistema en el régimen Kondo a bajas temperaturas. A temperaturas intermedias, son evidentes dos mínimos alrededor de las regiones donde existen fuertes fluctuaciones de carga en el *PC*. Cuando entra un electrón genera el mínimo de la derecha (figura 18) y cuando entra el segundo electrón al *PC* genera el mínimo de la izquierda (figura 18). Los máximos presentes entre los mínimos son consecuencia de la competición entre varios procesos de tunelamiento, incluyendo el efecto Kondo que tiene la característica de ser mediado por los estados cuánticos y el tunelamiento secuencial, que está ligado a la diferencia de energía requerida para agregar el segundo electrón en el *PC* (Bloqueo de Coulomb U) [59, 60]. Cuando la temperatura aumenta por encima de la temperatura Kondo (T_K) el efecto Kondo desaparece y con él los procesos de cotunelamiento ligados a los cambios de orientación del espín (“spin-flip”). El tunelamiento resonante y el bloqueo de Coulomb son responsables del mínimo generado en G , mientras que el valor no unitario entre los mínimos se relaciona directamente con los procesos de cotunelamiento que no desaparecen con el aumento en la temperatura. Estos resultados son similares a los obtenidos por Yoshida *et al.* [74] usando GRN para este mismo sistema, y también con los obtenidos para un sistema cualitativamente similar de impurezas magnéticas diluidas inmersas en un canal de conducción, estudiado por Costi *et al.* empleando GRN [9].

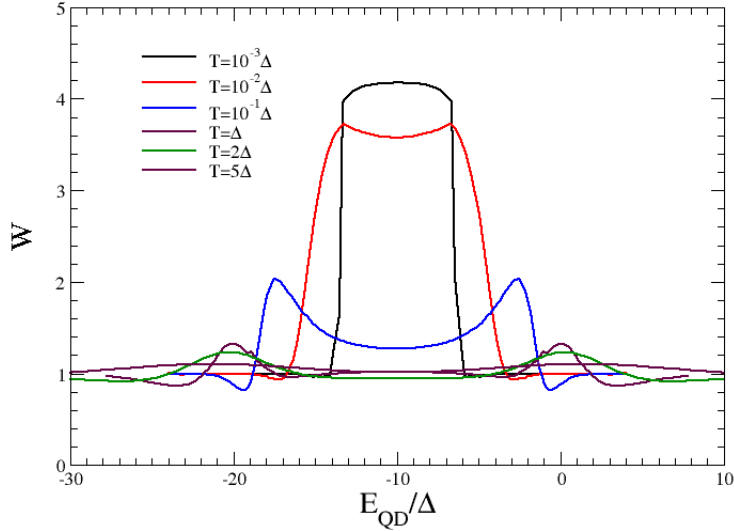


Figura 19: Ley de Wiedemann Franz (LWF) vs Energía del (PC) acoplado lateralmente a un HC .

En la figura 19 se presentan los resultados para W en función de E_{PC} , para diferentes temperaturas. Como es de esperarse los valores para bajas temperaturas son cercanos a la unidad en todos los regímenes del sistema excepto el régimen Kondo debido a la interacción de muchos cuerpos en el PC , que altera el carácter líquido de Fermi del sistema. Para altas temperaturas la LWF no es válida y las curvas resultantes en la figura 19 son de valores mayores a la unidad.

Recientemente se han encontrado resultados que violan esta ley [70], el cual se debe al efecto Fano–antiresonante asociado a la existencia de al menos dos canales de conducción, uno resonante y otro no resonante. Como se mencionó anteriormente, la violación de la LWF se vincula al incremento del producto entre la figura térmica de mérito y la temperatura (ZT), en particular, la literatura reporta recientemente el caso de una “molécula” de dos PC s acoplados en paralelo sin correlación electrónica en los PC s [22]. El sistema consta de un solo canal resonante (en el PC) y un canal no resonante (en el HC). El efecto antiresonante se manifiesta en el valor mínimo para la conductancia G donde están presentes fluctuaciones de carga en el PC , mostrando una violación de la LWF en el régimen Kondo a bajas temperaturas, con valores altos de ZT obtenidos en los “límites” del régimen Kondo a bajas temperaturas, cerca al inicio de la región de las fluctuaciones de carga en el PC , esto es: en las transiciones entre los regímenes de PC vacío a Kondo y de Kondo a doble ocupación. Nuestros resultados están cualitativamente de acuerdo a los obtenidos por G. Gómez-Silva *et al.* [22] teniendo en cuenta que en nuestro caso se tiene una fuerte correlación electrónica en el PC y la violación de LWF en este caso se debe a la interacción de muchos cuerpos en el PC para el régimen Kondo a bajas temperaturas.

En la figura 20 se muestra el comportamiento de ZT en función de la energía del PC (E_{PC}) para diferentes valores de temperatura; es evidente que para altas temperaturas el sistema presenta una pobre eficiencia en todos los regímenes, pero a bajas temperaturas $T \sim 10^{-3}$, en los límites del régimen Kondo: $E_{PC} \sim 3U/4$ (pico de la izquierda), el valor de ZT es cercano a la unidad, de igual forma que para $E_{PC} \sim U/4$ (pico de la derecha) ($ZT \sim 0,8$). Este resultado es complementario al obtenido en el

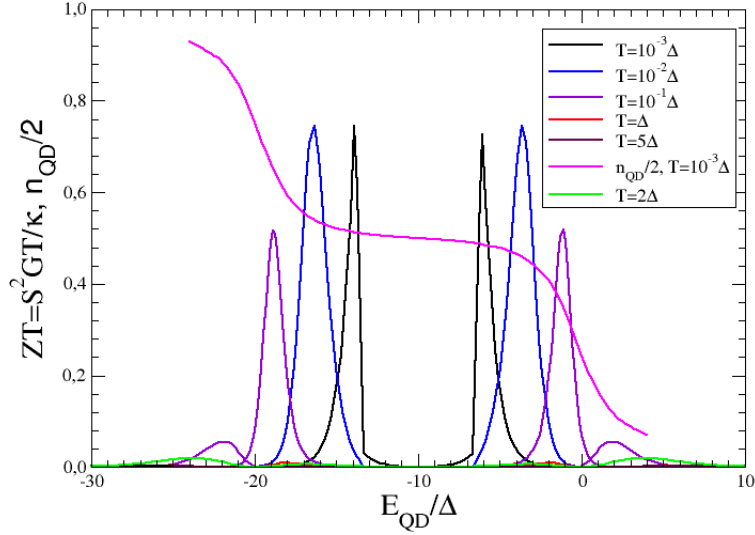


Figura 20: Figura térmica de mérito en función de la energía del punto cuántico (E_{PC}) para diferentes valores de temperatura para el caso acoplado lateralmente al nanohilo. La curva violeta corresponde al número de ocupación en el nanotubo normalizado a la mitad. En este grafico se observa que los valores máximos en ZT se encuentran en los límites de la región Kondo.

caso de un PC inmerso en un HC , donde los valores de ZT aumenta con la temperatura (figura 15). En la transición entre el PC vacío y el régimen Kondo se encuentra un máximo en esta configuración. En la configuración del PC inmerso se obtiene un mínimo en ZT . En la curva que representa el número de ocupación (n_{QD}) en el PC para $T = 10^{-3}\delta$ se encuentra que los valores máximos en ZT se encuentran justo cuando el número de ocupación tiene un valor de 1, donde la curva n_{QD} es más o menos plana. Es decir que los valores máximos en ZT se encuentran en la región de bajas fluctuaciones de carga.

Punto cuántico acoplado lateralmente a un Nanotubo de carbono *zig-zag* de pared simple (*NTCPS*)

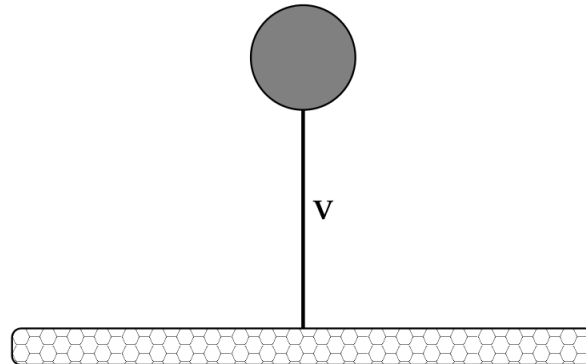


Figura 21: Esquema del punto cuántico acoplado lateralmente a un nanotubo de carbono de pared simple *zig-zag* (*NTCPS*). V es la hibridación entre el nanotubo y el punto cuántico.

Los nanotubos de Carbono de pared simple (*NTCPS*) pueden ser descritos como una o varias láminas de grafeno enrolladas formando un cilindro obteniéndose estructuras unidimensionales de simetría axial. Estos materiales presentan interesantes propiedades mecánicas, eléctricas y térmicas al ser comparadas con otros materiales, de allí el interés de investigadores por estudiar estos materiales.

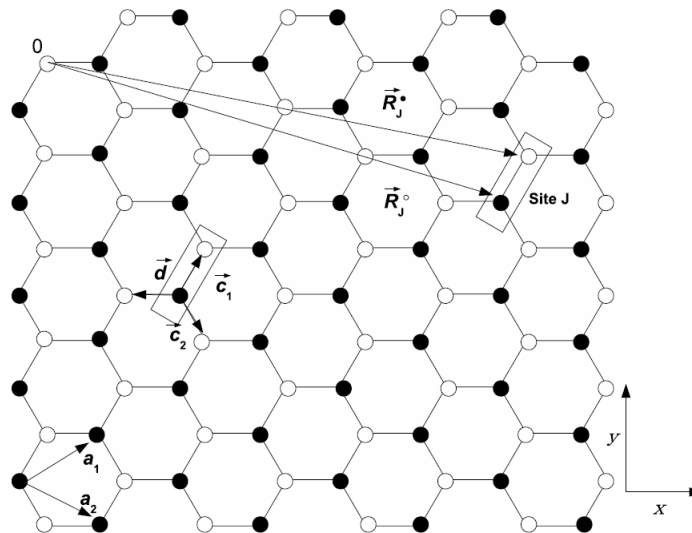


Figura 22: Parámetros de red de una lámina de grafeno con sus respectivos vectores unitarios. Presenta simetría traslacional de dos átomos (círculos blanco y negro).

