



UNIVERSIDAD NACIONAL DE ROSARIO
FACULTAD DE CIENCIAS EXACTAS, INGENIERÍA Y AGRIMENSURA

Nube de Kondo y entrelazamiento en impurezas magnéticas multiorbitales

Estudiante
Adelina ORLANDINI

Director
Luis Oscar MANUEL

DEFENSA: 28 DE MARZO DE 2022



The scientific theory you propose, and the magical theory I propose... One of those is the truth. And which one it is can be ascertained as soon as you look inside the Braun tube. However, until the instant that happens, we cannot deny each other's theories. So while there is only one truth, until you look into the Braun tube, you can make two conflicting truths exist at the same time... A different universe where, in a case that only one truth must exist, two can exist at the same time.

A quien haya sido o vaya a ser John Titor, por tomarse el tiempo de escribir en un foro en internet, ser de inspiración para una serie y motivar a una adolescente sin preferencias a (tratar de) entender los misterios que nos rodean.

Índice general

Agradecimientos	1
Resumen	3
1. Introducción	4
1.1. Historia	5
1.2. Modelo de Anderson	8
1.3. Efecto Kondo	10
1.4. Entrelazamiento cuántico	13
1.4.1. Matriz densidad	14
1.4.2. Estados entrelazados	14
1.4.3. Entropía de entrelazamiento de von Neumann	15
1.4.4. Otras maneras de medir entrelazamiento	16
1.5. Modelo de impureza multiorbital	17
1.5.1. Aplicaciones a sistemas físicos	20
2. DMRG - ITENSOR	22
2.1. Grupo de Renormalización de la Matriz Densidad	23
2.1.1. Truncamiento del espacio de Hilbert	24
2.1.2. Algoritmos de DMRG	24
2.2. Estado producto de matrices (MPS)	24
2.3. ITensor	26
2.3.1. Cómo utilizar DMRG en ITensor	26
2.3.2. Algunas consideraciones a tener en cuenta	31
3. Nube de Kondo	33
3.1. Introducción	33
3.2. Obtención de la longitud de apantallamiento	34
3.3. Correlaciones espín-espín	36
3.4. Resultados	37
3.4.1. Longitud de apantallamiento	37
3.4.2. Correlaciones de espín entre impureza y electrones de conducción	41
3.4.3. Sistemas no isotrópicos	41
4. Entrelazamiento	45
4.1. Entrelazamiento en la nube de Kondo	45
4.2. Entropía en sistemas no isotrópicos	46
4.3. Modificaciones ante la variación de parámetros	51
4.3.1. Cambios en la ocupación de la impureza	51
4.3.2. Variación con la hibridización	53
4.3.3. Presencia de campo magnético	55
4.4. Modelo de Kondo de espín 1	56

4.4.1. Distintas interacciones de intercambio	56
5. Conclusiones	59
Anexo A. Modelos de juguete	I
A.1. Dos espines $1/2$ y un espín 1	I
A.1.1. Determinación del estado fundamental	I
A.1.2. Función de onda del estado fundamental	IV
A.1.3. Entropías de entrelazamiento	IV
A.2. Cuatro espines $1/2$	VI
A.2.1. Entropía de entrelazamiento	VIII
Bibliografía	XII

Agradecimientos

“I don’t want to deny who I’ve been. Because even my failures are a part of who I am today.”

Makise Kurisu

Sinceramente no sé por dónde empezar. Hay tantos nombres que quiero mencionar, tantas anécdotas resumidas, tanto de una vida, que me preocupa olvidarme de algo y darme cuenta mientras veo como se imprimen las hojas.

A Luis, quien me viene soportando semanalmente desde 2019: Mecánica Clásica, Aplicada 2, consejo de departamento, beca CIN, tesina y próximamente doctorado. La paciencia que tiene este hombre es únicamente comparable con su gran vocación para enseñar y compartir conocimientos. Resulta un poco abrumador en ciertas ocasiones por la cantidad de información, pero verlo hablar sobre física motiva a cualquier persona a seguir el camino de la investigación.

Al grupo de “Electrones fuertemente correlacionados” por permitirme aprender con ellos. Una mención especial al Flaco, que siempre está dispuesto a dar una mano en lo que pueda o a buscar información para ayudar. Estoy bastante segura de que la vida de oficina no sería lo mismo sin él.

A la gente del IFIR que me ayudó a sentirme cómoda en un ambiente totalmente distinto al que acostumbraba. Después de año y medio de vida en pandemia no resulta para nada fácil acostumbrarse a la presencialidad otra vez, y mucho menos en un lugar nuevo.

A todas las personas que me ayudaron a llegar a la fecha que nos habíamos propuesto para presentar la tesina. En este mismo momento a Franco que está sentado atrás mío ayudándome a terminar todas las gráficas que, por capricho de estética, quise rehacer. A Pablo, quien se tomó el trabajo de hacer todos los esquemitas (y una gráfica) que quise poner. A Nahuel, que me ayudó siempre a acomodar los datos de las mediciones cuando me abrumaba la cantidad de archivos que tenía. También por permitirme correr los programas en su computadora con la excusa de que, como no iba a poder jugar al LOL, le servía para estudiar. A mis viejos, quienes seguramente estén leyendo esto en la última revisión de la tesina porque les pedí que den el visto bueno (y todas las críticas que vean pertinentes) a la ortografía, puntuación y demás.

A mis físicas favoritas que no se cansan de alegrarme los días: Lour, que sin ella dudo que hubiese podido empezar a hacer sociales en la carrera. Somos muy distintas en tantas cosas pero ¡que placer compartir pasiones con ella desde primer año! A Mel, quien también empezó conmigo pero recién coincidimos un poco más a partir de segundo año. Guardo con mucho amor el recuerdo de esperar en el primer piso a que abran el aula de CCN y hablar sobre *Shuumatsu* juntas. Tercer año habría sido imposible sin tu ayuda. A Flor, mi experimental favorita, mi complemento y mi compañera de proyectos. No recuerdo cuando nos volvimos tan cercanas, pero

es una de las personas que más atesoro de esta etapa. Gracias mil y una veces por coparte con todas las cosas que te propongo.

A esas amistades que surgieron a la mitad de la carrera y me sorprendieron de lo hermosas que resultaron: Lea, que empezó a cursar conmigo en 2016 pero recién en 2019 nos empezamos a hablar, y desde ese momento descubrí a una hermosa persona, un gran físico y tremendo compañero de estudio que lamento no haber encontrado antes. A Franky, quien apareció en mi paso por tercer año de la carrera y desde ese momento no se fue. Nuestra amistad se potenció durante quinto año mientras hacíamos nuestras tesinas de temas totalmente distintos, pero que igual nos gustaba contarnos mutuamente. A Román, que la verdad no sé cuando se volvió tan amigo pero me ayudó tanto que no me alcanzan las palabras. Él me adoptó en su oficina del IFIR, escuchaba mis problemas, quejas, e incluso cuando empecé a buscar tesina me fue guiando en los grupos que había. Al pelado, que me hace agarrarle el gusto a juegos para jugar juntos y después los deja. En algún momento empezamos a hablar todos los días, acompañándonos en el proceso de la carrera. Mientras escribo esto tengo mensajes suyos para responder.

A mis mejores amigos y amigas de la vida, aquellos que me aman a pesar de que desaparezco bastante seguido porque me consume la carrera. A Mica, que ya perdí la cuenta de la cantidad de años que llevamos juntas. Te extraño cada día que pasas lejos de Rosario pero eso no evita que me emocionen tus logros lejos de esta ciudad. Al Tomi, que fue el primero en escuchar (leer) mis dudas sobre que carrera elegir. Ambos estudiamos carreras con la palabra “física” pero que no podrían ser más distintas entre sí. No veo la hora de que podamos juntarnos a tomar unos mates en el río otra vez. A Abril, que me contuvo durante todo primer año cuando tenía miedo de fallar. Tenemos nuestras peleas pero me alegra un montón saber que podemos reconciliarnos sin ningún problema.

A cada docente que me motivó a seguir con la carrera y meterme al mundo de la investigación. A Adriana, a quien conocí durante mi último año de carrera y me permitió conocer una forma de hacer física que nunca antes había imaginado. Su pasión por lo que hace, la dedicación que le pone a todo y el cuidado que tuvo con sus dos alumnas son imposibles de agradecer con tan poco espacio. A María Luz, que fue de las primeras personas en mostrarme como aplicar la física a cosas muy cotidianas. Fue la primera docente en preocuparse desmedidamente por mí, ocurriendo que un día me fui de su clase por dolor de cabeza y salió atrás mío, preguntándome si me sentía bien y diciéndome que cualquier cosa le avise si pasaba algo. A Mariu, que fue la primera física que conocí en la carrera y me sacó un miedo enorme de encima.

A todas las amistades que hice a lo largo de estos seis años, en la carrera y en cualquier lugar. A Juan, Franco, Tebi, Fede, Martín, al Gero y ya se me empiezan a mezclar todos los nombres. Viendo la extensión de esta sección me entristece no poder ponerme a escribir algo para cada quien. Mil veces gracias por su amistad, su apoyo y todo lo que pueda existir.

A la universidad pública y a cada una de las personas que luchan por preservar el derecho a la educación y su calidad.

Resumen

El efecto Kondo, originalmente introducido en los años 60, continúa representando hoy en día un paradigma de sistemas correlacionados y ocurre cuando un momento magnético es “apantallado” por los electrones de conducción. Este fenómeno se observa en gran cantidad de sistemas físicos como lo son las impurezas magnéticas en metales, átomos y moléculas magnéticos sobre superficies, puntos cuánticos, etc. A pesar de ser un fenómeno descubierto hace más de medio siglo, explicado y revisitado numerosas veces en diversos modelos, el entendimiento de sus propiedades espaciales está lejos de ser completo. Algo similar ocurre con el entrelazamiento en estos sistemas: a pesar de ser la esencia del efecto Kondo, su relación con éste permanece aún poco explorada.

Mediante el método de grupo de renormalización de la matriz densidad, se realizó un íntegro estudio de las propiedades espaciales y de entrelazamiento de un modelo de una impureza de espín $S = 1$, con dos orbitales acoplados a dos canales de conducción, que incluye anisotropía magnética de sitio. Entre los resultados obtenidos se encuentra una confirmación de que dicho modelo, en la fase de Kondo completamente apantallado, reproduce los comportamientos esperados para modelos más simples. Asimismo, se observaron indicios de una transición de fase cuántica topológica, conducida por la anisotropía magnética, hacia un novedoso estado de líquido de electrones. Se analiza además la estructura de entrelazamiento nada trivial del estado fundamental.

Capítulo 1

Introducción

“All I can say to the younger theorists is: don’t trust anyone over 45, except maybe me, and I’m not so sure about me.”

Philip W. Anderson

Bienvenidos y bienvenidas al comienzo de lo que, puesto en palabras impresas sobre un papel, fue un largo camino recorrido.

Este primer capítulo tiene como objetivo introducir un contexto histórico y quizás social de lo que actualmente se conoce como efecto Kondo. Decidí extender un poco más esta parte de la tesina cuando Luis me comentó sobre los aportes de una científica al conocimiento de este efecto tan particular. En realidad, al principio solamente fue curiosidad y ganas de agregar algo, pero a medida que fui investigando sobre ella y la historia en sí, quise contarles algo más que solamente un orden cronológico de eventos que dieron lugar a un fenómeno llamado con un solo apellido. Una vez que salgamos de la parte histórica, voy a intentar darles un *tour* por los modelos de Anderson y Kondo, así como algunos conceptos cuánticos. Por último, pero claramente no menos importante, expondré el modelo con el cual estuve trabajando y sus aplicaciones en el mundo real.

Antes de continuar quisiera hacer algunas aclaraciones sobre la bibliografía. Si bien el trabajo se puede comprender bastante bien, la forma de expresar los procesos cuánticos que encontrarán es un poco distinta a la que conocemos de la licenciatura en física rosarina. A fines de los años 20, Paul Dirac introdujo las ideas que darían la base de una nueva forma de estudiar la física de los sistemas cuánticos de muchos cuerpos, ideas que tiempo después serían desarrolladas por Vladimir Fock y Pascual Jordan. Esta nueva forma de tratar la física cuántica es conocida como segunda cuantización, o lo que quizás suene más conocido, representación número de ocupación. Este nuevo enfoque permite representar a los estados cuánticos de muchos cuerpos en la base de estados de Fock, y además introduce nuevos operadores: creación y destrucción de partículas. Por mi experiencia estudiando este formalismo puedo recomendar, sin mucho más conocimiento de bibliografía, el libro *Feynman Diagram Techniques in Condensed Matter Physics* [1] de Radi Jishi no solo para su estudio sino también para la física presente en esta tesina. Los capítulos introductorios de tesis y tesinas del área son igualmente de mucha utilidad

Como último comentario (válido para este y otros capítulos), me gustaría advertirles que van a encontrar notas al pie de página contando anécdotas de mi paso por la carrera. Tuve muchas dudas respecto a incluir esas historias, dónde y cómo agregarlas, incluso: me cuestioné si era pertinente incorporarlas en este tipo de trabajo.