Los nanotubos de carbono son altamente resistentes en función de la tensión alcanzando los $63GPa$ un valor muy alto comparado con los $1,2GPa$ que presenta el acero rico en carbono. En cuanto a la elasticidad, alcanza valores cercanos a $1TPa$ debido al enlace sp^2 formado entre los átomos de carbono [69].

La forma de enrollar la lámina (quiralidad) está determinada por los índices (n, m) , llamado el vector quiral. Estos números n y m son números enteros que indican el número de vectores unitarios (\vec{a}_1 y \vec{a}_2) a lo largo de dos direcciones de la red hexagonal (ver figura 22). En el caso que $m = 0$ se dice que los nanotubos son llamados *zig-zag*, si $m = n$ son *armchair* (brazo de silla) y en los demás casos son llamados *chiral* (quirales). En particular los nanotubos de pared simple *zig-zag* se presentan importantes propiedades eléctricas que no se encuentran en los nanotubos multicapa.

Cálculo de Funciones de Green para el NTCPS

En esta sección presentamos el cálculo analítico de las FG de un nanotubo de Carbono de pared simple de tipo *zig-zag*. El hamiltoniano que describe el enlace fuerte para la red de una hoja de grafeno que contiene $2N$ átomos de Carbono es de la forma

$$\mathbb{H} = \sum_j^N (|j, \bullet\rangle t \langle j, \circ| + |j, \circ\rangle t \langle j, \bullet|) + \sum_{j,j'}^N (|j, \bullet\rangle t \langle j', \circ| + |j, \circ\rangle t \langle j', \bullet|) \quad (56)$$

t corresponde a la integral de transferencia de electrones entre un átomo \bullet y un átomo \circ de un mismo sitio o entre sitios vecinos. Escogemos como base, un sitio que contiene dos átomos, uno \bullet y otro \circ , de esta forma tenemos una simetría traslacional en la red. Haciendo la transformada de Fourier en la base $|j, \otimes\rangle$, donde $\otimes = \bullet, \circ$.

$$|j, \otimes\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_j^{\otimes}} |\mathbf{k}, \otimes\rangle \quad (57)$$

$$\langle j, \bullet | \mathbf{k}, \bullet \rangle = \frac{e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_j^{\bullet}}}{\sqrt{N}}; \quad \langle j, \circ | \mathbf{k}, \circ \rangle = \frac{e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_j^{\circ}}}{\sqrt{N}} \quad (58)$$

reemplazando (57) en (56) se obtiene:

$$\begin{aligned} \mathbb{H} = & \frac{t}{N} \sum_{\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{R}_j^{\bullet}-\mathbf{R}_j^{\circ})} |\mathbf{k}, \bullet\rangle \langle \mathbf{k}, \circ| + \frac{t}{N} \sum_{\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{R}_j^{\circ}-\mathbf{R}_j^{\bullet})} |\mathbf{k}, \circ\rangle \langle \mathbf{k}, \bullet| + \\ & \frac{t}{N} \sum_{\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{R}_j^{\bullet}-\mathbf{R}_{j'}^{\circ})} |\mathbf{k}, \bullet\rangle \langle \mathbf{k}, \circ| + \frac{t}{N} \sum_{\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{R}_{j'}^{\circ}-\mathbf{R}_j^{\bullet})} |\mathbf{k}, \circ\rangle \langle \mathbf{k}, \bullet|. \end{aligned} \quad (59)$$

En la figura 22 se identifican los vectores \vec{c}_1 , \vec{c}_2 y \vec{d} :

$$\begin{aligned} \vec{c}_1 &= \vec{R}_j^{\circ} - \vec{R}_j^{\bullet}, \\ \vec{c}_2 &= \vec{R}_j^{\circ} - \vec{R}_{j'}^{\bullet}, \\ \vec{d} &= \vec{R}_j^{\circ} - \vec{R}_{j''}^{\bullet}. \end{aligned} \quad (60)$$

La representación en coordenadas cartesianas de estos vectores y de los vectores unitarios \vec{a}_1 y \vec{a}_2 , teniendo en cuenta el parámetro de red a , se escriben como sigue (ver figura 23):

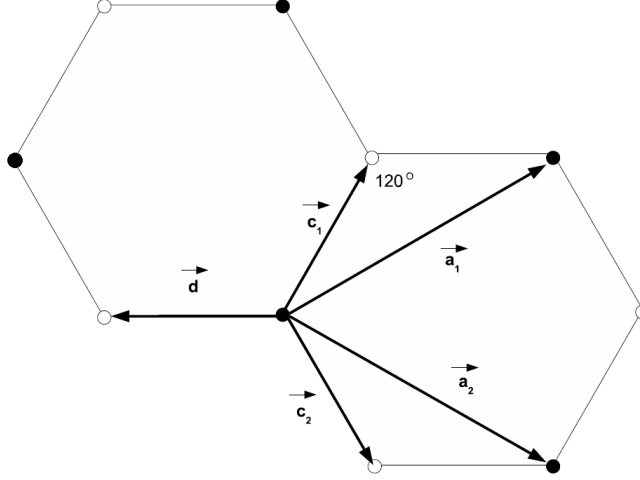


Figura 23: Vectores de la red \vec{c}_1 , \vec{c}_2 y \vec{d} en función de los vectores de la red real \vec{a} .

$$\begin{aligned}
 \vec{c}_1 &= \left(\frac{a}{2\sqrt{3}}, \frac{a}{2} \right), \\
 \vec{c}_2 &= \left(\frac{a}{2\sqrt{3}}, -\frac{a}{2} \right), \\
 \vec{d} &= \left(-\frac{a}{\sqrt{3}}, 0 \right),
 \end{aligned} \tag{61}$$

$$\begin{aligned}
 \vec{a}_1 &= \left(\frac{a\sqrt{3}}{2}, \frac{a}{2} \right), \\
 \vec{a}_2 &= \left(\frac{a\sqrt{3}}{2}, -\frac{a}{2} \right).
 \end{aligned} \tag{62}$$

Los vectores en el espacio recíproco se pueden calcular a partir de los vectores unitarios en el espacio real

$$\begin{aligned}
 \vec{b}_1 &= \left(\frac{2\pi}{a\sqrt{3}}, \frac{2\pi}{a} \right), \\
 \vec{b}_2 &= \left(\frac{2\pi}{a\sqrt{3}}, -\frac{2\pi}{a} \right).
 \end{aligned} \tag{63}$$

Con las ecuaciones (61), (62) y (63) en el hamiltoniano (59) se obtiene

$$\mathbb{H} = t \left(2e^{-ik_x \frac{a}{2\sqrt{3}}} \cos\left(\frac{k_y a}{2}\right) + e^{ik_x \frac{a}{\sqrt{3}}} \right) [|\mathbf{k}, \bullet\rangle \langle \mathbf{k}, \circ| + |\mathbf{k}, \circ\rangle \langle \mathbf{k}, \bullet|], \tag{64}$$

este hamiltoniano no es diagonal en la base $|\mathbf{k}, \otimes\rangle$, por lo tanto realizamos el siguiente cambio para diagonalizar este hamiltoniano:

$$|\mathbf{k}, \pm\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\mathbf{k}, \bullet\rangle + |\mathbf{k}, \circ\rangle) \tag{65}$$

calculando el valor esperado

$$\begin{array}{cc} & |\mathbf{k}, +\rangle & |\mathbf{k}, -\rangle \\ \langle \mathbf{k}, +| & h_0 & 0 \\ \langle \mathbf{k}, -| & 0 & h_0 \end{array} \quad (66)$$

usando las condiciones de contorno en k y p y calculando los autovalores se puede obtener la relación de dispersión para el nanotubo *zig-zag* de pared simple.

$$E_{\pm}^a(\mathbf{k}) = \pm \gamma_0 \sqrt{1 + 4 \cos^2 \left(\frac{\pi p}{n} \right) + 4 \cos \left(\frac{\sqrt{3}ka}{2} \right) \cos \left(\frac{\pi p}{n} \right)}, \quad (67)$$

en donde γ_0 es la energía de “hopping” de los átomos de carbono en el nanotubo, $p = 1, \dots, 2n$ y $-\frac{\pi}{\sqrt{3}} < ka < \frac{\pi}{\sqrt{3}}$. Siempre y cuando el parámetro n sea múltiplo de tres el nanotubo es metálico.