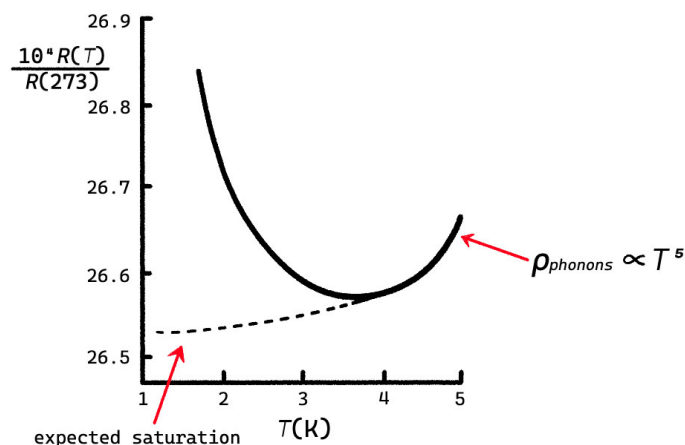


Figura 1.1: Resultados mostrando el mínimo en la resistividad del experimento original en oro, 1934. Imagen obtenida de [3].

1.1. Historia

El aumento de la resistividad de los metales con la temperatura se debe a la dispersión de los electrones de conducción provocada por las vibraciones de la red. Esta fue la explicación que dio la física al fenómeno experimentalmente observado durante mucho tiempo. En muchos metales, la resistencia decrece monótonamente al disminuir la temperatura debido a que estas vibraciones decrecen rápidamente a bajas temperaturas. Además, se superpone una resistencia de saturación, aproximadamente independiente de la temperatura, originada en la dispersión de los electrones con los defectos, impurezas o vacancias que se presenten en el material.

Como es sabido, la ciencia busca cuestionar, comparar o incluso indagar en fenómenos por medio de experimentos. Fue así que en 1934 Wander de Haas, Jan de Boer y Albert van den Berg [2] observaron cómo ciertos materiales conductores eléctricos presentaban comportamientos extraños que contradecían, en principio, la generalidad de las teorías vigentes: en determinadas condiciones estos metales comenzaban a sufrir un aumento en su resistividad al disminuir la temperatura, como puede observarse en la Figura 1.1.

Este comportamiento es conocido desde los años treinta debido a las observaciones experimentales, pero las causas que lo originaban seguían siendo un misterio para la comunidad científica y debieron pasar casi 30 años para poder explicarlo. En 1963, científicos de los laboratorios Bell se encontraban explorando aleaciones que contenían metales como el niobio, molibdeno, renio y una pizca de hierro, cuando observaron que las pequeñas cantidades de este último a veces actuaban como imanes dentro de la aleación. En esa misma ubicación física y temporal, Myriam Sarachik¹ se dedicaba al estudio de un aspecto importante de estas aleaciones magnéticas: el cambio en la resistencia eléctrica con la temperatura. Ante la presencia de magnetismo causada por el hierro, Sarachik observó el fenómeno del aumento de la resistencia eléctrica al disminuir la temperatura y que en ausencia del mismo la resistividad se comportaba de manera usual. Este tipo de experimento atrajo su atención debido a su sencillez para ser llevado a cabo: el trabajo podía realizarse tranquilamente

¹Una de las primeras notas que leí acerca de Myriam fue publicada en el *New York Times*, la cual les recomiendo leer si quieren conocer un poco más acerca de ella. También les dejo *acá* otra nota, esta vez en español, en donde profundizan un poco más en sus razones para elegir estudiar física.



Figura 1.2: *Myriam Sarachik en los Laboratorios Bell en Nueva Jersey, 1963 (izquierda) y en su casa, 2020 (derecha).*

utilizando técnicas de un nivel de escuela secundaria para investigar un problema que llevaba 30 años siendo una piedra en el zapato de la comunidad científica. Una foto de Sarachik en los laboratorios Bell durante sus investigaciones se presenta en el panel izquierdo de la Figura 1.2, mientras que en el restante panel se la ve en las afueras de su casa en el año 2020.

Al mismo tiempo, pero en el lado teórico de la física, Jun Kondo [4] realizaba cálculos que sugerían que, a medida que la aleación se enfriaba, los electrones conseguían dispersarse cada vez más por los “imanes” de los átomos de hierro, aumentando la resistencia eléctrica. De alguna manera Kondo se encontró con los resultados experimentales de Sarachik y, con sus cálculos en mano, envió una versión preliminar de su trabajo a una científica que hasta el momento desconocía que se encontraban investigando, desde dos enfoques distintos, el mismo problema.

Myriam Sarachik supo inmediatamente que las mediciones que realizó encajaban con los cálculos teóricos de Kondo. De esta forma, Myriam Sarachik proporcionó la primera confirmación experimental [5] del que posteriormente pasaría a llamarse efecto Kondo. Resulta llamativo como dos personas desconocidas y de ramas distintas de la física comenzaron a abordar el mismo problema de manera casi simultánea.

Esta gran contribución de Sarachik fue ignorada por otros, incluidos sus colegas de los Laboratorios Bell, dificultando su camino en el estudio de la física de la materia condensada. A medida que pasaron los años y la presencia de las mujeres en el campo de la física experimental se hizo más común², también se normalizó hablar de los problemas de discriminación que sufrían y Sarachik no dudó en convertirse en una activista feminista y por los derechos humanos, recibiendo invitaciones para participar en distintos comités sobre el tema, tanto en Estados Unidos como en otros países.

Los descubrimientos teóricos de Kondo, respaldados por los experimentos de Sa-

²A comienzos del año asistí a una reunión de antiguos compañeros de grupo, donde había sólo una mujer investigadora. El invitado especial (un investigador que se encuentra actualmente en Estados Unidos) no quiso empezar a hablar sin contar con la presencia de esta mujer, mencionando que quería su opinión porque ella podía aportar mucho. Con todo el tema de Myriam Sarachik en mente, ese simple comentario me quedó resonando en la cabeza por varios días. En la actualidad no presencié discriminación por género en este ámbito laboral, pero no dudo que siga existiendo en algunos lugares del mundo, con lo cual esa pequeña consideración me alegró mucho el día.

rachik, causaron nuevos problemas para el entendimiento de las impurezas magnéticas en los metales. En sus cálculos perturbativos, Kondo encontró una contribución de la forma $\ln T$ en la resistencia eléctrica, el cual, sumada a la contribución $\propto T^5$ de los fonones, solucionaba el problema original de la presencia de un mínimo en la resistencia, pero al mismo tiempo generaba nuevas preguntas en cuanto a cómo describir esta teoría para temperaturas cercanas al cero, ya que el término de contribución logarítmica diverge en esa región. Gracias a eso se comenzó a buscar una nueva forma de describir el comportamiento a bajas temperaturas de metales que contenían impurezas magnéticas. Esto fue conocido como el problema de Kondo y, a lo largo de una década, atrajo la atención de muchos físicos teóricos buscando resolver el misterio.

En el año 1975 Kenneth Wilson dio una solución al problema de Kondo mediante el método del grupo de renormalización numérico [6] (NRG por sus siglas en inglés). Los avances de Wilson permitieron no sólo describir correctamente el problema de Kondo en el régimen de bajas energías y obtener resultados para el estado fundamental, sino que también proporcionó una nueva herramienta para ser aplicada a otros problemas. Aunque este método describía el comportamiento del modelo de manera muy eficaz, resultó difícil obtener resultados exactos para estados distintos del fundamental, ya que esto requería grandes recursos informáticos, especialmente en aquella época.

Media década más tarde, Paul Wiegmann [7] y Natan Andrei [8], de manera independiente, encontraron una solución exacta del modelo que Kondo había propuesto para describir impurezas magnéticas en metales. Estos autores emplearon el método conocido como Bethe *ansatz* y obtuvieron resultados analíticos que describían el sistema en todo el rango de temperatura. Su trabajo permitió confirmar las ideas de Wilson, que determinaron positivamente su método como una nueva herramienta para aplicar a otros problemas físicos.

Por lo contado hasta ahora, pareciera ser que no queda nada por descubrir en cuanto a la física de Kondo. Entonces, cualquiera podría preguntarse por qué sigue habiendo tanto revuelo en el área de materia condensada con respecto a este tópico³. El interés que generan estos sistemas ha persistido hasta la actualidad, no solo por la vasta cantidad de materiales que presentan esta fenomenología, sino también gracias a los diversos sistemas físicos y herramientas experimentales que han surgido recientemente, favoreciendo el estudio del efecto Kondo desde nuevas perspectivas. De hecho, el interés en el efecto Kondo se vio acrecentado con la llegada de nuevas tecnologías experimentales en el campo de la nanotecnología. Más precisamente, el uso de puntos cuánticos y nanocontactos atómicos permite reproducir y manipular las características de una impureza magnética. Los puntos cuánticos pueden ser pensados como “átomos artificiales” en los cuales, mediante técnicas experimentales, puede confinarse un número bien definido de electrones y al ser sistemas de dimensiones nanoscópicas poseen un espectro discreto y la repulsión entre electrones juega un rol fundamental en la física que los concierne.

Habiéndose mencionado solo una pequeña parte de la historia del efecto Kondo [4, 9, 10], no queda más que remarcar lo que cualquier estudiante comprende con el paso de los años en la carrera: los avances en la física no son cosa de una sola persona. Si bien el efecto que nos reúne en esta tesina lleva el nombre de Jun Kondo, a lo largo de esta pequeña contextualización fueron citados muchos nombres de físicos y físicas. Queda aún una vasta cantidad de nombres por conocer, algunos de los cuales aparecerán más adelante para acompañar este recorrido.

³Es exactamente esto lo que Leo Kouwenhoven y Leonid Glazman buscaron contar en su trabajo [9], donde además presentaron una agradable introducción a la física del efecto Kondo.

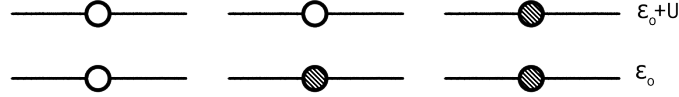


Figura 1.3: Estados posibles para la impureza aislada. En esta imagen se toma al círculo relleno como “ocupado” y al vacío como tal. Izquierda: vacía. Centro: simple ocupada. Derecha: doblemente ocupada. Imagen obtenida del libro *The Kondo Problem to Heavy Fermions* [10].

1.2. Modelo de Anderson

En 1961 Phillip Warren Anderson [11] desarrolló un modelo que permitía describir a las impurezas magnéticas dentro de metales con el objetivo de estudiar el problema de Kondo. En su versión más simple, este modelo describe la interacción entre una única banda de electrones de Bloch y una impureza mediante un término de hibridización. Esta versión del modelo de Anderson se conoce como el modelo de una sola impureza de Anderson, o SIAM por sus siglas en inglés. En el lenguaje de segunda cuantización este modelo se escribe de la forma

$$\hat{H}_{SIAM} = \hat{H}_{band} + \hat{H}_{imp} + \hat{H}_{hib} \quad (1.1)$$

con

$$\hat{H}_{band} = \sum_{\mathbf{k}\sigma} \varepsilon_{\mathbf{k}} \hat{n}_{\mathbf{k}\sigma}, \quad (1.2a)$$

$$\hat{H}_{imp} = \varepsilon_d \sum_{\sigma} \hat{n}_{\sigma} + U \hat{n}_{\uparrow} \hat{n}_{\downarrow}, \quad (1.2b)$$

$$\hat{H}_{hib} = V \sum_{\mathbf{k}\sigma} \left(\hat{c}_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger} \hat{d}_{\sigma}^{\dagger} + \hat{d}_{\sigma}^{\dagger} \hat{c}_{\mathbf{k}\sigma} \right). \quad (1.2c)$$

En las ecuaciones anteriores los operadores \hat{n} pueden ser escritos en término de los operadores electrónicos de creación y destrucción tanto para los sitios del baño de conducción, $\hat{n}_{\mathbf{k}\sigma} = \hat{c}_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger} \hat{c}_{\mathbf{k}\sigma}$, como para la impureza, $\hat{n}_{\sigma} = \hat{d}_{\sigma}^{\dagger} \hat{d}_{\sigma}$. Esta última es un átomo con un orbital muy localizado (3d o 4f) que puede ser ocupado por los electrones de conducción, cuyo comportamiento se encuentra gobernado por el hamiltoniano de la ecuación (1.2b). El sitio de la impureza posee una energía de sitio ε_d , la cual puede ser ocupada por uno o dos electrones, en este último caso con espines antiparalelos para cumplir el principio de exclusión de Pauli y con una energía U repulsiva entre ellos como consecuencia de la repulsión electrostática coulombiana. La ecuación (1.2c) representa la interacción entre los electrones presentes en la impureza y aquellos pertenecientes a la banda, los cuales pueden intercambiar sus lugares mediante la hibridización V que se considera por mera simplicidad, constante independiente del momento \mathbf{k} . Finalmente, el hamiltoniano (1.2a) modela a estos últimos electrones, siendo ε_k la relación de dispersión asociada a los electrones de Bloch.