De la relación de dispersión (67) y usando la definición

$$G(E) = \sum_{\mathbf{k}} \left[\frac{|\mathbf{k}, +\rangle \langle \mathbf{k}, +|}{E - E_+^a(\mathbf{k})} + \frac{|\mathbf{k}, -\rangle \langle \mathbf{k}, -|}{E - E_-^a(\mathbf{k})} \right], \quad (68)$$

se calcula el elemento de matriz $\langle j, \bullet | G(E) | j', \bullet \rangle$ para calcular la FG del nanotubo

$$\langle j, \sigma | G(E) | j', \bullet \rangle = \sum_{\mathbf{k}} \left[\frac{\langle j, \bullet | \mathbf{k}, + \rangle \langle \mathbf{k}, + | j', \bullet \rangle}{E - E_+^a(\mathbf{k})} + \frac{\langle j, \bullet | \mathbf{k}, - \rangle \langle \mathbf{k}, - | j', \bullet \rangle}{E - E_-^a(\mathbf{k})} \right] \quad (69)$$

con

$$|\mathbf{k}, \pm\rangle = \frac{a}{\sqrt{2N}} \sum_{jj'} \left(e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_j^*} |j, \bullet\rangle \pm e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_{j'}^*} |j, \sigma'\rangle \right) \quad (70)$$

$$\langle j, \bullet | G(E) | j', \bullet \rangle = \sum_{\mathbf{k}} \frac{E}{N} \frac{e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{R}_j^* - \mathbf{R}_{j'}^*)}}{E^2 + (E_+^a)^2(\mathbf{k})} \quad (71)$$

N corresponde a la cantidad de sitios de la red de grafeno, es decir la mitad del número total de átomos de Carbono. Integrando sobre la primera zona de Brillouin. Los límites de la integración dependen de los valores n y m del nanotubo, para el caso del nanotubo de *zig-zag* $n = m$, (n, n) , este puede ser representado por una hoja de grafeno enrollado en el eje \hat{y} . De esta forma k_x queda cuantizado, usando la ecuación (63)

$$k_x = \frac{2\pi}{a\sqrt{3}} \frac{m}{n} \quad (72)$$

k_x representa la condición de contorno. Así la integral de $\langle j, \bullet | G(E) | j', \bullet \rangle$ queda descrita por

$$\langle j, \bullet | G(E) | j', \bullet \rangle = \frac{1}{2n} \sum_m \frac{a}{2\pi} \int_{-\frac{\pi}{a}}^{\frac{\pi}{a}} dk_y \frac{E e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{R}_j^* - \mathbf{R}_{j'}^*)}}{E^2 - (E_+^a(\mathbf{k}))^2}, \quad (73)$$

la integración se realiza por polos y residuos. Después de estos cálculos que no se hacen explícitos, se obtiene que la FG para el nanotubo $G_{jj'}^c$

$$G_{jj'}^c = \frac{i}{2n\gamma_0^2} \sum_{j,j'} \frac{E e^{ik_x(x_j - x_{j'})} e^{i\frac{2\pi j}{na}(y_j - y_{j'})}}{\sin \left(\frac{\sqrt{3}k_x a}{2} \right) \cos \left(\frac{j\pi}{n} \right)} \quad (74)$$

Esta FG del nanotubo se reemplaza en la ecuación (52) para el cálculo de la FG local. Para nuestros cálculos tomamos $n = 3$, $P = 1, \dots, 2n$, $-\frac{\pi}{\sqrt{3}} < ka < \frac{\pi}{\sqrt{3}}$ y $\gamma = 2,7$ donde se obtienen los siguientes resultados.

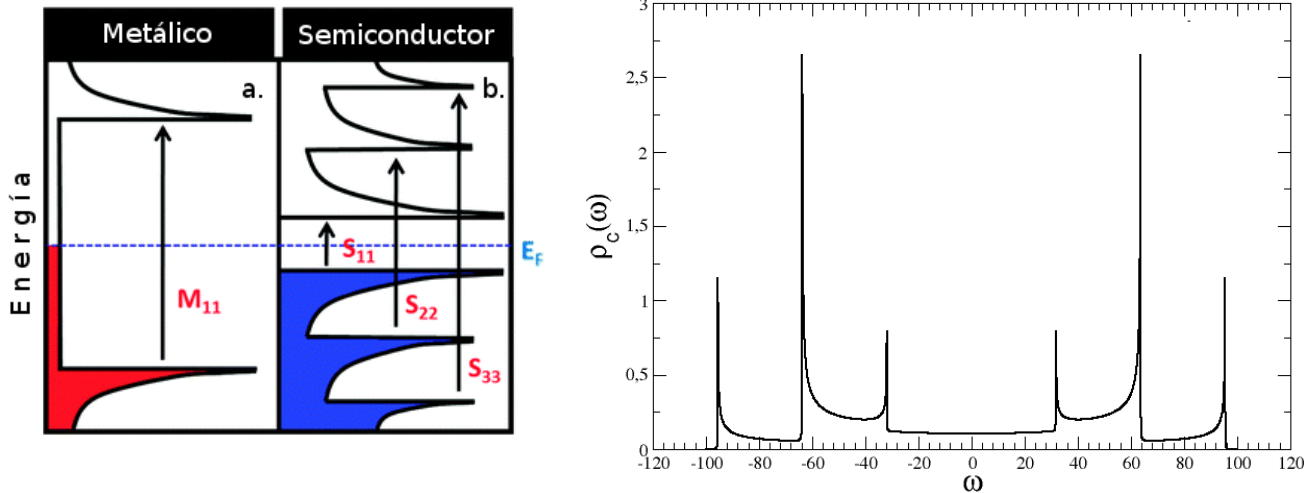


Figura 24: Izq: Densidad de estados para un nanotubo de carbono de pared simple metálico (a.) y semiconductor (b.). M_{11} corresponde al espacio entre las dos primeras singularidades de Van Hove simétricas a la energía de Fermi E_F en un nanotubo metálico. S_{11} es la brecha de energía de un nanotubo semiconductor, S_{22} y S_{33} son las distancias de energía entre las siguientes singularidades simétricas a la E_F . Der: Densidad de estados para un nanotubo *zig-zag* de pared simple con un diámetro $D = 100$ y $n = 3$ con sus respectivas singularidades de Van Hove.

En la figura 24 se muestra las densidad de estados para un nanotubo metálico y un nanotubo semiconductor (Izq.). Para un nanotubo metálico la densidad de estados aunque presenta una banda gap (M_{11}) la densidad de estados nunca es cero. A diferencia con la densidad de estados de un nanotubo semiconductor que presenta separaciones entre los picos en la densidad de estados (S_{11} , S_{22} y S_{33}), el valor de la energía gap S_{11} es la que determina el carácter semiconductor del nanotubo. La gráfica de la derecha (Der.) representa la densidad de estados obtenida para el nanotubo *zig-zag* de pared simple a partir de la relación de dispersión de la ecuación (67) que corresponde a un nanotubo metálico figura 24. Los picos agudos presentes en la densidad de estados son llamados singularidades de Van Hove y son simétricos entorno a la energía de Fermi (en nuestro caso $\omega = 0$).

En la figura 25 se muestra la conductancia eléctrica G a bajas temperaturas. Para $T = 10^{-3}\Delta$ hay un valle en torno al valor al límite simétrico de energía $E_{PC} = -10\Delta$ entre las regiones de simple hasta doble ocupación, como una señal de la existencia del efecto Kondo en la conductancia a bajas temperaturas. En el sistema de un *PC* inmerso en un *HC* este efecto se muestra como una meseta con el valor máximo en la conductancia (figura 7) y para un *PC* acoplado lateralmente presenta un valle mínimo en la conductancia G en torno al límite simétrico (ver figura 18) [9, 13, 42, 74]. Al aumentar

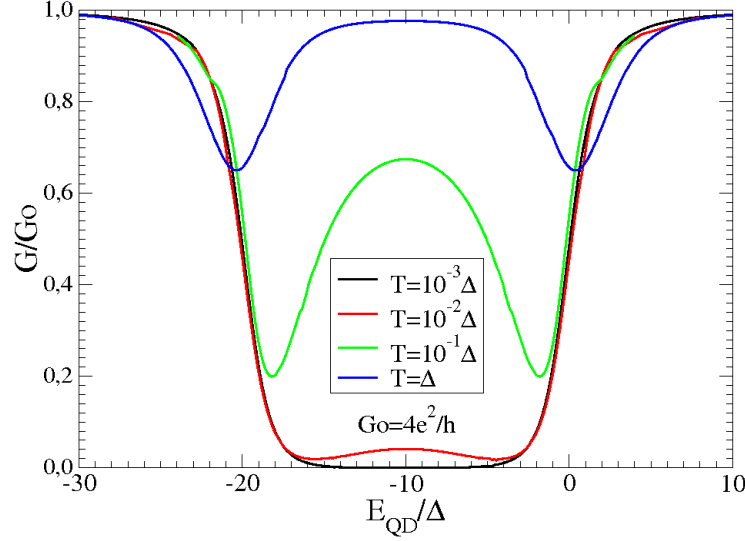


Figura 25: Conductancia eléctrica para un *PC* acoplado lateralmente a un nanotubo de Carbono de pared simple en función de la E_{PC} . G es normalizada al valor $G_0 = \frac{4e^2}{h}$, que corresponde al doble del valor G_0 en el *PC* acoplado lateralmente a un *HC*. Esto se debe a la degeneración de los procesos de dispersión presentes en el nanotubo.

la temperatura hasta el orden de $T = \Delta$ la conductancia G presenta un aumento hasta un máximo G/G_0 , dejando dos mínimos justo en la región donde entra el primer electrón (pico de la derecha) y en la región donde entra el segundo electrón (pico de la izquierda). Este máximo al aumentar la temperatura es una consecuencia de la competencia entre repulsión de Coulomb y el efecto Kondo. Este resultado indica que esta estructura no es favorable para la conductancia G a bajas temperaturas y que su comportamiento es inverso al caso de *PC* inmerso en un *HC*, es decir: en las regiones donde la conductancia G es mínima formando un valle para el *PC* acoplado lateralmente al nanotubo o a un *HC*, para el *PC* inmerso en un *HC* se obtiene un máximo en forma de meseta. En estructuras de *PCs* reales, como se mencionó previamente, el régimen Kondo se alcanza a temperaturas $T \sim 10mK$ [3, 25] para el caso de un *PC* inmerso en un *HC*, lo que nos indica que $\Delta \sim 10K$. En este estudio, este régimen se alcanza a una temperatura de $T = 10^{-3}\Delta$. A temperaturas mayores a $T = \Delta$ el efecto Kondo desaparece y el bloqueo de Coulomb es el responsable de altos valores en las conductancias eléctrica G y térmica κ .