La relación entre los parámetros ε_d , U y V permite distinguir entre tres regímenes del modelo de Anderson:

- *Límite atómico*, $V = 0$. En este límite el gas de electrones y la impureza se encuentran desacoplados. La impureza aislada puede encontrarse desocupada con energía nula $E_0 = 0$, simple ocupada con energía $E_{1,\sigma} = \varepsilon_d$ donde $\sigma = \uparrow, \downarrow$ o doble ocupada con $E_2 = 2\varepsilon_d + U$ (ver Figura 1.3). De estas tres configuraciones

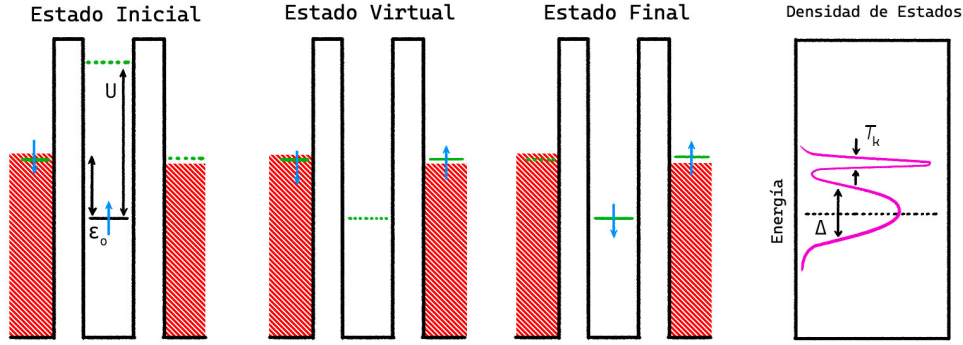


Figura 1.4: Esquemmatización del proceso de inversión del espín en la impureza del modelo de Anderson (primeros tres paneles de izquierda a derecha). Muchos eventos de este tipo se combinan para producir el efecto Kondo, propiciando la aparición de una resonancia extra en el nivel de Fermi (panel derecho). Como las propiedades de transporte son determinadas por aquellos electrones que se encuentran cercanos al nivel de Fermi, esta resonancia extra puede cambiar notablemente la conductancia del metal. Imagen obtenida de [9].

solo la simple ocupada cuenta con la presencia de un momento magnético. Para que este caso ocurra, la energía de sitio debe ser menor al nivel de Fermi $\varepsilon_d < \varepsilon_F$ de forma tal que la configuración sea favorable y $\varepsilon_d + U > \varepsilon_F$, $-U < \varepsilon_F$ penalizándose así la doble ocupación del nivel.

- *Caso no interactuante*, $U = 0$. En este régimen el sistema no presenta magnetismo y su susceptibilidad magnética es del tipo Pauli, siendo entonces independiente de la temperatura a bajas temperaturas.
- *Caso hibridizado e interactuante*, $V \neq 0$ y $U \neq 0$. Para este régimen se tienen dos procesos importantes. El primero es la formación de un momento magnético local debido al alto valor de la repulsión coulombiana que penaliza la doble ocupación. El segundo proceso es el apantallamiento del momento magnético de la impureza debido a los electrones de conducción. Este es llamado efecto Kondo, el cual se origina en la hibridización entre los sitios, posibilitando que los electrones localizados escapen al mar de conducción y viceversa. Durante estos procesos el espín de la impureza puede modificarse (pasar de *up* a *down* o viceversa), permitiendo la formación de un estado singlete entre la impureza y electrones del mar de Fermi. Clásicamente no se le permite al sistema sacar un electrón de la impureza sin agregar energía al mismo, pero dado que este proceso es de origen cuántico el principio de incertidumbre de Heisenberg permite la existencia de esta configuración por un pequeño período de tiempo [9]. Lo que ocurre entonces, es que durante este intervalo temporal otro electrón debe pasar por efecto túnel, desde el mar de Fermi hacia la impureza. Este proceso se encuentra descrito gráficamente en la Figura 1.4. Lo importante en ello es notar que este nuevo electrón podría tener una proyección de espín en el eje \hat{z} distinto al que tenía el electrón que se encontraba allí originalmente y generando lo que se conoce como *spin flip*. El estado que resulta de esta interacción es denominado singlete de Kondo, el cual una vez formado actúa como un potencial de dispersión de los otros electrones con energías cercanas a ε_F .

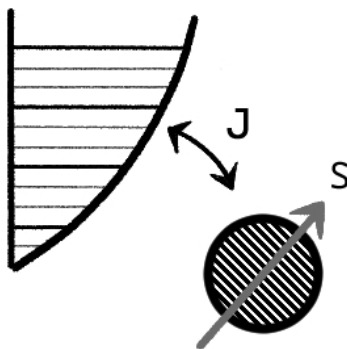


Figura 1.5: Modelo de Kondo de una impureza con energía de sitio ε_0 interactuando con un baño de conducción mediante la interacción de intercambio J .

1.3. Efecto Kondo

Durante décadas se observaron experimentalmente comportamientos anómalos en la resistividad a bajas temperaturas de sistemas metálicos no magnéticos y que contenían impurezas magnéticas. Si la impureza no era magnética, la dispersión de los electrones generaba una contribución a la resistividad independiente de la temperatura. Sin embargo, cuando la impureza era magnética se encontraba un mínimo en la curva de resistividad en función de la temperatura. Kondo encontró que este aumento se da de forma logarítmica para temperaturas tendiendo a $0K$, obteniendo incluso un resultado teórico no físico: la resistencia para temperatura cero divergía. Para explicar este mínimo extraño, Kondo utilizó el hamiltoniano antiferromagnético de intercambio s-d, a partir de entonces conocido como hamiltoniano de Kondo

$$\hat{H}_K = \sum_{\mathbf{k}\sigma} \varepsilon_{\mathbf{k}} \hat{n}_{\mathbf{k}\sigma} - 2J \hat{\mathbf{S}} \cdot \hat{\mathbf{s}}(0), \quad (1.3)$$

donde se tiene un momento magnético localizado de espín S inmerso en un baño de conducción electrónico con cuyos miembros se acopla mediante la interacción de Kondo J , un acoplamiento de intercambio antiferromagnético entre el momento local y el espín de los electrones de conducción, estando este último representado a través de la densidad de espín $\mathbf{s}(0)$ en el sitio de la impureza (tomado como el origen por simplicidad). Gráficamente este modelo se encuentra esquematizado en la Figura 1.5. Este hamiltoniano ya había sido introducido con anterioridad por Clarence Zener, Tadao Kasuya y Charles Kittel para analizar distintos problemas relacionados con los espines nucleares interactuando con los espines de los electrones de conducción.

En referencia a los parámetros del modelo de Anderson, el efecto Kondo se produce cuando $\varepsilon_d + U - \varepsilon_F, \varepsilon_F - \varepsilon_d \gg V$, situación para la cual se da la aparición de momentos magnéticos en la impureza. En este régimen, es posible derivar un modelo efectivo mediante perturbaciones de segundo orden en las excitaciones virtuales obteniéndose una relación

$$J \propto \frac{V^2}{|\varepsilon_d|} + \frac{V^2}{\varepsilon_d + U}. \quad (1.4)$$

Este procedimiento se conoce como “transformación de Schrieffer-Wolff” [10].

Para un sistema Kondo a bajas temperaturas, el estado fundamental resulta ser un estado singlete formado por las proyecciones de espín de la impureza y del baño de conducción

$$\frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\rangle |\downarrow\rangle_c - |\downarrow\rangle |\uparrow\rangle_c), \quad (1.5)$$

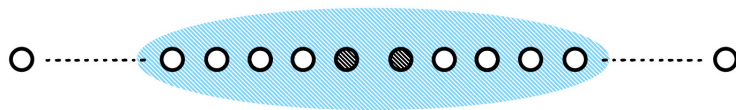


Figura 1.6: Esquema del modelo de dos canales (blanco) y dos impurezas (negro) que se estudiará en esta tesis. En color celeste se encierra la llamada nube de Kondo.

donde $|\sigma\rangle$ representa el estado de la impureza con espín $\sigma = \uparrow, \downarrow$ y $|\sigma'\rangle_c$ es un estado de conducción con un peso importante cerca de la impureza y con espín $\sigma' = \uparrow, \downarrow$. Este estado fundamental es generado mediante procesos de intercambio entre el electrón localizado y los electrones libres del metal, siendo un fenómeno de muchos cuerpos por cuanto es un estado colectivo imposible de describir en una teoría de electrones no interactuantes. Algo llamativo de este estado es el hecho de que el espín de la impureza se encuentra apantallado por sólo una porción de los electrones del baño y, por lo tanto, cualquiera esperaría que los electrones que no forman parte de esto puedan ser despreciados, pero este no es el caso. Mediante argumentos de grupo de renormalización se sabe que los demás electrones contribuyen a que la interacción de intercambio efectiva entre los espines de la impureza y de los electrones que la apantallan sea cada vez más intensa a medida que la temperatura disminuye [10]. El estado singlete de Kondo contribuye a la formación de una resonancia en la densidad espectral de la impureza para energías cercanas a la energía de Fermi, la cual se denomina “resonancia Kondo” y afecta considerablemente aquellas propiedades del sistema que depende de la densidad de estados cerca del nivel de Fermi.

Una de las características más llamativas del efecto Kondo es la propiedad de *scaling*, es decir, el comportamiento universal de las propiedades del sistema siguiendo leyes de escala. A bajas temperaturas, la física del modelo está gobernada por una única escala de energía: la temperatura de Kondo T_K , la cual está estrechamente relacionada a la energía de ligadura del singlete de Kondo (*a grosso modo*, la energía que separa el estado fundamental singlete del estado excitado triplete correspondiente) y puede ser estimada analíticamente, para el SIAM, mediante la fórmula de Haldane [12]

$$T_K = \sqrt{\frac{U\Delta}{2}} e^{\frac{\pi\varepsilon_d(\varepsilon_d+U)}{2U\Delta}}. \quad (1.6)$$

Esta universalidad implica que la dependencia de las propiedades del sistema con respecto a, por ejemplo, la temperatura T , está dada por leyes que dependen de T/T_K en lugar de los parámetros del hamiltoniano y la temperatura por separado. Por lo tanto, lo que se tiene al realizar estos escaleos son leyes que no dependen de los detalles microscópicos del sistema. T_K depende exponencialmente de las energías involucradas en el hamiltoniano (interacción de intercambio, repulsión coulombiana, etc) y es por esto mismo que un estudio perturbativo del problema (una serie cortada en unos pocos términos) no permitió a Kondo recuperar la física del problema. Para resolver esto, fue necesario introducir las ideas de escala y del grupo de renormalización [10].

En lo que a las propiedades espaciales del efecto Kondo respecta, hay mucho menor conocimiento que con su dependencia en energía o temperatura. Esto es debido en parte al hecho de que los métodos más utilizados para analizar este tipo de sistemas no trabajan en el espacio real de los mismos, generando algunas dificultades para el estudio de las propiedades asociadas. Hace ya algunos años que se conoce y estudia la existencia de una longitud de apantallamiento de Kondo $\xi_k \propto 1/T_K$, pudiéndose ver como la región de los baños electrónicos que forma el singlete de Kondo

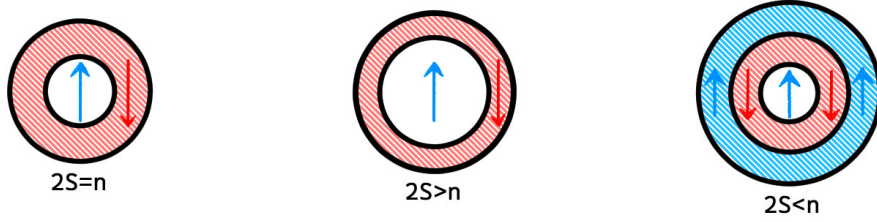


Figura 1.7: Esquemización de diferentes situaciones para un hamiltoniano de Kondo con un espín arbitrario S apantallado por n baños de conducción. Izquierda: si $2S = n$ se tiene un efecto Kondo totalmente apantallado. Centro: si $2S > n$ se tiene un efecto Kondo subapantallado donde el espín de la impureza no puede ser completamente compensado por los baños de conducción y queda un espín remanente. Derecha: si $2S < n$ se tiene un efecto Kondo sobreapantallado donde el espín de los baños de conducción es más del que se necesita para apantallar al de la impureza. Imagen obtenida de la tesis doctoral de Germán Blesio [13].

con la impureza del sistema (ver Figura 1.6). Esta región es denominada “nube de Kondo”. Su longitud, la cual se espera gobierne las correlaciones espaciales para $T \lesssim T_K$, es muy difícil de observar experimentalmente a causa de que el apantallamiento ocurre en distancias bastante grandes, del orden de los μm , y se atenúa como $1/r^d$, siendo d la dimensión del sistema y haciendo así que una dimensionalidad reducida sea una mejor candidata para su estudio y observación. Asumiendo una analogía directa con las magnitudes térmicas que se comportan como funciones de escala $f(T/T_K)$, se podría esperar que magnitudes puramente cuánticas, como la entropía de entrelazamiento de impurezas a temperatura cero, también sea una función de escala $g(r/\xi_K)$, donde r es la extensión espacial del subsistema sobre el que se calcula el entrelazamiento.

En 1980, Philippe Nozières y André Blandin [14] notaron que la mayoría de los trabajos publicados hasta entonces, se concentraban en modelos idealizados, lo más sencillos posibles, para poder focalizar la atención de los estudios en las propiedades de muchos cuerpos. Usualmente, la estructura orbital de la impureza no era tenida en cuenta y se consideraba que tenía un único grado de libertad de espín. A raíz de esto, ambos científicos se enfocaron en el estudio del rol de la estructura orbital de los electrones de la impureza y del número de baños de conducción en la física de Kondo. El objetivo de este par estaba relacionado con poder utilizar modelos que se asemejen más a los sistemas físicos reales y, por lo tanto, permitan una mejor comprensión de los resultados experimentales. Considerando un hamiltoniano de Kondo donde un espín arbitrario S es apantallado por n baños de conducción de espín $S = 1/2$, encontraron que la naturaleza del estado fundamental va a depender de la relación entre S y n . Estas relaciones se pueden ver resumidas y de forma gráfica en la Figura 1.7. Si $n = 2S$ (incluyendo $2S = n = 1$) corresponde al caso *totalmente apantallado* con un singlete como estado fundamental, tal como se vio al comienzo de esta sección. El modelo para esta instancia se comporta como un líquido de Landau-Fermi a bajas temperaturas. Si $n < 2S$ se tiene un efecto Kondo *subapantallado*, donde el espín total del estado fundamental es $S - n/2$ y la dispersión de los electrones de conducción cerca del nivel de Fermi corresponde a un comportamiento tipo líquido de Fermi *singular*. Finalmente, si $2S < n$ se encuentra un efecto Kondo *sobreapantallado*, donde la dispersión inelástica persiste incluso a temperaturas y energías de excitación nulas, llevando a un líquido de *non-Fermi*. En esta tesina se tiene como protagonista al caso $2S = n$, un efecto Kondo totalmente apantallado.

1.4. Entrelazamiento cuántico

La nube de Kondo es un objeto macroscópico de electrones de conducción que apantalla el espín de la impureza magnética. Entre ellas se produce un entrelazamiento cuántico a través de la formación de un singlete de espín. Aunque el entrelazamiento es la esencia de los efectos Kondo, sus propiedades permanecen sin explorar. Como el título de esta tesina lo indica, más adelante analizaremos resultados relacionados al entrelazamiento cuántico en sistemas que presentan efecto Kondo. Esta sección pretende formar un colchón de conocimientos básicos sobre entrelazamiento que permitan comprender los resultados que se discutirán, así como sus respectivas explicaciones.

En el ámbito científico nunca se han dejado de cuestionar los nuevos descubrimientos o interpretaciones propuestas. El tema que compete a esta sección, el entrelazamiento cuántico, podría dar testimonio de cómo fue juzgado cuando se lo presentó en 1927 durante un congreso en Bruselas, junto con la interpretación de Copenhague con Niels Bohr como orador. Albert Einstein no estaba de acuerdo con esta nueva teoría y en contrapuesta, se encontraba seguro de que podía convencer a Bohr de lo absurdo que sonaba. En 1935, Einstein y dos colaboradores, Boris Podolsky y Nathan Rosen, publicaron lo que se conoció como la paradoja de Einstein-Podolsky-Rosen, o EPR para abreviar [15]. Esto fue escrito en forma matemática por Podolsky, pero para entenderlo más simplemente se puede suponer un sistema en donde se tienen aislados en una caja dos caramelos, uno verde y otro rojo. La caja es un sistema aislado que separa estos caramelos de todo lo demás. Si alguien elige un caramelo al azar con los ojos cerrados, al verlo sabrá también el color del caramelo que quedó en la caja. Esto implicaba conocer el color del caramelo en la caja sin la perturbación que significa observarlo, y sólo es posible porque el par de caramelos forman un sistema enlazado. Esta manera de pensar al entrelazamiento resulta, si bien útil, también un poco clásica en el sentido de que se mantiene la idea de localidad (cuando se mete la mano en la caja es posible saber, dada sus ubicaciones, que caramelo se sacará). El ejemplo más usual para explicar el entrelazamiento necesita de una (no tan) pequeña base cuántica. Si se tiene un sistema de dos partículas de espín $1/2$ formando un singlete, al realizar una medición sobre el espín de una de ellas (obteniéndose espín *up* por ejemplo) el de la restante quedará automáticamente determinado (espín *down*). El término “entrelazamiento” fue adoptado por Erwin Schrödinger después de leer el trabajo de EPR y es uno de los fenómenos más intrigantes de la mecánica cuántica.

El entrelazamiento cuántico al mismo tiempo es un recurso fundamental para el área de informática cuántica. Dada la importancia del concepto del mismo en este último campo, se ha puesto el foco en los sistemas estudiados en materia condensada debido a que en ellos es posible observar estados entrelazados. Además, se ha encontrado un especial vínculo entre el entrelazamiento cuántico y las transiciones de fase cuánticas, las cuales describen cambios en el estado fundamental de un sistema a temperatura cero al variar algún parámetro en el hamiltoniano del sistema, como ser el campo magnético, el parámetro de anisotropía u otros [16]. Lian-Ao Wu [17] demostró de manera general que las transiciones de fase cuánticas son señaladas por medio de una discontinuidad en alguna medida del entrelazamiento en un sistema cuántico. Aunque el entrelazamiento es una nueva herramienta para estudiar las transiciones de fase cuánticas en diversos modelos, aún no se sabe por qué algunas medidas de éste son útiles y otras no.

1.4.1. Matriz densidad

En un sistema cuántico que se encuentra en un estado $|\psi\rangle$, que es una mezcla estadística de los estados $|\psi_i\rangle$ del espacio de Hilbert H con probabilidades asociadas λ_i , se define la matriz densidad del sistema ρ como [18]

$$\rho = \sum_{i=1}^n \lambda_i |\psi_i\rangle \langle \psi_i|. \quad (1.7)$$

Esta matriz característica del sistema posee varias propiedades de interés:

1. El valor medio de un observable \mathcal{O} en el estado $|\psi\rangle$ se obtiene mediante

$$\langle \mathcal{O} \rangle_\psi = \sum_{i=1}^n \lambda_i \langle \psi_i | \mathcal{O} | \psi_i \rangle. \quad (1.8)$$

2. Como $\langle \mathbb{I} \rangle_\psi = 1$ se cumple que $Tr(\rho) = \langle \mathbb{I} \rangle_\psi = 1 = \sum_{i=1}^n \lambda_i$. Este resultado era esperado debido a que la suma de las probabilidades de los distintos estados en una mezcla estadística debe ser igual a 1.
3. La matriz densidad es definida positiva debido a que el valor medio de un operador sin autovalores negativos debe ser siempre positivo.
4. La matriz densidad se puede diagonalizar utilizando una transformación unitaria de la forma $\rho \rightarrow U^\dagger \rho U$. Utilizando este resultado se encuentra además, que

$$Tr(\rho^2) = \sum_{i=1}^n p_{ii}^2 \leq \left(\sum_{i=1}^n p_{ii} \right)^2 = Tr^2(\rho) = 1. \quad (1.9)$$

En ciertas ocasiones el sistema total estará compuesto de dos subsistemas A y B , con lo cual el espacio de Hilbert del sistema será $H = H_A \otimes H_B$. Para estos casos, es conveniente contar con la matriz reducida del subsistema ρ_A definida como

$$\rho_A = Tr_B(\rho). \quad (1.10)$$

La matriz reducida se define de manera tal que $\langle \mathcal{O} \rangle_A = Tr(\rho_A \mathcal{O}_A)$, en donde \mathcal{O}_A es un observable arbitrario que actúa en el subsistema A .

1.4.2. Estados entrelazados

Los sistemas cuánticos que incluyan dos o más subsistemas no siempre van a poder ser tratados como en el caso clásico, donde las partes no interactuantes son separadas, estudiadas de forma independiente y luego recombinadas para entender al sistema en su totalidad. En la mecánica cuántica, el estado global de un sistema no será necesariamente el producto de los estados de cada subsistema por separado. Al tipo de estados que no son el producto de los estados de cada subsistema se los conoce como “estados entrelazados”.

Si se tiene un conjunto $|\phi_i\rangle$ de autoestados de un conjunto completo de operadores, un estado será puro si este puede escribirse como una combinación lineal

$$|\Psi\rangle = \sum_i c_i |\phi_i\rangle, \quad \langle \Psi | \Psi \rangle = 1. \quad (1.11)$$

Considerando un sistema bipartito, si $|\Psi\rangle$ es un estado perteneciente al espacio de Hilbert del mismo, entonces este estado se dice que está entrelazado si no es

posible escribirlo como un producto tensorial de estados correspondientes a cada subsistema

$$|\Psi\rangle \neq |\Psi_A\rangle \otimes |\Psi_B\rangle. \quad (1.12)$$

Un ejemplo muy conocido de este tipo de estados es el estado singlete formado por dos partículas de espín $1/2$

$$|\Psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle). \quad (1.13)$$

Si en este estado $|\Psi\rangle$ se mide, por ejemplo, la proyección de espín en la dirección \hat{z} para la partícula 1 y se obtiene el autovalor correspondiente a espín *up*, entonces se sabrá que la partícula 2 se encuentra con espín *down*. El hecho de medir sobre una partícula hará colapsar a la medición de ambas, independientemente de su separación espacial.

Si $|\Psi\rangle$ no es un estado puro, es decir, si se encuentra en una mezcla estadística de estados, se dice que es un estado mixto.

1.4.3. Entropía de entrelazamiento de von Neumann

En mecánica cuántica se define la entropía de von Neumann $S(\rho)$ [19] como una extensión del concepto de entropía de Gibbs de la mecánica estadística

$$S(\rho) = -Tr(\rho \ln \rho). \quad (1.14)$$

Utilizándose los autovalores λ_i de la matriz densidad se puede reescribir la definición anterior de la forma

$$S(\rho) = -\sum_i \lambda_i \ln \lambda_i, \quad (1.15)$$

en donde es necesario considerar que $0 \ln 0 = 0$. Esta magnitud no representa ninguna magnitud física, es decir, no es un observable, pero sí representa una función de estado del sistema bajo estudio descrita por la matriz densidad. Esta entropía cuenta con algunas propiedades:

1. Es nula si y solo si ρ es un estado puro.
2. Tomará su valor máximo e igual a $\ln N$ para un estado máximamente entrelazado, en donde N es la dimensión del espacio de Hilbert.
3. Es invariante bajo cambios en la base de ρ .
4. Es aditiva para sistemas independientes.

Para el caso de un sistema bipartito en el estado dado por la matriz densidad ρ , la entropía del sistema global estará dada por la ecuación (1.14). En cuanto a los dos subsistemas se tendrá que

$$S_A(\rho_A) = -Tr(\rho_A \ln \rho_A), \quad \rho_A = Tr_B(\rho). \quad (1.16a)$$

$$S_B(\rho_B) = -Tr(\rho_B \ln \rho_B), \quad \rho_B = Tr_A(\rho). \quad (1.16b)$$

Si el estado del sistema total y el del subsistema A son puros, entonces el estado del subsistema restante lo será también y por lo tanto el estado global será separable. En caso de que el estado total esté entrelazado se cumplirá que $S_A(\rho_A) > 0$.