En la figura 26 se muestra el valor de la conductancia térmica (κ) normalizada al valor $\frac{3e^2}{\pi^2 T}$, donde muestra un comportamiento similar al encontrado en la conductancia eléctrica G (figura 25). Se generan mínimos cerca a las regiones de fuerte fluctuación de carga a medida que aumenta la temperatura. Para $T = 10^{-3}\Delta$ se presenta un valle mínimo en la conductancia κ de igual manera que en G . Para $T = \Delta$ se presentan pequeñas oscilaciones en torno a las regiones de fuerte fluctuación de carga, evidentes en la transición desde el régimen del *PC* vacío al de ocupación simple (oscilación de la derecha) y en la transición del régimen de ocupación simple al de doble ocupación (oscilación de la izquierda). Estos resultados están en concordancia con los obtenidos usando teoría de Grupo de Renormalización (GRN) para sistemas similares [9, 74].

En la figura 27 se encuentran los resultados para la termopotencia lineal S . Este comportamiento es una manifestación de la simetría partícula-hueco asociada con la competición entre los diferentes portadores de carga en el *PC*. La oscilación de la derecha es asociada con el régimen de valencia

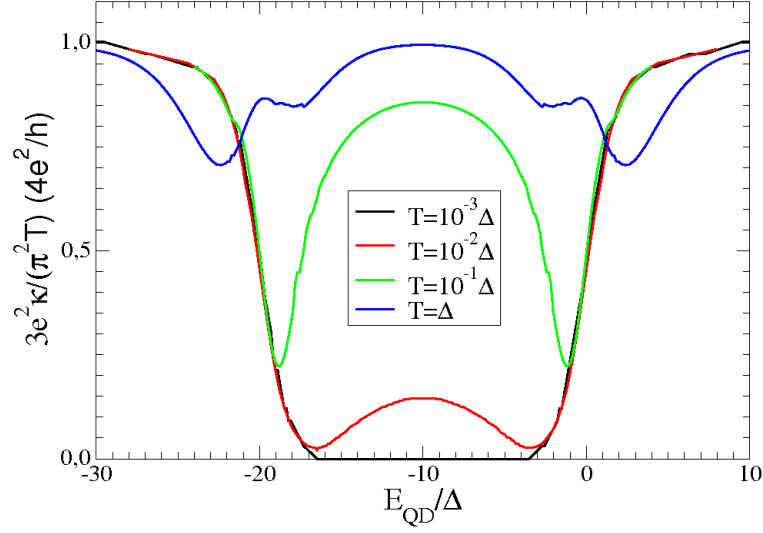


Figura 26: Conductancia térmica κ multiplicada por $\frac{3e^2}{\pi^2 T}$ en función de la energía del PC (E_{PC}).

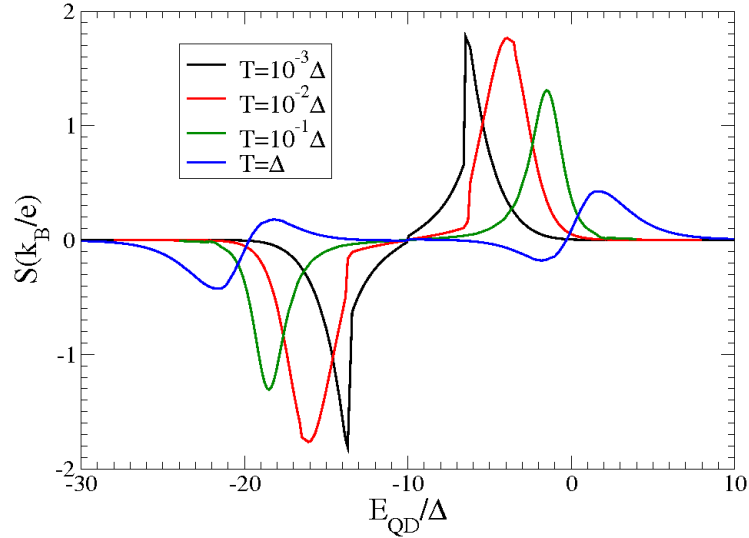


Figura 27: Termopotencia lineal $S\left(\frac{k_B}{e}\right)$ para un PC acoplado lateralmente a un nanotubo de carbono de pared simple en función de la energía del PC (E_{PC})

intermediaria, mientras la oscilación de la izquierda está asociada con la transición desde el régimen de simple al régimen de doble ocupación en el PC . El punto simétrico $E_{PC} = -10\Delta$ corresponde a la zona de no fluctuación de carga. En esta zona solo existe fluctuación de espín, lo cual es una firma del efecto Kondo y en donde la termopotencia tiene valor nulo ($S = 0,0$), debido a estar en torno al punto simétrico y al efecto dipolar.

En la figura 28 se reporta el comportamiento de la ley de Wiedemann-Franz a bajas temperaturas. Para temperaturas cercanas a $T = \Delta$ surgen dos picos justo en las zonas que presentan fuerte fluctuación de carga. Para temperaturas por debajo de $T = \Delta$, el valor de la ley de Wiedemann-Franz aumenta hasta su máximo valor $(4,0)$ lo cual es una consecuencia de la fuerte correlación del sistema en el régimen Kondo, donde la estructura pierde el carácter de líquido de Fermi y en consecuencia la

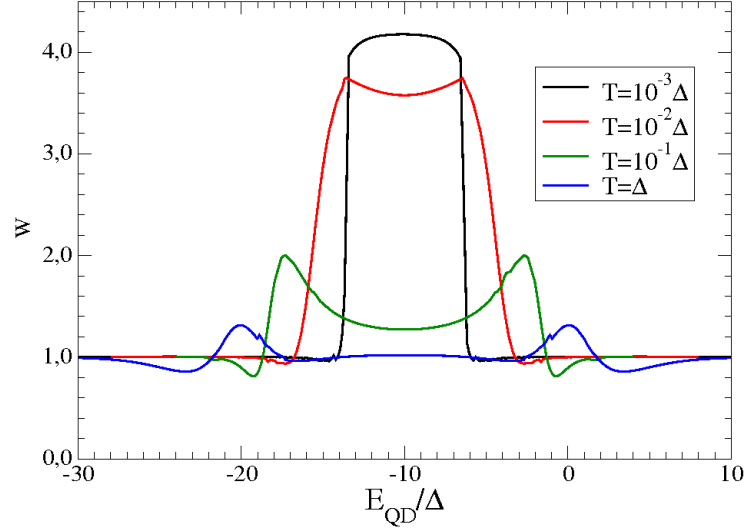


Figura 28: Ley de Wiedemann-Franz W en función de la energía del PC (E_{PC}).

ley de Wiedemann-Franz no es válida.

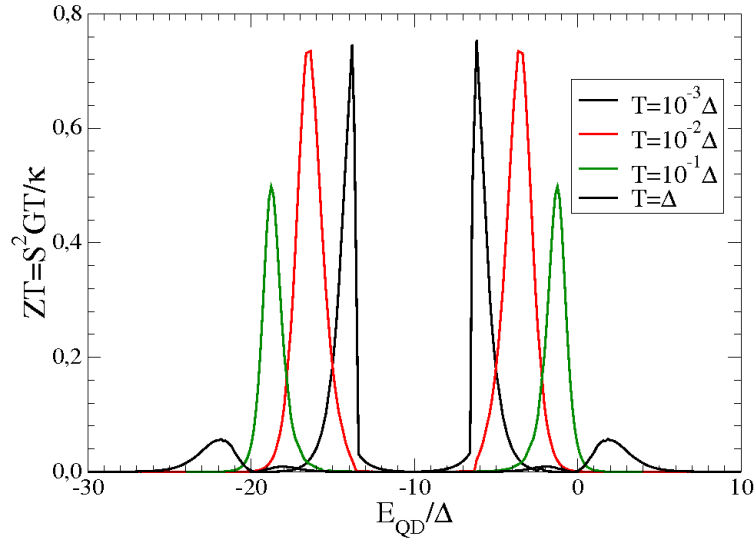


Figura 29: Figura térmica de mérito por temperatura (ZT) en función de la energía del PC (E_{PC}).

La eficiencia térmica de la nanoestructura de un PC acoplado lateralmente a un nanotubo de carbono se muestra en la figura 29. Se puede observar que los mejores parámetros para usar esta nanoestructura como dispositivo de refrigeración térmica o generador de termopotencia son aquellos que se encuentran cerca a la zona de fuerte fluctuaciones de carga a bajas temperaturas. Se presentan dos picos simétricos alrededor de la energía del punto cuántico $E_{PC} = -10\Delta$ para cada valor de temperatura. Para los valores de temperatura más baja ($T = 10^{-3}\Delta$) se presentan los valores más significativos en ZT con valores cercanos a 0,8.

CONCLUSIONES

Usamos la Aproximación Atómica para el modelo de la impureza de Anderson con repulsión Coulombiana finita U -finito, desarrollado anteriormente en estudios de sistemas nanoestructurados [17, 42] para estudiar las propiedades termoeléctricas de tres de estos sistemas: punto cuántico PC inmerso en un hilo cuántico HC o TSE, un PC acoplado lateralmente a un HC , y un PC acoplado lateralmente a un nanotubo *zig-zag* de carbono de pared simple $NTCPS$. La aproximación atómica para U -finita es una solución más realista que otras aproximaciones como el caso de U -infinito, además permite caracterizar la formación del pico Kondo para los diferentes parámetros de la impureza de Anderson como la energía del PC (E_{PC}) y la repulsión Coulombiana U . En las tres nanoestructuras se analizaron las propiedades termoeléctricas para los diferentes regímenes en cada uno de las nanoestructuras: régimen de PC vacío, valencia intermediaria, régimen Kondo y doble ocupación. Para esto se tuvieron en cuenta los siguientes parámetros: $\Delta = \pi V^2 \rho_c(\omega)|_{\omega=\mu} = 1$, con el potencial químico $\mu = 0$, el ancho medio de la banda de conducción $D = 100\Delta$, la correlación coulombiana $U = 20,0\Delta$, todas las energías están normalizadas al valor Δ .