Para bajar a tierra estos conceptos es una buena idea realizar un ejemplo de los más clásicos y que, además, nos servirá para interpretar los resultados dentro de

unos capítulos. Consideremos nuevamente el estado singlete (1.13) formado por dos partículas de espín 1/2. En este caso la matriz densidad del sistema tendrá la forma

$$\rho = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\downarrow\rangle\langle\downarrow\uparrow| + |\downarrow\uparrow\rangle\langle\uparrow\downarrow|), \quad (1.17)$$

o escrita en su forma matricial

$$[\rho] = \begin{pmatrix} 1/2 & 0 \\ 0 & 1/2 \end{pmatrix}. \quad (1.18)$$

Calculando los autovalores de la matriz $[\rho]$ se encuentra que $\lambda_{1,2} = 1/2$. Con este resultado y la ecuación (1.15) se procede a calcular la entropía de entrelazamiento

$$S(\rho) = -\sum_i \lambda_i \ln \lambda_i = -2 \frac{1}{2} \ln \left(\frac{1}{2} \right) = -\ln \left(\frac{1}{2} \right) = \ln 2.$$

Este valor corresponde a $\ln N$, donde N es la dimensión del espacio de Hilbert, siendo en este caso $N = 2$ y la base del espacio $\{|\uparrow\downarrow\rangle, |\downarrow\uparrow\rangle\}$.

1.4.4. Otras maneras de medir entrelazamiento

Si bien en esta tesina se utilizó la entropía de von Neumann como medida de entrelazamiento, resulta útil (e interesante) conocer otras maneras de medir entrelazamiento.

La medida de entrelazamiento cuantifica qué tan entrelazado está un estado cuántico. Formalmente, esto puede obtenerse mediante cualquier función real no negativa de un estado que no pueda aumentar bajo operaciones locales y comunicación clásica, y que tome valores nulos para estados separables. Además de la mencionada entropía de Von Neumann existen otras medidas de entrelazamiento.

Para los sistemas correlacionados de muchos cuerpos, cómo cuantificar apropiadamente el entrelazamiento y cuál es su conexión intrínseca con las transiciones de fase cuánticas han sido preguntas tanto desafiantes como fundamentales en la última década. Se espera que el entrelazamiento cuántico juegue un papel importante en la determinación de las transiciones de fase cuánticas, ya que esto aportará a un conocimiento más profundo de este tipo de fenómenos. En este contexto, la concurrencia entre espines ha sido un elemento de estudio en sistemas fuertemente correlacionados [20] debido a que permite estudiar el entrelazamiento entre partes de un sistema que no son necesariamente complementarias (en el caso del SIAM, por ejemplo, permitiría estudiar el entrelazamiento entre la impureza y su sitio electrónico más cercano).

Varios autores han encontrado que la concurrencia, entropía de Von Neumann y otras medidas del entrelazamiento son herramientas útiles para identificar transiciones de fase de diversos sistemas correlacionados [21–23], ya que estas cantidades presentan valores extremos y/o singularidades en los puntos críticos. Sin embargo, en trabajos recientes se observó que la presencia de puntos críticos en por ejemplo la concurrencia, no son necesariamente indicadores de una transición de fase [24].

Concurrencia entre espines

La concurrencia [25] es una medida de entrelazamiento para sistemas compuestos de dos subsistemas de dimensión 2 (*qubits*) y que funciona tanto para estados puros como mixtos. El por qué de que esta magnitud permita medir entrelazamiento no

es algo sencillo de explicar, y a los alcances de este trabajo, tampoco posee mucha importancia. La concurrencia $C(\rho_{AB})$ se define como

$$C(\rho_{AB}) = \max\{0, \lambda_1 - \lambda_2 - \lambda_3 - \lambda_4\}, \quad (1.19)$$

donde ρ_{AB} es la matriz densidad reducida del subsistema formado por *qubits* A y B, y los λ_i^2 son los autovalores, en orden decreciente, del operador

$$R = \rho_{AB}(\sigma_y \otimes \sigma_y)\rho_{AB}^*(\sigma_y \otimes \sigma_y), \quad \sigma_y = \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix}. \quad (1.20)$$

Dada esta definición se clasifica a los estados dependiendo del valor de $C(\rho_{AB})$:

- Un estado es separable si y solo si $C(\rho_{AB}) = 0$.
- Un estado está entrelazado si y solo si $C(\rho_{AB}) > 0$.
- Un estado está máximamente entrelazado si y solo si $C(\rho_{AB}) = 1$.

Más aún, cuanto mayor la concurrencia, mayor el entrelazamiento (se dice que la concurrencia es una función monótona del entrelazamiento).

La concurrencia permite calcular lo que se conoce como “entrelazamiento de formación”, lo cual no es otra cosa que el promedio de la entropía de entrelazamiento sobre una descomposición de un estado mixto en estados puros.

1.5. Modelo de impureza multiorbital

En esta tesina se trabajó con un modelo de Anderson de dos canales (2CAM) entre los cuales se ubica una impureza con dos orbitales degenerados, impureza que aloja aproximadamente a dos electrones formando un espín $S = 1$. Por cuestiones de simetría, cada orbital hibridiza únicamente con una banda de conducción asociada (por ejemplo, el “orbital de la izquierda” solo tiene permitido hibridizar con el baño de conducción de la izquierda). Gráficamente este modelo se esquematiza en la Figura 1.8. El hamiltoniano, escrito en el lenguaje de segunda cuantización, consta de tres términos

$$\hat{H}_{2CAM} = \hat{H}_{band} + \hat{H}_{imp} + \hat{H}_{hib}, \quad (1.21)$$

donde

$$\hat{H}_{band} = \sum_{\mathbf{k}\alpha\sigma} \varepsilon_{\mathbf{k}\alpha} \hat{c}_{\mathbf{k}\alpha\sigma}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k}\alpha\sigma}, \quad (1.22a)$$

corresponde a los canales de conducción,

$$\begin{aligned} \hat{H}_{imp} = & \sum_{\alpha} \varepsilon_{d\alpha} \hat{n}_{\alpha} + U \sum_{\alpha} \hat{n}_{\alpha\uparrow} \hat{n}_{\alpha\downarrow} + \left(U' - \frac{J_H}{2} \right) \hat{n}_a \hat{n}_b - 2J_H \hat{\mathbf{S}}_1 \cdot \hat{\mathbf{S}}_2 \\ & + D \hat{S}_z^2 + J_H \left(\hat{d}_{a\uparrow}^\dagger \hat{d}_{a\downarrow}^\dagger \hat{d}_{b\uparrow} \hat{d}_{b\downarrow} + \text{h.c.} \right) \end{aligned} \quad (1.22b)$$

a la impureza y

$$\hat{H}_{hib} = \sum_{\mathbf{k}\alpha\sigma} V_{\alpha} \left(\hat{c}_{\mathbf{k}\alpha\sigma}^\dagger \hat{d}_{\alpha\sigma} + \hat{d}_{\alpha\sigma}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k}\alpha\sigma} \right), \quad (1.22c)$$

a la interacción entre impureza y baños de conducción. $\hat{n}_{\alpha} = \hat{n}_{\alpha\uparrow} + \hat{n}_{\alpha\downarrow}$, $\hat{n}_{\alpha\sigma} = \hat{d}_{\alpha\sigma}^\dagger \hat{d}_{\alpha\sigma}$ con $\alpha = a, b$ siendo el índice que referencia a los dos orbitales y sus respectivos baños de conducción. En el hamiltoniano de la impureza (1.22b) se encuentran las energías de sitio (degeneradas) $\varepsilon_{d\alpha} \equiv \varepsilon_d$, la repulsión coulombiana intraorbital U

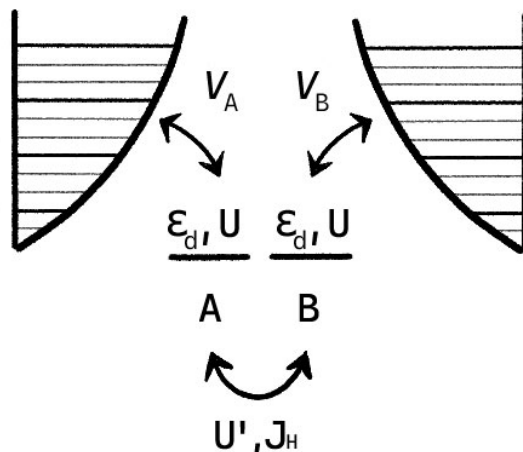


Figura 1.8: En el 2CAM se tienen dos baños $\alpha = a, b$ de conducción que hibridizan con sus respectivos orbitales de la impureza mediante V_α . Estos últimos poseen energía de sitio degenerada ε_d , repulsión coulombiana U por doble ocupación, repulsión entre orbitales U' y una interacción de Hund J_H .

e interorbital U' , la interacción de Hund J_H y la anisotropía magnética de sitio D . El origen físico de la anisotropía magnética reside en la interacción espín-órbita dentro de la impureza, a consecuencia de la cual la orientación del espín es favorecido ($D < 0$) o desfavorecida ($D > 0$) a lo largo del eje de cuantización z . Se considera, además de orbitales degenerados α , parámetros de hibridación que no dependen del orbital y se puede escribir entonces $V_\alpha \equiv V$.

La elección de un método numérico para realizar los cálculos trae consigo ventajas y desventajas. En esta tesina se trabajó utilizando la implementación ITensor del grupo de renormalización de la matriz densidad (DMRG por sus siglas en inglés) con la cual, a diferencia de NRG, no es posible quedarse con un conjunto reducido de estados del espacio de Hilbert de la impureza (por ejemplo, no es posible desechar exactamente los estados vacío o de ocupación cuatro de la impureza). A causa de esto se debe realizar una elección de parámetros que permita priorizar energéticamente los estados de interés. Con esto en mente, los parámetros elegidos deben ser favorables a la existencia de una impureza cuyo momento magnético corresponde a un espín igual o aproximadamente igual a uno. Consecuentemente la impureza debe tener una ocupación cercana a dos, con un electrón en cada orbital y con los espines de los dos electrones acoplados ferromagnéticamente. Esto se logra cumpliendo con las siguientes relaciones

- *Medio llenado de cada orbital:* $\varepsilon_d = -U/2$, lo cual mantiene en muy buena medida un electrón en promedio en cada orbital de la impureza aislada si U' es mucho menor a U . En esta tesina también se consideran situaciones donde U es muy grande y no vale la relación anterior (sin embargo, se sigue tomando ε_d debajo de la energía de Fermi). En tales casos la ocupación de cada orbital no es estrictamente uno, sino que es algo menor.
- *Acoplamiento ferromagnético entre orbitales:* valores grandes para la regla de Hund J_H de manera que se priorice la presencia de estados tripletes en la impureza. La primera regla de Hund de la física atómica asegura que esto es lo que ocurre en sistemas reales.
- Tras las elecciones anteriores, conviene tomar $U' = J_H/4$ para favorecer los

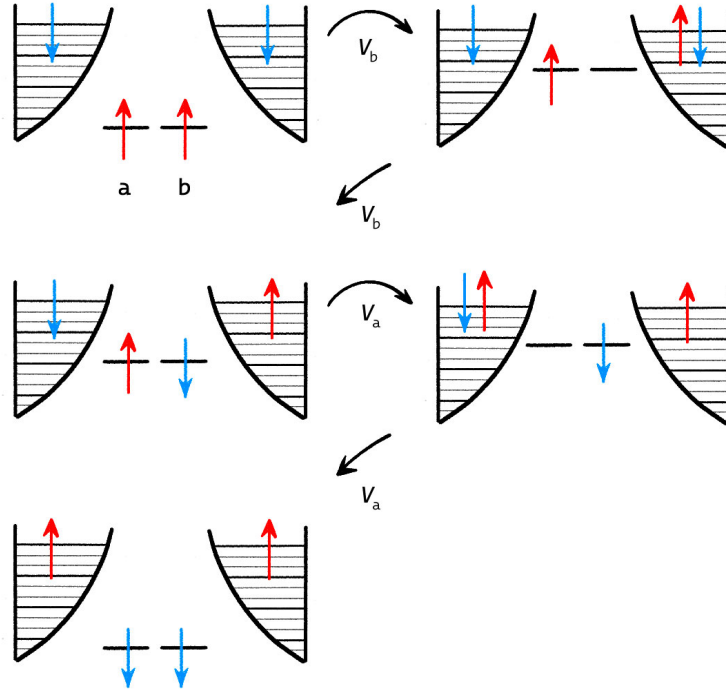


Figura 1.9: Proceso de hibridización de orden cuatro que lleva a un espín-flip efectivo entre las proyecciones $S_z = \pm 1$ para valores negativos de D . Imagen obtenida de la tesis doctoral de German Blesio [13].

estados con dos electrones independientemente de los valores elegidos para J_H y U .