Para el caso de PC inmerso en el HC o TSE, se modeló el HC como un canal de conducción balístico como una banda rectangular. La correlación U genera un sistema “efectivo” de dos niveles de energía: el primero se encuentra en E_{PC} y el segundo en $E_{PC} + U$, estos dos niveles definen las propiedades termoeléctricas del sistema (TSE), el límite simétrico se encuentra en $E_{PC} = E_2 = -10,0\Delta$. Estos parámetros definen otras dos energías en: $E_1 = E_2 - U/2 = -20,0\Delta$ y $E_3 = E_2 + U/2 = \mu = 0$; E_1 , E_2 y E_3 que representan los puntos en donde hay un cambio de signo en la termopotencia a temperaturas intermedias-altas, asociado a mudanzas en la contribución predominante de electrones o huecos. Se estudiaron los regímenes de bajas y altas temperaturas. Los resultados para la termopotencia están de acuerdo a los obtenidos experimentalmente [63, 65], al igual que con resultados de trabajos teóricos realizados con GRN [6, 9]. Para temperaturas $T = [1 - 10]\Delta$ donde Δ es aproximadamente $1K$, obtenemos las condiciones que generan los mayores valores de eficiencia térmica, asociada al producto entre la figura térmica de mérito y la temperatura ZT , estos valores de temperatura pueden ser alcanzados dentro de un criostato de helio líquido, indicando una de las condiciones para obtener una verificación experimental de nuestros resultados. Para estas temperaturas se presentan fuertes fluctuaciones de carga principalmente en las regiones donde el sistema pasa de PC vacío a valencia intermediaria y cuando pasa de la región Kondo a la región de doble ocupación. Se obtienen valores altos en ZT en las regiones donde se viola la ley de Wiedemann-Franz. En cuanto la contribución de los fonones a la conductancia térmica (κ_p) no se han tenido en cuenta para el cálculo de estas propiedades y es de esperar que esta contribución incremente el valor de ZT y por tanto afecte la eficiencia térmica. No obstante, se justifica nuestro estudio al tener en cuenta que trabajos teóricos

recientes estudian la posibilidad de al menos en el caso del TSE, reducir la contribución fonónica a la conductancia térmica a través del PC , empleando un sistema de doble barrera, realizada con materiales de baja conductividad térmica, que aísla los contactos del PC del transporte térmico, pero no electrónico [76, 77]. Además el régimen de temperaturas en el cual se está trabajando está por debajo de la temperatura de Debye, por encima de este valor la contribución de los fonones es relevante. En una estructura de $Al_xGa_{1-x}As$ la temperatura de Debye depende de la concentración de Aluminio en el material $T_D = (370 + 54X + 22X^2)K$, lo cual nos indica que las temperaturas en las que se han encontrado estos resultados están por debajo de la temperatura de Debye, por lo menos para este ejemplo experimental.

En el caso del PC acoplado lateralmente a un HC los resultados obtenidos están de acuerdo a los obtenidos por Yoshida *et al.* usando GRN para el mismo sistema [74] y con los obtenidos por Costi *et al.* para un sistema análogo de impurezas magnéticas diluidas en una matriz metálica, empleando también GRN [9]. Los resultados para la figura térmica de mérito en función de la energía E_{PC} muestran un máximo a muy bajas temperaturas, cerca a los bordes del régimen Kondo. En estas condiciones no existen fluctuaciones de carga (la ocupación en el PC es $n_{PC} \approx 1$), sin embargo existen fuertes fluctuaciones de espín asociadas al efecto Kondo, además de tener un carácter fuertemente correlacionado, que se manifiesta en la no obediencia de la ley de Wiedemann-Franz. De hecho los picos en ZT se presentan entorno a los puntos en donde deja de ser válida la ley de Wiedemann-Franz. Este resultado es complementario al obtenido para el TSE, en donde los máximos valores de ZT se alcanzan a temperaturas intermedias-altas, e indica que la mejor condición para aplicar el sistema en el desarrollo de dispositivos termoeléctricos es a bajas temperaturas en los límites de la región Kondo, con baja fluctuación de carga. Nuestro resultado concuerda cualitativamente con un trabajo en donde se asocia el mejoramiento de la eficiencia térmica ZT con la violación de la ley de Wiedemann-Franz en un sistema de dos PC s sin correlación electrónica en cada PC , con un fuerte carácter Fano-resonante [22]. Los valores de la eficiencia térmica ZT muestran un incremento en la región de parámetros en donde está presente la violación de la ley de Wiedemann-Franz. Por lo tanto, esperamos que en sistemas en donde se presenta la violación de la ley de Wiedemann-Franz y el efecto Fano-antiresonante, exista un aumento en la eficiencia térmica ZT . Estos resultados son cualitativamente similares a los obtenidos experimentalmente para un PC acoplado a un canal de conducción [65, 66], además de seguir el comportamiento descrito para el sistema por la aproximación X-boson (tipo campo medio), en el límite de U infinito [50].

En el estudio de la estructura de un PC acoplado lateralmente a un nanotubo de carbono de pared simple, se obtuvieron resultados similares a los reportados para la estructura de un PC acoplado a un canal de conducción [9, 74] para diferentes valores de temperatura estudiados con GRN. Teniendo en cuenta que los resultados para la conductancia eléctrica presentados están normalizados al valor $G_0 = \frac{4e^2}{h}$, un resultado asociado a la doble degeneración de la banda de conducción del nanotubo metálico *zig-zag* en el nivel de Fermi [54]. En este caso se hicieron todos los cálculos de las propiedades termoeléctricas con el potencial químico en el nivel de Fermi $\mu = 0,0\Delta$. En la gráfica para la densidad de estados se pueden apreciar los picos simétricos alrededor del valor cero en la energía. Un caso interesante para un estudio futuro es ver que pasa con estas mismas propiedades cuando el potencial químico es diferente de cero y se ubica entorno a los picos en la densidad de estados del nanotubo. Los resultados para la figura térmica de mérito (ZT) permiten deducir básicamente las mismas condiciones de optimización, reportadas para el caso del PC acoplado lateralmente al HC .

PERSPECTIVAS

Los sistemas nanoestructuras permiten experimentalmente la variación de diferentes parámetros como, la temperatura, la energía en el punto cuántico y la repulsión coulombiana. En este trabajo se fijó el valor de la correlación coulombiana y se variaron los valores de la energía y temperatura. Como complementos a este estudio realizado y como continuación de la investigación en propiedades termoeléctricas y de transporte en nanoestructuras, sería interesante y conveniente realizar estudios variando el parámetro de correlación Coulombiana en función de la energía del punto cuántico E_{PC} , al igual que el parámetro de hibridización V , con el fin de encontrar los valores de U y V favorables para mejorar el transporte y las propiedades termoeléctricas, en particular la figura térmica de merito. Así como explorar estas propiedades en otros sistemas de puntos cuántico como por ejemplo: dos puntos cuánticos y una banda de conducción con diferentes disposiciones de los puntos en la banda, inmersos, acoplados lateralmente, uno acoplado otro inmerso etc.

Por otro lado la disminución de los efectos térmicos en la red a bajas temperaturas permiten despreciar la contribución debida a los fonones, sin embargo en el rango de temperaturas por encima del valor Δ podrían ser tomados en cuenta e incidir en el valor final de la figura térmica de merito con el fin de dar un resultado más realista, es necesario realizar los mismos cálculos teniendo en cuenta la interacción electrón-fonón.

En cuanto a los resultados presentados para el caso del nanotubo el potencial químico se mantuvo en $\mu = 0$ y puesto que en la densidad de estados presentada se encuentran singularidades de Van Hove para valores de $\mu \neq 0$. Por tanto realizar cálculos de estas propiedades para valores donde el potencial químico toma el valor donde se encuentran estas singularidades.

Finalmente debido a la simplicidad de la implementación de la aproximación atómica y su bajo costo computacional, el método es un buen candidato para describir sistemas de redes de impurezas con correlación coulombiana finita que presenten el efecto Kondo, como en sistemas de fermiones pesados y sistemas con fuerte correlación coulombiana para los diferentes regímenes de temperatura.

APÉNDICE A

Funciones de Green en el modelo atómico para la impureza de Anderson

En este apéndice se presentan los detalles del cálculo de de la función de Green para el modelo de la impureza de Anderson en el límite cuando de banda de conducción de ancho cero. En este límite todas las contribuciones del “hopping” son eliminadas del Hamiltoniano donde se ha tomando $V_{f,\mathbf{k},\sigma} = V$ (ver ecuación 8). Transformando los electrones de conducción para la representación en la base de Wannier donde se tiene un sistema independiente en cada sitio. En este límite hay un átomo metálico aislado en cada sitio, uno de estos átomos representa la impureza de Anderson. En esta aproximación de un átomo aislado se conoce la solución por lo tanto se puede diagonalizar exactamente. En el Hamiltoniano de Anderson existen cuatro posibles ocupaciones para los electrones de conducción ($0, \uparrow, \downarrow, \uparrow\downarrow$) en cualquier sitio. Respecto a la impureza también existen cuatro posibles estados ($0, +\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}, d$). Por lo tanto el espacio de Fock caracterizado por dieciséis estados ($|m, \sigma\rangle$) como se muestra en la Tabla (1) y la hibridación de los estados mezclados con igual número de partículas y la misma componente de espín z . Se puede entonces diagonalizar la matriz 16×16 la cual presenta una estructura de bloques que simplifica el cálculo. El bloque más grande es de 3×3 y usando la formula de Cardano para resolver la ecuación algebraica de tercer grado asociada. los resultados de este cálculo se presentan en la Tabla (2).