- Los parámetros V_α afectan a la física de la impureza solo a través de la combinación Δ_α , también llamada hibridización,

$$\Delta_\alpha \equiv \pi V_\alpha^2 \rho_\alpha^0(\varepsilon_F), \quad (1.23)$$

donde ρ_α^0 es la densidad de estado del canal de conducción α sin hibridizar con la impureza. Se consideran baños de conducción idénticos, por lo tanto $\Delta_\alpha \equiv \Delta$. Para la existencia de un buen momento magnético en la impureza (régimen Kondo) es necesario tomar $\Delta \ll |\varepsilon_d|$, lo que dificulta los saltos de electrones de los canales de conducción a la impureza y viceversa.

Muy convenientemente la diagonalización del hamiltoniano de la impureza puede realizarse por bloques si se tiene en consideración el hecho de que éste conmuta con el operador número de electrones. Tomando una notación de la forma $|a, b\rangle = |\text{imp } a, \text{imp } b\rangle$ y analizando en particular el subespacio asociado a dos electrones se encuentran los estados tripletes con energías $E_T = 2\varepsilon_d + U' - J_H$

$$|\uparrow, \uparrow\rangle, \quad (1.24a)$$

$$\frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow, \downarrow\rangle + |\downarrow, \uparrow\rangle), \quad (1.24b)$$

$$|\downarrow, \downarrow\rangle, \quad (1.24c)$$

dos estados singletes excitados con energía $E_S^- = 2\varepsilon_d + U' - J_H$

$$\frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow, \downarrow\rangle - |\downarrow, \uparrow\rangle), \quad (1.25a)$$

$$\frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\downarrow, 0\rangle - |0, \downarrow\uparrow\rangle), \quad (1.25b)$$

y un estado singlete excitado con energía $E_S^+ = 2\varepsilon_d + U + J_H$

$$\frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\downarrow, 0\rangle + |0, \downarrow\uparrow\rangle). \quad (1.26)$$

Para el caso de la impureza aislada, si se consideran valores negativos de anisotropía, entonces el estado fundamental estará doblemente degenerado correspondiendo a $\hat{S}_z = \pm 1$. Dado que estas proyecciones de espín difieren en $|\Delta\hat{S}_z| = 2$ no es posible conectar el proceso de hibridización de segundo orden usual que origina la interacción de intercambio Kondo. Sin embargo, se encuentran procesos de cuarto orden en la hibridización que sí dan lugar a un apantallamiento completo de la impureza $S = 1$ para valores negativos de D , los cuales se esquematizan en la Figura 1.9, encontrándose entonces con el efecto Kondo [26]. Al aumentar la anisotropía y llegar a valores positivos se tiene que el estado fundamental está no degenerado, debido a que se favorece al triplete de proyección de espín nula.

1.5.1. Aplicaciones a sistemas físicos

Aquellos trabajos que dieron origen a esta tesis utilizaron el 2CAM con $S = 1$ a fin de representar impurezas magnéticas en cadenas de oro dopadas con oxígeno [27]. La impureza utilizada, un átomo de níquel, al ser ubicada entre las cadenas se mantiene magnética con dos huecos degenerados formando un espín $S = 1$. Se encuentra que las cadenas de oro, al ser dopadas con oxígeno, tienen sus bandas $5d$ cruzando el nivel de Fermi⁴. Con estos dos resultados el sistema puede ser modelado por dos bandas de conducción $\alpha = a, b$ que corresponden a las dos bandas del oro de simetrías d_{yz} y d_{xz} , las cuales se acoplan con los orbitales de la impureza. En el caso de la impureza de níquel se tiene que en el estado fundamental participan los orbitales d_{yz} y d_{xz} , los cuales resultan modelados por dos orbitales $\alpha = a, b$ de energías $\varepsilon_{d\alpha}$ degeneradas.

Para este sistema, modelado como se describió, se ha encontrado una transición de fase topológica conducida por la anisotropía de sitio D [28]. Al resolver el modelo mediante NRG, variando D se encontró una transición de fase cuántica topológica (TQPT, por sus siglas en inglés) que ocurre para un valor finito de anisotropía D_c proporcional a la temperatura de Kondo T_K^0 , donde el supraíndice refiere al caso isotrópico. Esta TQPT separa dos fases de líquidos de Fermi. Para valores $D < D_c$ el espín de la impureza se encuentra apantallado por el efecto Kondo usual, mientras que para $D > D_c$ el grado de libertad magnético de la impureza es apagado por la anisotropía. Este último caso recibió el nombre de líquido de Fermi *non-Landau*, porque es un líquido de Fermi que no está conectado adiabáticamente con el caso no interactivo [29]. En la región cercana a D_c existe una fase de líquido de *non-Fermi*, del tipo efecto Kondo de dos canales sobreapantallado (2CK). En la Figura 1.10 se presenta un diagrama de fase del modelo en función de la temperatura y la anisotropía.

⁴En ausencia del oxígeno solo la banda $6s$ del oro, que no hibridiza con los orbitales de la impureza, es la que cruza el nivel de Fermi.

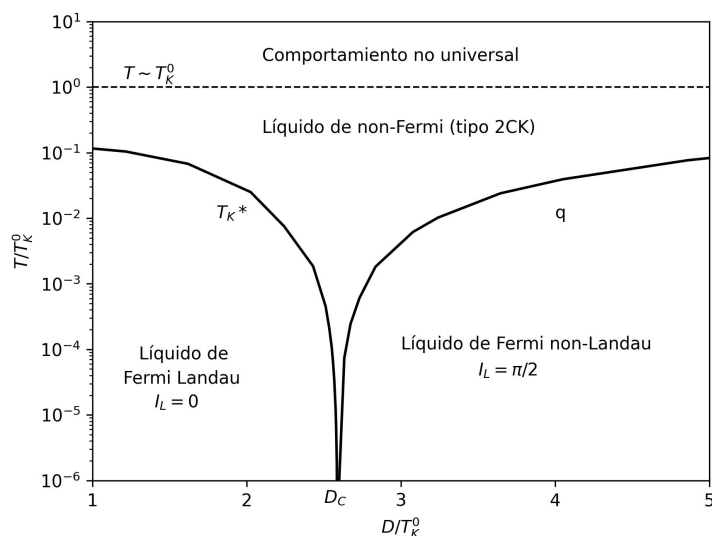


Figura 1.10: Esquema del diagrama de fase del 2CAM como función de la temperatura y la anisotropía. Las curvas en trazo continuo indican las regiones de crossover entre el comportamiento de líquido de Fermi y el de non-Fermi, mientras que la línea a trazos señala el inicio del comportamiento no universal a mayores temperaturas. Imagen obtenida de la tesis doctoral de German Blesio [13].

Impulsadas por sus propiedades novedosas y su potencial uso en nuevos dispositivos, las moléculas individuales en contacto con electrodos o superficies metálicas han sido foco de interés en el último tiempo. En este contexto, recientemente se ha encontrado que moléculas de ftalocianina de hierro sobre superficies de oro pueden ser modelada mediante un 2CAM como el que se describe al comienzo de esta sección y presentan una fase de tipo líquido de Fermi *non-Landau*. Los resultados teóricos expuestos en [29] replican aquellos obtenidos mediante mediciones experimentales de espectroscopía túnel. Dentro de esta categoría de sistemas nanoscópicos se encuentra también el conformado por una molécula de nickeloceno sobre un sustrato de cobre, el cual puede ser modelado sin mayores idealizaciones por un 2CAM de espín 1 [30,31]. El nickeloceno ha llamado la atención de la comunidad científica ya que al ser absorbido consigue preservar su espín. Esta propiedad es de mucha utilidad en el ámbito de la física experimental, donde es utilizada para realizar sondas gracias a que los espectros de sus propiedades son bien conocidos.

El cierre de este primer capítulo queda entonces dado por una “bajada a tierra” de los modelos que se utilizaron en la tesina. Personalmente no tuve mucha relación con los compuestos mencionados, pero cuando se ve durante tanto tiempo un modelo es agradable asociarle una utilidad en la vida real.

Capítulo 2

Cálculo numérico utilizando DMRG

“The hardest problems of pure and applied science can only be solved by the open collaboration of the world-wide scientific community.”

Kenneth G. Wilson

A lo largo de la licenciatura es normal cruzarse con funciones con nombre y apellido, las cuales aparecen en convenientes tablititas que podemos tener a mano a la hora de rendir parciales y finales. En algún momento temporal posterior al encuentro con esas funciones, mi padre (Amadeo) me contó que durante sus años de carrera esas funciones con sus tablititas tan lindas estaban en grandes libros, libros dedicados enteramente a ellas y a sus (vastias) propiedades. Para mi suerte nunca tuve que aprender más que unas pocas propiedades o, en el peor de los casos, pedirle con un poco de vergüenza al docente que me las recuerde. Amadeo no tuvo la misma suerte y se encontró teniendo que estudiar y memorizar todo lo relacionado a las funciones con nombre y apellido.

La historia anterior parece un poco descolgada del tema de la tesina, pero las conexiones vienen en un instante: lo mismo que describí con funciones particulares pasa ahora con métodos numéricos (y muchas otras cosas más, claro). Un día como cualquier otro en el IFIR estábamos (estaban) hablando con Luis y Claudio acerca de no-recuerdo-en-particular-qué de la tesina. De un momento al otro se repitió, casi como un deja vu, la situación de las funciones con nombre y apellido: Claudio empezó a contar como antes, durante su propio doctorado, para usar un método numérico había que escribirlo uno mismo (o si tenías mucha suerte quizás alguien te lo daba) pero que ahora, como es mi caso, instalando una librería específica podías tener al alcance de un par de sentencias de código no sólo el método numérico, sino también un arsenal de funciones para cálculos útiles en el área.

Este capítulo está dedicado a contar de una forma resumida la lógica detrás del método que utilizamos para los cálculos (DMRG) y las herramientas con las que se trabajó. Durante la tesina este método fue utilizado básicamente como una caja negra, sabiendo lo básico y necesario para poder hacer buen uso del mismo. Además, se detalla un pequeño tutorial sobre cómo utilizar la librería ITensor en el lenguaje Julia para poder utilizar un DMRG implementado con MPS, junto con algunos comentarios de cosas que fuimos *descubriendo* sobre la marcha. Esta parte de la tesina no pretende ser más que un elemento de autoconsistencia para el trabajo realizado, permitiendo que quien lo desee pueda replicar sin mayores problemas los resultados obtenidos.

Si se desea profundizar en lo que a DMRG y MPS respecta, las tesis y tesis [32–35] resultan muy completas. También les recomiendo la tesina de Lea [36], la cual aún no fue presentada para el momento en que estoy escribiendo esto.

2.1. Grupo de Renormalización de la Matriz Densidad

Resolver de manera exacta algunos problemas cuánticos de muchos cuerpos resulta extremadamente complejo. Por ejemplo, el problema de una cadena antiferromagnética de espín 1/2 y tamaño N con interacción de intercambio a primeros vecinos está representado por el hamiltoniano

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^{N-1} \hat{\mathbf{S}}_i \cdot \hat{\mathbf{S}}_{i+1}. \quad (2.1)$$

El espacio de Hilbert de este sistema crece exponencialmente con el tamaño, lo cual resulta desfavorable para el proceso de diagonalizar al hamiltoniano. Debido a este tipo de problemas, en las últimas décadas ha habido un aumento en la aparición y en la evolución de los métodos numéricos que permiten resolver sistemas de este tipo.

El grupo de renormalización de la matriz densidad (DMRG) es un método numérico variacional apoyado fuertemente en otros de diagonalización exacta. Nació en 1992 gracias a Steve White [37] con el objetivo de solucionar un problema propuesto por Wilson: una partícula cuántica sin espín en una caja unidimensional. Éste problema no podría ser resuelto correctamente con el método de Wilson: el grupo de renormalización numérico (NRG). DMRG es capaz de obtener el estado fundamental de sistemas cuánticos de muchos cuerpos con gran precisión utilizando el concepto de renormalización, el cual permite reducir los grados de libertad efectivos y sólo considerar aquellos que resultan más importantes para el estado fundamental. De esta manera, un problema con complejidad exponencial se convierte en uno de complejidad lineal con el tamaño del sistema. Aun así, no todo es color de rosas: para sistemas de gran tamaño el tiempo computacional resulta ser enorme.

El método que ideó White es una técnica de gran precisión y eficiencia para sistemas fuertemente correlacionados de baja dimensión y *a priori*, no realiza ningún tipo de suposición. Además, aunque su precisión es finita, ésta se encuentra totalmente controlada y los resultados que se obtienen son conocidos como *cuasi-exactos*¹. El mayor costo que impone el uso de DMRG es un aumento en el tiempo de cálculo a causa del tamaño del sistema.