Para obtener las funciones de Green atómicas localizadas de la impureza con el límite de ancho de banda cero se usa la ecuación de Zubarev [47]

$$g_{\alpha,\alpha'}^{ff,at}(i\omega_s) = -e^{\beta\Omega} \sum_{n,r,r'} \frac{\exp(-\beta\epsilon_{n-1,r}) + \exp(-\beta\epsilon_{n,r'})}{i\omega_s + \epsilon_{n-1,r} - \epsilon_{n,r'}} \times \langle n-1, r | X_{j,\alpha} | n, r \rangle \quad (\text{A-1})$$

Donde Ω es el potencial termodinámico, E_{nj} son los valores propios y $|nj\rangle$ los vectores propios correspondientes a la solución completa del Hamiltoniano. Resultando

$$G^{ff,at}(\omega) = e^{\beta\Omega} \sum_{i=1}^{16} \frac{m_i}{\omega - u_i}, \quad (\text{A-2})$$

$ m, \sigma\rangle$	E_i	n	S_z
$ 0, 0\rangle$	0	0	0
$ +, 0\rangle$	ϵ_0	1	$\frac{1}{2}$
$ 0, \uparrow\rangle$	ϵ_q	1	$\frac{1}{2}$
$ -, 0\rangle$	ϵ_f	1	$-\frac{1}{2}$
$ 0, \downarrow\rangle$	ϵ_q	1	$-\frac{1}{2}$
$ +, \uparrow\rangle$	$\epsilon_f + \epsilon_q$	2	1
$ -, \downarrow\rangle$	$\epsilon_f + \epsilon_q$	2	-1
$ +, \downarrow\rangle$	$\epsilon_f + \epsilon_q$	2	0
$ -, \uparrow\rangle$	$\epsilon_f + \epsilon_q$	2	0
$ 0, \uparrow\downarrow\rangle$	$2\epsilon_q$	2	0
$ d, 0\rangle$	$2\epsilon_f + U$	2	0
$ d, \uparrow\rangle$	$2\epsilon_f + \epsilon_q + U$	3	$\frac{1}{2}$
$ +, \uparrow\downarrow\rangle$	$\epsilon_f + 2\epsilon_q$	3	$\frac{1}{2}$
$ d, \downarrow\rangle$	$2\epsilon_f + \epsilon_q + U$	3	$-\frac{1}{2}$
$ -, \uparrow\downarrow\rangle$	$\epsilon_f + 2\epsilon_q$	3	$-\frac{1}{2}$
$ d, \uparrow\downarrow\rangle$	$2\epsilon_f + 2\epsilon_q + U$	4	0

Tabla 1: Autoestados para el modelo de la impureza de Anderson en el límite $2D = V = 0$. Las columnas indican los estados $|n, \sigma\rangle$, las energías E_i , el número de electrones n y la componente de espín S_z [42].

donde u_i son los polos de la función de Green dados en la tabla 3.

Autoestados $ j\rangle = n, j\rangle$	Autoenergías $E_j \equiv E_{nr}$	n	S_z
$ 1\rangle = 0, 1\rangle = 0, 0\rangle$	$E_1 \equiv E_{0,1} = 0$	0	0
$ 2\rangle = 1, 1\rangle = \cos \phi +, 0\rangle - \sin \phi 0 \uparrow\rangle$	$E_2 \equiv E_{1,1} = \frac{1}{2}(\epsilon_f + \epsilon_q - \Delta)$	1	$+\frac{1}{2}$
$ 3\rangle = 1, 2\rangle = \cos \phi -, 0\rangle - \sin \phi 0 \downarrow\rangle$	$E_3 \equiv E_{1,2} = E_2$	1	$-\frac{1}{2}$
$ 4\rangle = 1, 3\rangle = \sin \phi +, 0\rangle + \cos \phi 0 \uparrow\rangle$	$E_4 \equiv E_{1,3} = \frac{1}{2}(\epsilon_f + \epsilon_q + \Delta)$	1	$+\frac{1}{2}$
$ 5\rangle = 1, 4\rangle = \sin \phi -, 0\rangle + \cos \phi 0 \downarrow\rangle$	$E_5 \equiv E_{1,4} = E_4$	1	$-\frac{1}{2}$
$ 6\rangle = 2, 1\rangle = +, \uparrow\rangle$	$E_6 \equiv E_{2,1} = \epsilon_f + \epsilon_q$	2	1
$ 7\rangle = 2, 2\rangle = -, \downarrow\rangle$	$E_7 \equiv E_{2,2} = E_6$	2	-1
$ 8\rangle = 2, 3\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(+, \downarrow\rangle + -, \uparrow\rangle)$	$E_8 \equiv E_{2,3} = E_7$	2	0
$ 9\rangle = 2, 4\rangle = a_9[+, \downarrow\rangle - -, \uparrow\rangle] + b_9 d, 0\rangle + c_9 0, \uparrow\downarrow\rangle$	$E_9 \equiv E_{2,4} = 2\sqrt{-Q} \cos(\frac{\theta_1}{3})$	2	0
$ 10\rangle = 2, 5\rangle = a_{10}[+, \downarrow\rangle - -, \uparrow\rangle] + b_{10} d, 0\rangle + c_{10} 0, \uparrow\downarrow\rangle$	$E_{10} \equiv E_{2,5} = 2\sqrt{-Q} \cos(\frac{\theta_1 + 2\pi}{3})$	2	0
$ 11\rangle = 2, 6\rangle = a_{11}[+, \downarrow\rangle - -, \uparrow\rangle] + b_{11} d, 0\rangle + c_{11} 0, \uparrow\downarrow\rangle$	$E_{11} \equiv E_{2,6} = 2\sqrt{-Q} \cos(\frac{\theta_1 + 4\pi}{3})$	2	0
$ 12\rangle = 3, 1\rangle = \sin \theta d, \uparrow\rangle + \cos \theta +, \uparrow\downarrow\rangle$	$E_{12} \equiv E_{3,1} = \frac{1}{2}(3\epsilon_f + 3\epsilon_q + U + \Delta')$	3	$+\frac{1}{2}$
$ 13\rangle = 3, 2\rangle = \sin \theta d, \downarrow\rangle + \cos \theta -, \uparrow\downarrow\rangle$	$E_{13} \equiv E_{3,2} = E_{1,2}$	3	$-\frac{1}{2}$
$ 14\rangle = 3, 3\rangle = -\cos \theta d, \uparrow\rangle + \sin \theta +, \uparrow\downarrow\rangle$	$E_{14} \equiv E_{3,3} = \frac{1}{2}(3\epsilon_f + 3\epsilon_q + U - \Delta')$	3	$+\frac{1}{2}$
$ 15\rangle = 3, 4\rangle = -\cos \theta d, \downarrow\rangle + \sin \theta -, \uparrow\downarrow\rangle$	$E_{15} \equiv E_{3,4} = E_{1,4}$	3	$-\frac{1}{2}$
$ 16\rangle = 4, 1\rangle = d, \uparrow\downarrow\rangle$	$E_{16} \equiv E_{4,1} = 2\epsilon_f + 2\epsilon_q + U$	4	0

Tabla 2: Autoenergías $E_{n,r}$ para los dieciséis estados $|n, r\rangle$ de \mathcal{H} de la solución exacta del modelo de la impureza de Anderson en el límite $2D = V = 0$. Donde n es el número de electrones, r es el nombre del estado y S_z es la componente de espín en dirección z [42].

En la Tabla (2) se usaron las abreviaciones $|j\rangle = |n, r\rangle$ y $E_j \equiv E_{n,r}$ con $j = 1, \dots, 16$. $\epsilon_{n,r} = E_{n,r} - n\mu$.

Los parámetros

$$\Delta = [(\epsilon_f + \epsilon_q)^2 + 4V^2]^{1/2} \quad (\text{A-3})$$

$$\Delta' = [(\epsilon_f + U - \epsilon_q)^2 + 4V^2]^{1/2} \quad (\text{A-4})$$

$$\tan \phi = 2V/(\epsilon_q - \epsilon_f + \Delta) \quad (\text{A-5})$$

$$\tan \theta = 2V/(\epsilon_f + U - \epsilon_q - \Delta') \quad (\text{A-6})$$

$$a_i = (2 + 4V^2[(E_i - \epsilon_f - U)^{-2} + (E_i - 2\epsilon_q)^{-2}])^{-1/2} \quad (\text{A-7})$$

$$b_i = \frac{2V}{E_i + 2\epsilon_f - U} \quad (\text{A-8})$$

$$c_i = \frac{2V}{E_9 - 3\epsilon_q} \quad (\text{A-9})$$

$$i = 9, 10, 11 \quad (\text{A-10})$$

$$\theta_1 = \arccos \frac{R}{\sqrt{-Q^3}} \quad (\text{A-11})$$

$$Q = -\frac{1}{9} [12V^2 + (\epsilon_q + \epsilon_f) + (2\epsilon_f + U)^2 + (2\epsilon_q) - (\epsilon_q)^2 - (\epsilon_q + \epsilon_f)(2\epsilon_f + U) - (\epsilon_q + \epsilon_f)(2\epsilon_q) - (2\epsilon_q + U)(2\epsilon_q)] \quad (\text{A-12})$$

$$R = \frac{1}{54} \left\{ -3 [(\epsilon_q + \epsilon_f)^2(2\epsilon_f + U + 2\epsilon_q) + (2\epsilon_f + U)^2(\epsilon_q + \epsilon_f + 2\epsilon_q) + (2\epsilon_q)^2(\epsilon_q + \epsilon_f + 2\epsilon_f + U)] + 2(\epsilon_q + \epsilon_f)(2\epsilon_f + U)(2\epsilon_q) + 18V^2 [2(\epsilon_q + \epsilon_f) - (2\epsilon_f + U) - (2\epsilon_q)] + 2 [(\epsilon_q + \epsilon_f)^3 + (2\epsilon_f + U)^3 + (2\epsilon_q)^3] \right\} \quad (\text{A-13})$$

$u_1 = E_2 - E_1 = E_6 - E_4$
$u_2 = E_5 - E_1 = E_6 - E_2$
$u_3 = E_{10} - E_2$
$u_4 = E_{11} - E_2$
$u_5 = E_9 - E_2$
$u_6 = E_{10} - E_4$
$u_7 = E_{12} - E_6 = E_{16} - E_{14}$
$u_8 = E_{12} - E_9$
$u_9 = E_{12} - E_{10}$
$u_{10} = E_{12} - E_{11}$
$u_{11} = E_{14} - E_{10}$
$u_{12} = E_{14} - E_{11}$
$u_{13} = E_9 - E_4$
$u_{14} = E_{11} - E_4$
$u_{15} = E_{14} - E_6 = E_{16} - E_{12}$
$u_{16} = E_{14} - E_9$

Tabla 3: Polos de las funciones de Green correspondientes a todos las posibles transiciones en la solución atómica [42].

Siguiendo la definición para los cumulantes (ecuaciones 21 y 22) se escriben todas las funciones de Green empleadas en el cálculo de la aproximación atómica

$$\mathbf{G}_\uparrow^{ff,at} = \begin{pmatrix} g_{11} & g_{13} \\ g_{31} & g_{33} \end{pmatrix}; \quad \mathbf{G}_\downarrow^{ff,at} = \begin{pmatrix} g_{22} & g_{24} \\ g_{42} & g_{44} \end{pmatrix} \quad (\text{A-14})$$

donde

$$g_{11} = e^{\beta\Omega} \left\{ \left[\sin^2 \phi \left(\frac{e^{-\beta E_1} + e^{-\beta E_4}}{i\omega + E_1 - E_4} + \frac{3}{2} \frac{e^{-\beta E_2} + e^{-\beta E_6}}{i\omega + E_2 - E_6} \right) + \cos^2 \phi \left(\frac{e^{-\beta E_1} + e^{-\beta E_2}}{i\omega + E_1 - E_2} + \frac{3}{2} \frac{e^{-\beta E_4} + e^{-\beta E_6}}{i\omega + E_4 - E_6} \right) \right] + \sum_{i=9}^{11} \left[\frac{e^{-\beta E_3} + e^{-\beta E_i}}{i\omega + E_3 - E_i} (\alpha_i \sin \phi)^2 + \frac{e^{-\beta E_5} + e^{-\beta E_i}}{i\omega + E_5 - E_i} (\alpha_i \cos \phi)^2 + \frac{e^{-\beta E_i} + e^{-\beta E_{14}}}{i\omega + E_i - E_{14}} (c_i \sin \phi)^2 + \frac{e^{-\beta E_i} + e^{-\beta E_{12}}}{i\omega + E_i - E_{12}} (c_i \cos \phi)^2 \right] \right\} \quad (\text{A-15})$$

$$\begin{aligned}
g_{33} = & e^{\beta\Omega} \left\{ \left[\sin^2 \theta \left(\frac{e^{-\beta E_{15}} + e^{-\beta E_{16}}}{i\omega + E_{15} - E_{16}} + \frac{3}{2} \frac{e^{-\beta E_8} + e^{-\beta E_{12}}}{i\omega + E_8 - E_{12}} \right) + \cos^2 \theta \left(\frac{e^{-\beta E_{13}} + e^{-\beta E_{16}}}{i\omega + E_{13} - E_{16}} + \frac{3}{2} \frac{e^{-\beta E_8} + e^{-\beta E_{14}}}{i\omega + E_8 - E_{14}} \right) \right] + \right. \\
& \left. + \sum_{i=9}^{11} \left[\frac{e^{-\beta E_4} + e^{-\beta E_i}}{i\omega + E_4 - E_i} (b_i \sin \phi)^2 + \frac{e^{-\beta E_3} + e^{-\beta E_i}}{i\omega + E_3 - E_i} (b_i \cos \phi)^2 + \frac{e^{-\beta E_i} + e^{-\beta E_{12}}}{i\omega + E_i - E_{12}} (a_i \sin \theta)^2 + \frac{e^{-\beta E_i} + e^{-\beta E_{14}}}{i\omega + E_i - E_{14}} (a_i \cos \theta)^2 \right] \right\} \quad (\text{A-16})
\end{aligned}$$

$$g_{13} = e^{\beta\Omega} \sum_{i=9}^{11} \left\{ \left[\frac{e^{-\beta E_5} + e^{-\beta E_i}}{i\omega + E_5 - E_i} - \frac{e^{-\beta E_3} + e^{-\beta E_i}}{i\omega + E_3 - E_i} \right] a_i b_i \sin \phi \cos \phi + \left[\frac{e^{-\beta E_i} + e^{-\beta E_{14}}}{i\omega + E_i - E_{14}} - \frac{e^{-\beta E_i} + e^{-\beta E_{12}}}{i\omega + E_i - E_{12}} \right] a_i c_i \cos \theta \sin \theta \right\} \quad (\text{A-17})$$

$$g_{13} = g_{31} \quad (\text{A-18})$$

$$\begin{aligned}
g_{22} = & e^{\beta\Omega} \left\{ \left[\sin^2 \phi \left(\frac{e^{-\beta E_1} + e^{-\beta E_5}}{i\omega + E_1 - E_5} + \frac{3}{2} \frac{e^{-\beta E_3} + e^{-\beta E_7}}{i\omega + E_3 - E_7} \right) + \cos^2 \phi \left(\frac{e^{-\beta E_1} + e^{-\beta E_3}}{i\omega + E_1 - E_3} + \frac{3}{2} \frac{e^{-\beta E_5} + e^{-\beta E_7}}{i\omega + E_5 - E_7} \right) \right] + \right. \\
& \left. + \sum_{i=9}^{11} \left[\frac{e^{-\beta E_2} + e^{-\beta E_i}}{i\omega + E_2 - E_i} (a_i \sin \phi)^2 + \frac{e^{-\beta E_4} + e^{-\beta E_i}}{i\omega + E_4 - E_i} (a_i \cos \phi)^2 + \frac{e^{-\beta E_i} + e^{-\beta E_{15}}}{i\omega + E_i - E_{15}} (c_i \sin \theta)^2 + \frac{e^{-\beta E_i} + e^{-\beta E_{13}}}{i\omega + E_i - E_{13}} (c_i \cos \theta)^2 \right] \right\} \quad (\text{A-19})
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
g_{44} = & e^{\beta\Omega} \left\{ \left[\sin^2 \theta \left(\frac{e^{-\beta E_{14}} + e^{-\beta E_{16}}}{i\omega + E_{14} - E_{16}} + \frac{3}{2} \frac{e^{-\beta E_6} + e^{-\beta E_{12}}}{i\omega + E_6 - E_{12}} \right) + \cos^2 \theta \left(\frac{e^{-\beta E_{12}} + e^{-\beta E_{16}}}{i\omega + E_{12} - E_{16}} + \frac{3}{2} \frac{e^{-\beta E_6} + e^{-\beta E_{14}}}{i\omega + E_6 - E_{14}} \right) \right] + \right. \\
& \left. + \sum_{i=9}^{11} \left[\frac{e^{-\beta E_4} + e^{-\beta E_i}}{i\omega + E_4 - E_i} (b_i \sin \phi)^2 + \frac{e^{-\beta E_2} + e^{-\beta E_i}}{i\omega + E_2 - E_i} (b_i \cos \phi)^2 + \frac{e^{-\beta E_i} + e^{-\beta E_{12}}}{i\omega + E_i - E_{12}} (a_i \sin \theta)^2 + \frac{e^{-\beta E_i} + e^{-\beta E_{14}}}{i\omega + E_i - E_{14}} (a_i \cos \theta)^2 \right] \right\} \quad (\text{A-20})
\end{aligned}$$

$$g_{24} = g_{42} \quad (\text{A-21})$$

APÉNDICE B

Los resultados presentados en esta tesis dieron como resultado las siguientes presentaciones en eventos y producción bibliográfica :

- Latin american Workshop on Magnetis, Magnetic Materials and Their Applications (X-LAW3M), del 8 al 12 de Abril de 2013, Buenos Aires (Argentina).
- 21st Latin American Symposium on Solid State Physics (SLAFES), del 30 de Septiembre al 4 de Octubre de 2013, Villa de Leyva-Boyacá (Colombia).
- “*Thermoelectric transport properties through a single-wall zig-zag carbon nanotube side coupled to a correlated quantum dot: Atomic approach for the finite U - impurity Anderson model*”, Aceptado en la revista **Physica B** con código de aceptación PHYSB-D-14-00137.
- “*Thermoelectric properties of the single electron transistor*”, sometido a publicación International Journal of Thermal Science **IJTS** (20 de enero de 2014).
- “*Thermoelectric transport properties of a T -coupled quantum dot: Atomic approach for the finite U case*”, sometido a publicación Physica E: Low Dimensional Systems (Marzo de 2014).

BIBLIOGRAFÍA

- [1] I. Affleck. *arXiv.*, page 0911.2209, 2010.
- [2] P. W. Anderson. *Phys. Rev.*, 124:41–53, Oct 1961.
- [3] David Goldhaber-Gordon Markus Hanl Andreas Weichselbaum Jan von Delft Theo Costi Andrey V. Kretinin, Hadas Shtrikman and Diana Mahalu. *Phys. Rev. B*, 84:245316, 2011.
- [4] R. K. Williams B. C. Sales, D. Mandrus. *Science*, 272:1325, 1996.
- [5] Jurgen Konig Bjorn Kubala and Jukka Pekola. *Phys. Rev. Lett*, 100:066801, 2008.
- [6] D. Boese and R. Fazio. *EPL (Europhysics Letters)*, 56(4):576, 2001.
- [7] A. Majumdar C. W. Chang, D. Okawa and A. Zettl. *Science*, 314:1121, 2006.
- [8] T. A. Costi, J. Kroha, and P. Wölfle. *Phys. Rev. B*, 53:1850–1865, Jan 1996.
- [9] T. A. Costi and V. Zlatić. *Phys. Rev. B*, 81:235127, Jun 2010.
- [10] N. Samarth D. D. Awschalom, D. Loss. *Semiconductor spintronics and quantum computation*. Springer-Verlag, Berlin, 2002.
- [11] D. Mahalu D. Abusch-Magder U. Meirav M. A. Kastner D. Goldhaber-Gordon, H. Shtrikman. *Nature*, 391:156, 1998.