Desde su nacimiento, el DMRG ha conseguido evolucionar y adaptarse a distintas áreas de la física. Originalmente siendo formulado en el contexto de materia condensada, hoy sus usos se extienden sobre diversos campos, tales como la física nuclear y la química cuántica, convirtiéndose en una de las técnicas numéricas dominantes para simular problemas de sistemas fuertemente correlacionados. En el año 2004 se encontró que los algoritmos del DMRG estaban estrechamente relacionados a una clase particular de estados cuánticos: los estados producto de matriz, o MPS por sus siglas en inglés.

¹Durante mis primeros días estudiando en el IFIR me chocó bastante escuchar a Luis hablar de las “mediciones” que obteníamos. Un tiempo después (no recuerdo si me lo explicó él o lo terminé entendiendo), parecía casi natural hablar de los resultados que obteníamos utilizando DMRG como si fuesen las mediciones que conocía de los años de cursar física experimental.

2.1.1. Truncamiento del espacio de Hilbert

Como se mencionó anteriormente, el método DMRG se basa en truncar el espacio de Hilbert. Cuando se hace este proceso se retiene una cantidad m de los estados y la cuestión es encontrar una buena relación de compromiso entre la cantidad de estados retenidos, resultados confiables con poco error y una duración aceptable de los cálculos.

El teorema variacional [18, 38] dice que la energía del estado fundamental calculada en el espacio de Hilbert reducido es siempre mayor o igual a la energía del estado fundamental exacto. Esto se traduce en que mientras menor sea la energía obtenida en un espacio de Hilbert truncado, mejor será la aproximación a la energía real. Entonces, para obtener la mejor aproximación de la función de onda en la base truncada, la función de onda (representada por una matriz Ψ) que mejor se aproxima a otra es aquella que minimiza la distancia de Frobenius entre ambas matrices. Por el teorema de Eckart-Young [39], la matriz $\tilde{\Psi}$ que cumpla con esto será aquella que esté formada por los m autovalores más grandes de la descomposición en valores singulares, descartando el resto. Simplificando un poco, la idea consiste en quedarse con aquellos estados que posean mayor probabilidad. Finalmente, la base óptima para obtener la mejor aproximación de dicha función de onda en un dado espacio de Hilbert truncado es aquella que esté formada por los m autovectores con autovalores correspondientes más grande de la matriz densidad reducida de los bloques que se definirán a continuación.

2.1.2. Algoritmos de DMRG

Dentro de los algoritmos de DMRG se encuentran los algoritmos de sistema infinito y finito. En el primero de éstos, también llamado *warmup*, se considera un sistema unidimensional que comienza con una cadena de N sitios. Esta cadena es separada en un bloque izquierdo y uno derecho, los cuales tienen dos sitios simples entre ellos. Cuando la cantidad de sitios es menor que m (máxima cantidad de estados con la que se trabaja) se agregan sitios a ambos bloques, sin truncar y se diagonaliza el hamiltoniano efectivo (ambos bloques más la interacción entre ellos) de manera exacta. A medida que se agreguen los sitios, llegará un momento en donde se alcance el número de estados m y sea necesario comenzar el proceso de truncamiento del espacio de Hilbert. Este proceso se repetirá hasta alcanzar el tamaño del sistema deseado, o en su defecto, se dará por finalizado si el error en la energía obtenida está por debajo de la tolerancia especificada.

En el algoritmo finito o *sweeping* es necesario ejecutar previamente el algoritmo de sistema infinito hasta alcanzar el tamaño deseado para el sistema e ir almacenando todos los bloques, operadores y cambios de base que se realicen. Una vez que se alcanza el tamaño deseado, se comienzan a realizar *sweeps* o barridos² de derecha a izquierda y viceversa para optimizar las bases y mejorar la precisión. Ambos algoritmos pueden ser visualizados en la Figura 2.1: sistema infinito a la izquierda y finito a la derecha.

2.2. Estado producto de matrices (MPS)

Al comienzo del presente capítulo se mencionó cómo el espacio de Hilbert de un sistema, tan simple como puede ser una cadena de espines 1/2 y N sitios, crece exponencialmente con el tamaño del sistema. A primera vista ya se entiende que debido

²La idea de barrido se refiere a aplicar los pasos del *warmup*, pero en este caso aumentando únicamente el tamaño de uno de los bloques y, por ende, disminuyendo el del otro.

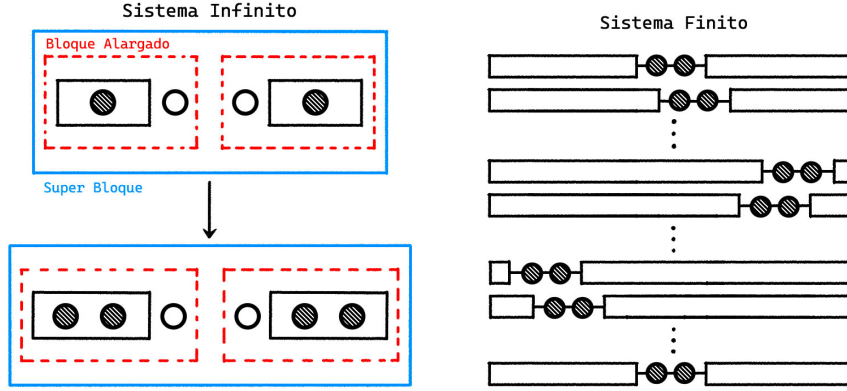


Figura 2.1: Esquema de los algoritmos de DMRG. Izquierda: en la primera iteración del algoritmo de sistema infinito se agrandan los bloques, formándose un superbloque con el cual se determinará el estado fundamental y se renormalizarán los operadores de cada nuevo bloque considerando los m autoestados. Derecha: en el algoritmo de sistema infinito se realizan barridos de derecha a izquierda y viceversa partiendo del estado final del algoritmo de sistema infinito. Imagen obtenida de la tesis de maestría de Nayra Alvarez [32].

a esto, encontrar el estado fundamental de tal sistema es sumamente engorroso. Sin embargo, al menos para aquellos sistemas que posean un *gap* entre el estado fundamental y el primer estado excitado, existe una zona no muy grande del espacio de Hilbert que puede ser parametrizada de forma eficiente utilizando los estados producto de matrices (MPS, por sus siglas en inglés). Para explicar este concepto se esbozará un ejemplo sencillo y luego se presentará la forma general de estos nuevos estados.

A la hora de construir un MPS se puede pensar este proceso como “construir un estado mediante objetos de tres índices”. Para representar esto conviene pensarlo como una matriz donde cada entrada es un vector que pertenecerá al espacio de Hilbert del sitio. Por ejemplo [40], para la cadena de N espines $1/2$ cada vector se podrá escribir como

$$\alpha |\uparrow\rangle + \beta |\downarrow\rangle. \quad (2.2)$$

Entonces, para el caso de una cadena en donde el espacio de Hilbert de cada sitio corresponde a un espín $1/2$, cada uno de estos sitios tendrá asociada una matriz de la forma

$$A = \begin{pmatrix} \alpha_{11} |\uparrow\rangle + \beta_{11} |\downarrow\rangle & \alpha_{12} |\uparrow\rangle + \beta_{12} |\downarrow\rangle & \cdots \\ \alpha_{21} |\uparrow\rangle + \beta_{21} |\downarrow\rangle & \alpha_{22} |\uparrow\rangle + \beta_{22} |\downarrow\rangle & \cdots \\ \cdots & \cdots & \ddots \end{pmatrix}. \quad (2.3)$$

Si todos los sitios son iguales, es decir, si el sistema tiene simetría translacional, entonces todos los sitios tendrán asociada la misma matriz A . Con esto en mente, el estado del sistema se obtiene multiplicando todas las matrices A como un producto tensorial, con lo cual

$$|\psi\rangle = \text{Tr} (A^N). \quad (2.4)$$

En el caso más simple en que

$$A = \begin{pmatrix} |\uparrow\rangle & 0 \\ 0 & |\downarrow\rangle \end{pmatrix}, \quad (2.5)$$

se tendrá

$$A^N = \begin{pmatrix} |\uparrow\rangle \otimes |\uparrow\rangle \otimes \cdots \otimes |\uparrow\rangle & 0 \\ 0 & |\downarrow\rangle \otimes |\downarrow\rangle \otimes \cdots \otimes |\downarrow\rangle \end{pmatrix}, \quad (2.6)$$

resultando finalmente en un estado de la forma $|\psi_{MPS}\rangle = |\uparrow \cdots \uparrow\rangle + |\downarrow \cdots \downarrow\rangle$.

De manera general y considerando la misma cadena de N sitios, el estado cuántico más general posible para este sistema será

$$|\psi\rangle = \sum_{\sigma_1, \dots, \sigma_N} c_{\sigma_1, \dots, \sigma_N} |\sigma_1, \dots, \sigma_N\rangle, \quad (2.7)$$

en donde cada $\{\sigma_i\}$ representa el espacio de Hilbert de dimensión d para el sitio i . Este mismo estado puede ser escrito como un MPS de la forma

$$|\psi_{MPS}\rangle = \sum_{\sigma_1, \dots, \sigma_N} A^{\sigma_1} A^{\sigma_2} \dots A^{\sigma_N} |\sigma_1, \dots, \sigma_N\rangle. \quad (2.8)$$

En esta nueva representación las matrices A^{σ_i} tienen dimensiones $D_{i-1} \times D_N$, siendo aquellas que se encuentren en los bordes ($i = 1, N$) vectores ($D_1 = D_N = 1$) de modo tal que el producto matricial que define al estado produzca un número y $|\sigma_i\rangle$ con $i = 1, \dots, N$ es una base de los estados locales del sitio i .

2.3. ITensor

ITensor [41], nombre simplificado para *Intelligent Tensor*, es una librería de software inspirada en la notación de diagramas tensoriales disponible para los lenguajes Julia [42] y C++. Esta librería fue desarrollada por Matthew Fishman, Steven White³ y Miles Stoudenmire. ITensor permite utilizar, sin mayores complejidades, el método de grupo de renormalización de la matriz densidad. En su página oficial presenta una vasta cantidad de ejemplos que sirven de apoyo para quienes recién comiencen a trabajar con esta herramienta. Además, cuentan con un soporte *online* en donde se pueden realizar consultas de varias índoles. A los alcances que llega esta tesina no es necesario más que entender el formalismo de segunda cuantización para poder escribir el hamiltoniano del sistema así como aquellas magnitudes que se deseen calcular.

El objetivo de esta sección es dejar un pequeño tutorial, o más bien una guía resumida, sobre cómo escribir un programa básico para poder utilizar DMRG usando ITensor en el lenguaje Julia. Todo lo que se detalla puede ser encontrado tranquilamente en el manual de la librería, con lo cual ante cualquier duda y/o inconveniente es recomendable recurrir a tal herramienta. Quizás con la intención de simplificar el proceso de adaptación al lenguaje para quien se encuentre leyendo, también se dejarán pequeños ejemplos de creación de gráficas y exportación de datos. A riesgo de romper la cuarta pared mientras escribo, espero que este trabajito le pueda ser de utilidad a alguien.

2.3.1. Cómo utilizar DMRG en ITensor

Como en cualquier programa, el primer paso a realizar es el llamado a las librerías que se deseen utilizar (siendo en este caso ITensor) y la definición de los parámetros tanto del modelo como del método.

```

1 using ITensors
2 using ITensors.HDF5
3
4 let
5     N = 100
6     hyb = 0.1785

```

³Si, el mismo que desarrolló el DMRG.

```

7   W_band = 1.0
8   U = 1.0
9   ed = -0.5
10  hfield = 0.0
11  Npart = N
12
13  tp = sqrt(0.5*hyb*W_band)
14  t = 0.5 * W_band
15
16  sites = siteinds("Electron", N; conserve_qns = true, conserve_sz =
17           true, conserve_nf = true, conserve_nfparity = true, qnname_sz = "
18           Sz", qnname_nf = "Nf", qnname_nfparity = "NfParity")
19
20  sweeps = Sweeps(1200)
21  maxdim!(sweeps, 50,100, 100, 200, 200, 500)

```

Código 2.1: Definición de parámetros y llamado de la(s) librería(s) a utilizar.

```

1   mutable struct DemoObserver <: AbstractObserver
2       energy_tol::Float64
3       last_energy::Float64
4
5       DemoObserver(energy_tol=0.0) = new(energy_tol,1000.0)
6   end
7
8   function ITensors.checkdone!(o::DemoObserver;kwargs...)
9       sw = kwargs[:sweep]
10      energy = kwargs[:energy]
11      if abs(energy-o.last_energy)/abs(energy) < o.energy_tol
12          println("Stopping DMRG after sweep $sw")
13          return true
14      end
15      # Otherwise, update last_energy and keep going
16      o.last_energy = energy
17      return false
18  end
19
20  function ITensors.measure!(o::DemoObserver; kwargs...)
21      energy = kwargs[:energy]
22      sweep = kwargs[:sweep]
23      outputlevel = kwargs[:outputlevel]
24
25      if outputlevel > 0
26          println("Sweep $sweep, the energy is $energy")
27      end
28  end

```

Código 2.2: Funciones necesarias para la implementación de DMRG (previo a la sentencia *let*).