- [12] W.J. De Haas and G.J. Van den Berg. *Physica*, 3(440), 1936.
- [13] B. Dong and X. L. Lei. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 14(19):4963, 2002.
- [14] Jason E. Matthews-Natthapon Nakpathomkun Ann I. Persson Lars Samuelson Eric A. Hoffmann, Henrik A. Nilsson and Heiner. *Nano Letters*, 9:779, 2009.
- [15] B. R. Alascio et al. *J. Phys. C:Solid State*, 13(2869), 1980.
- [16] M. S. Figueira, M. E. Foglio, and G. G. Martinez. *Phys. Rev. B*, 50:17933–17952, Dec 1994.
- [17] M. E. Foglio, T. Lobo, and M. S. Figueira. *ArXiv e-prints*, mar 2009.
- [18] R. Franco, M. S. Figueira, and E. V. Anda. *Phys. Rev. B*, 67:155301, Apr 2003.
- [19] R. Franco, M. S. Figueira, and E. V. Anda. *Phys. Rev. B*, 73:195305, May 2006.
- [20] R. Franco, M. S. Figueira, and M. E. Foglio. *Phys. Rev. B*, 66:045112, Jul 2002.
- [21] R. Franco, M. S. Figueira, and M. E. Foglio. *Phys. Rev. B*, 66:045112, Jul 2002.
- [22] M. L. Ladrón de Guevara G. Gómez-Silva, O. Ávalos-Ovando and P. A. Orellana. *J. Appl. Phys*, 111:053704, 2012.
- [23] T. M. Tritt G. S. Nolas, D. T. Morelli. *Annu. Rev. Mater. Sci.*, 29:89, 1999.
- [24] H. D. Goldsmid. Pion, London.
- [25] M. Grobis, I. G. Rau, R. M. Potok, H. Shtrikman, and D. Goldhaber-Gordon. *Phys. Rev. Lett.*, 100:246601, Jun 2008.
- [26] Paul Harrison. *Quantum Wells, Wires and Dots*. Wiley, tercera ed. edition, 2010.
- [27] A. J. Heeger. *Localized moments and nonmoments in metals*, volume 23. Academic Press, New York, 1969.
- [28] Alexander Cyril Hewson. *The Kondo Problem to Heavy Fermions*. Cambridge University Press, 2nd edition, 1993.

- [29] J. Hubbard. *Proceedings of the Royal Society of London. Series A. Mathematical and Physical Sciences*, 285(1403):542–560, 1965.
- [30] R. Świrkowicz, M. Wierzbicki, and J. Barnaś. *Phys. Rev. B*, 80:195409, 2009.
- [31] T. A. Costi W. W. Shum A. N. Pasupathy E. Neuscamman S. Flores-Torres P. S. Cornaglia A. A. Aligia C. A. Balseiro G. K.-L. Chan H. D. Abruña D. C. Ralph J. J. Parks, A. R. Champagne. *Science*, 328:1370, 2010.
- [32] Qing-feng Sum Jie Liu and X. C. Xie. *Phys. Rev. B*, 81(245323), 2003.
- [33] Kicheon Kang, Sam Young Cho, Ju-Jin Kim, and Sung-Chul Shin. *Phys. Rev. B*, 63:113304, Feb 2001.
- [34] A. Kawabata.
- [35] J. Kondo. *Solid State Physics*, 23:183, 1969.
- [36] Jun Kondo. *Progress of Theoretical Physics*, 32(1):37–49, 1964.
- [37] M. Krawiec and K. I. Wysokiński. *Phys. Rev. B*, 73:075307, Feb 2006.
- [38] M. S. Dresselhaus L. D. Hicks. *Phys. Rev. B*, 47:12727, 1993.
- [39] G. Schön L. L. Sohn, L. P. Kouwenhoven. *Mesoscopic Electron Transport*. Kluwer, 1997.
- [40] David C. Langreth. *Phys. Rev.*, 150:516–518, Oct 1966.
- [41] Noah Linden, Sandu Popescu, and Paul Skrzypczyk. *Phys. Rev. Lett.*, 105:130401, Sep 2010.
- [42] M. E. Lobo, M. E. Foglio and M. S. Figueira. *Nanotechnology*, 21(274007), 2010.
- [43] T Lobo, M S Figueira, and M E Foglio. *Nanotechnology*, 21(27):274007, 2010.
- [44] T. Lobo M. E. Foglio and M. S. Figueira. *AIP Advances*, 2:032139, Jul 2012.
- [45] G. D. MAHAN and J. O. SOFO. The best thermoelectric. *Applied Physical Sciences*, 93:7436, 1996.

- [46] D. C. Mattis. *Phys. Rev. Lett.*, 19:1478–1481, Dec 1967.
- [47] Zubarev D N. *Phys. Usp. Sov.*, 3(320), 1960.
- [48] Y. Nagaoka. *Prog. Theor. Phys.*, 37:13, 1967.
- [49] Rachel A. Segalman Arun Majumdar Pramod Reddy, Sung-Yeon Jang. *Science*, 315:1568, 2007.
- [50] J. Silva-Valencia R. Castellanos, R. Franco and M. S. Figueira. *Physica A*, 389(5814), 2010.
- [51] J. Silva-Valencia R. Castellanos, R. Franco and M. S. Figueira. *J. Supercond. Nov. Magn.*, 23:153, 2010.
- [52] J. Silva-Valencia R. Franco and M. S. Figueira. *J. Magn. Magn. Mat*, 320:242, 2008.
- [53] J. Silva-Valencia R. Franco and M. S. Figueira. *J. Appl. Phys.*, 103:07B726, 2008.
- [54] G. Dresselhaus R. Saito and M. S. Dresselhaus. *Physical Properties of Carbon Nanotubes*. Imperial College Press, 1998.
- [55] D. Reuter-A. D. Wieck C. Gould H. Buhmann¹ R. Scheibner, M. König and L. W. Molenkamp. *New J. Phys.*, 10:083016, 2008.
- [56] T. Colpitts R. Venkatasubramanian, E. Siivola and B. O’Quinn. *Nature*, 413:597, 2001.
- [57] Peter S. Riseborough. *Phys. Rev. B*, 67:045102, Jan 2003.
- [58] D. M. Rowe and C. M. Bhandari. Reston Publishing.
- [59] H. Schoeller-J. Splettstoesser S. Andergassen, V. Meden and M. R. Wegewijs. *Nanotechnology*, 21:272001, 2010.
- [60] Elzerman-J. M. van der Wiel W. G. Tarucha S. De Franceschi, S. Sasaki and L. P.Kouwenhoven. *Phys. Rev. Lett.*, 86:878–881, Jan 2001.
- [61] E. A. Hoffmann N. Nakpathomkun H. A. Nilsson H. Q. Xu L. Samuelson S Fahlvik Svensson, A. I. Persson and H. Linke. *New J. Phys.*, 14:033041, 2012.

- [62] L. P. Kouwenhoven S. M. Cronenwett, T. H. Oosterkamp. *Science*, 281:540, 1998.
- [63] Olli-Pentti Saira, Matthias Meschke, Francesco Giazotto, Alexander M. Savin, Mikko Möttönen, and Jukka P. Pekola. *Phys. Rev. Lett.*, 99:027203, Jul 2007.
- [64] R. Sakano and N. Kawakami. *J. Mag. Mag. Mat.*, 310:1136, 2007.
- [65] R. Scheibner, H. Buhmann, D. Reuter, M. N. Kiselev, and L. W. Molenkamp. *Phys. Rev. Lett.*, 95:176602, Oct 2005.
- [66] R. Scheibner, E. G. Novik, T. Borzenko, M. König, D. Reuter, A. D. Wieck, H. Buhmann, and L. W. Molenkamp. *Phys. Rev. B*, 75:041301, Jan 2007.
- [67] M. S. Figueira T. Lobo and M. E. Foglio. *Nanotechnology*, 17:6016, 2006.
- [68] R. Franco J. Silva–Valencia T. Lobo, M. S. Figueira and M. E. Foglio. *Physica B*, 398:446, 2007.
- [69] S. Thomas and G. Zaikov. *Recent Advances in Polymer Nanocomposites: Synthesis and Characterisation*. Taylor & Francis, 2010.
- [70] Piotr Trocha and Józef Barnás. *Phy. Rev. B*, 85:085408, 2012.
- [71] T. Fujisawa J. M. Elzerman S. Tarucha L. P. Kouwenhoven W. G. van der Wiel, S. De Franceschi. *Science*, 289:2105, 2000.
- [72] Kenneth G. Wilson. *Rev. Mod. Phys.*, 47:773–840, Oct 1975.
- [73] Ned S. Wingreen and Yigal Meir. *Phys. Rev. B*, 49:11040–11052, Apr 1994.
- [74] M. Yoshida, A. C. Seridonio, and L. N. Oliveira. *Phys. Rev. B*, 80:235317, Dec 2009.
- [75] A Yoshimori and A Zawadowski. *J. Phys. C: Solid State Phys.*, 15:5241, Jul 1982.
- [76] X. Zianni. *Journal of Electronic Materials*, 39:1996, 2010.
- [77] X. Zianni. *Phys. Rev. B*, 82:165302, 2010.