En el Código 2.1 la declaración *let* es propia del lenguaje Julia y debe ser cerrada utilizando un *end* una vez que se termina de escribir el programa, la función *sites()* es necesaria para construir un conjunto de sitios que contendrá los índices de los sitios que definen el espacio de Hilbert del sistema (por simplicidad no se entrará en detalle sobre las entradas de esta función) y en las últimas dos líneas se determina la cantidad de barridos *sweeps* máximos que realizará el programa antes de cortar el cálculo en caso de que falle la convergencia y la cantidad de estados con los cuales se quedará el DMRG a la hora de trabajar.

Entre la llamada a las librerías y el comienzo del programa delimitado por el entorno *let*, se deben definir un conjunto de funciones que serán de utilidad a la hora de trabajar con DMRG, que para el fin de esta tesina, simplemente tomarán

el papel de verificar los parámetros de cálculo utilizados. Estas funciones se definen en el Código 2.2.

Para la escritura del hamiltoniano del sistema, previo al llamado del DMRG, se utilizará como ejemplo el SIAM. En ITensor es notable el hecho de que esta forma de escritura está inspirada en la notación que se acostumbra utilizar al trabajar con lápiz y papel, provocando que sea sumamente cómodo transcribir los modelos utilizados al código. Este ejemplo se muestra en el Código 2.3, donde la función *AutoMPO* traduce las sumas de operadores locales en un MPO. Estos últimos son operadores que actúan sobre los MPS. Por otro lado, los términos como ser “*Cdagup*”, $i+1$ representan al operador $c_{\uparrow,i+1}^\dagger$. La última línea del ejemplo define completamente al hamiltoniano del sistema.

```

1  ampo = AutoMPO()
2  ##### Bano de conduccion #####
3      for i in 2:N-1
4          ampo += -t, "Cdagup", i, "Cup", i+1
5          ampo += -t, "Cdagup", i+1, "Cup", i
6          ampo += -t, "Cdagdn", i, "Cdn", i+1
7          ampo += -t, "Cdagdn", i+1, "Cdn", i
8      end
9
10 ##### Terminos de hopping hacia la impureza #####
11     i = 1
12     ampo += -sqrt(2)*tp, "Cdagup", i, "Cup", i+1
13     ampo += -sqrt(2)*tp, "Cdagup", i+1, "Cup", i
14     ampo += -sqrt(2)*tp, "Cdagdn", i, "Cdn", i+1
15     ampo += -sqrt(2)*tp, "Cdagdn", i+1, "Cdn", i
16
17 ##### Terminos de sitio #####
18     for i in 1:1
19         ampo += U, "Nupdn", i
20         ampo += ed, "Ntot", i
21         ampo += -hfield, "Sz", i
22     end
23
24 H = MPO(ampo, sites)

```

Código 2.3: Hamiltoniano para el modelo SIAM. Los operadores escritos en segunda cuantización son funciones intrínsecas de la biblioteca ITensor.

El penúltimo paso en la escritura del programa es la definición del estado inicial desde el cual se comenzará a resolver el problema. Este estado puede ser definido manualmente, acomodando los espines a voluntad, o de manera aleatoria.

```

1  # Defined state
2  state = ["Emp" for n in 1:N]
3  p = Npart
4  for i in N:-1:1
5      if p > i
6          state[i] = "UpDn"
7          p -= 2
8      elseif p > 0
9          state[i] = (isodd(i) ? "Up" : "Dn")
10         p -= 1
11     end
12 end
13 psi0 = productMPS(sites, state)
14
15 # Random state

```

```
16 psi0 = randomMPS(sites, state; linkdims = 10)
```

Código 2.4: Dos maneras distintas de definir el estado inicial. A la hora de elegir una de estas opciones para trabajar se debe comentar (o borrar) la restante para no sobrescribir el estado.

El primer caso presentado en el Código 2.4 define al estado inicial de manera controlada mediante la ubicación de los electrones en los sitios de forma que se vayan alternando entre espín *up* y *down*. La segunda manera de realizar la definición es obtener un estado inicial aleatorio generado por la función *randomMPS* de ITensor. Una vez que se tiene definido este estado se procede a llamar al método para comenzar a calcular el estado fundamental del sistema.

```
1 minsweeps=8
2 obs = DMRGObserver(["Sz"], sites; energy_tol=1E-8,minsweeps=
minsweeps)
3
4 # Check total number of particles:
5 @show flux(psi0)
6
7 # Start DMRG calculation:
8 energy, psi = dmrg(H, psi0, sweeps; observer=obs, outputlevel=1)
9 @printf("Final energy = %.12f\n", energy)
10 println("\nGround State Energy = $energy para mu=$ed, N=$Npart")
```

Código 2.5: Llamada al método DMRG utilizando las definiciones realizadas previamente.

En la primera línea del Código 2.5 la sentencia *minsweeps* define el número mínimo de barridos a realizar. La llamada al observador *DMRGObserver* permite especificar que por ejemplo, para estos cálculos se desea mantener el valor de S_z fijo y que la tolerancia en la energía *energy_tol* deberá empezar a tomarse en cuenta a partir del barrido número *minsweeps*. Durante la llamada al DMRG (línea 8) la entrada *outputlevel* controla la impresión en pantalla de los parámetros obtenidos para cada barrido, pudiéndose cancelar esto *seteando* su valor en cero en lugar de uno.

Como comentario extra, la forma de escribir funciones utilizando ITensor es también muy similar a como se escribirían en una hoja ya que, a fin de cuentas, éstas estarán compuestas por operadores. Esto permite que el código sea amigable tanto con aquel usuario que se encuentre trabajando como con quienes busquen entender un programa ajeno. Un ejemplo de esto es la función *meanvalues* presentada en el Código 2.6, cuya escritura se realiza de manera similar a la de los hamiltonianos pero sin necesidad de utilizar la función *sites*. En esta función se incluye el uso de funciones de operadores, las cuales son intrínsecas a ITensor y se llaman utilizando un nombre muy claro: *inner*, *scalar*, *Sz*, etc.

Finalmente, se presentan ejemplos en el Código 2.7 para el guardado de archivos de datos y su presentación en imágenes junto con las librerías que se utilizaron para este fin.

```
1 function meanvalues(N::Int64, psi::MPS, sites::Array, Corzz::Array{
Float64}, Corpm::Array{Float64}, Cormp::Array{Float64}, Cor::Array{
Float64}, upd::Array{Float64}, dnd::Array{Float64}, updnd::Array{
Float64}, szd::Array{Float64}, sp::Array{Float64}, sm::Array{Float64
})
2
3 for i= 1:N
4 a = AutoMPO()
5 b = AutoMPO()
6 c = AutoMPO()
7 a += "Sz", N, "Sz", i
8 b += 0.5, "S+", N, "S-", i
9 c += 0.5, "S-", N, "S+", i
```

```

10
11     Corzz[i] = inner(psi,MPO(a,sites),psi)
12     Corpm[i] = inner(psi,MPO(b,sites),psi)
13     Cormp[i] = inner(psi,MPO(c,sites),psi)
14     Cor[i] = Corzz[i] + Corpm[i] +Cormp[i]
15 end
16
17
18 for j in 1:N
19     orthogonalize!(psi, j)
20     psidag_j = dag(prime(psi[j], "Site"))
21     upd[j] = scalar(psidag_j * op(sites, "Nup", j) * psi[j])
22     dnd[j] = scalar(psidag_j * op(sites, "Ndn", j) * psi[j])
23     updnd[j] = scalar(psidag_j * op(sites, "Nupdn", j) * psi[j])
24     szd[j] = scalar(psidag_j * op(sites, "Sz", j) * psi[j])
25     sp[j] = scalar(psidag_j * op(sites, "S+", j) * psi[j])
26     sm[j] = scalar(psidag_j * op(sites, "S-", j) * psi[j])
27 end
28
29 return Corzz, Corpm, Cormp, Cor, upd, dnd, updnd, szd, sp, sm
30 end

```

Código 2.6: Definición de una función que permite calcular valores medios de operadores.

```

1 using DelimitedFiles
2 using CSV
3 using DataFrames
4 using Printf
5 using LaTeXStrings
6 using Plots
7
8 let
9 .
10 .
11 .
12
13 ### Creacion de archivo de datos .csv con columnas x y entan ###
14 datas=hcat(x,entan)
15 CSV.write("Sigma-N="*string(N)*"Hyb="*string(hyb)*"D="*string(D)*".
16 csv", DataFrame(datas,:auto), delim=" ", header = ["x" , "Sigma(x)
17 "]
18
19 ### Creacion de archivo de datos .dat para escribir los valores de
20 entropia de entrelazamiento ###
21 file19 = open("entropysiam"*string(N)*"_ed"*string(ed)*"hyb"*string
22 (hyb)*".dat", "a")
23
24 for b in 2:N-1
25     SvN = entropy_von_neumann(psi,b)
26     println(file19,"$b $SvN")
27 end
28
29 println(file19,)
30 close(file19)
31
32 ### Generacion y guardado de una grafica ###
33 fig = plot(x, entan, markershape = :hexagon, linestyle = :dashdot,
34 color = :blue)
35 savefig("figN_D="*string(D)*".png")

```

Código 2.7: Creación de gráficas y archivos de datos.

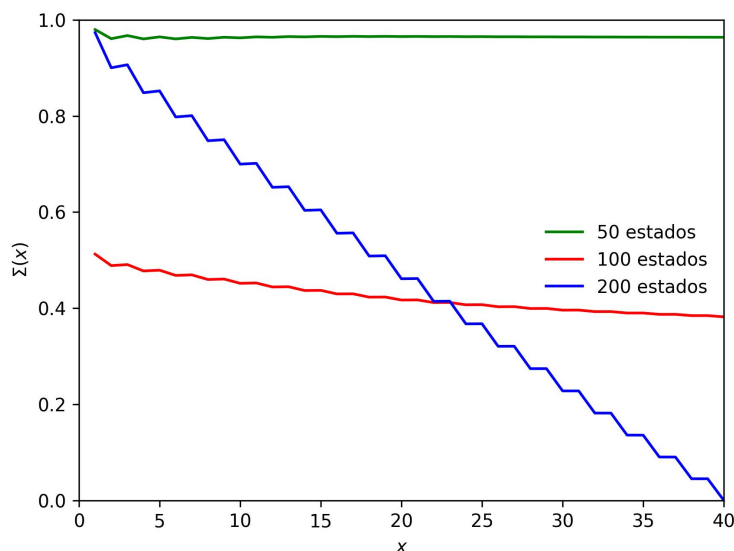


Figura 2.2: Función $\Sigma(x)$ para distinto número de estados m . Parámetros: $\varepsilon_d = -0.4$, $W = 1$, $U = J_H = 40$, $U' = 10$, $\Delta = 0.3$ y $N = 80$.

2.3.2. Algunas consideraciones a tener en cuenta

El cálculo numérico representó una gran innovación en el área de la física teórica ya que permitió estudiar sistemas que no tenían solución analítica, y que en caso de conocer los métodos necesarios, a veces pueden aparecer dudas sobre si el resultado es físicamente correcto o un *artifact* del mismo método. A pesar de esta gran ventaja, esta poderosa herramienta también trae consigo un problema importante: las computadoras no pueden interpretar los resultados por sí solas. No es extraño, entonces, que un cálculo converja a un resultado “raro” que termine no siendo correcto, ya sea por falta de precisión en las variables del método o por utilizar una tolerancia muy baja en el método de corte.

El mayor problema que puede surgir a raíz de esto es el hecho de no saber con certeza si este resultado sea el esperado o no. En realidad esto no es tanto un problema en sí ya que su solución es bastante sencilla, pero nunca está de más dejar registrados estos resultados “raros” para que otras personas que se los encuentren puedan reconocerlos. Los cálculos realizados en esta tesina no son la excepción a este comportamiento.

Debido a un número insuficiente de estados o a una alta tolerancia en la energía del DMRG puede ocurrir que el programa converja a un estado que no es el estado fundamental pero que se encuentra muy cercano en energía a éste. Una forma de notar esto es verificando las propiedades físicas del sistema y sus comportamientos. Por ejemplo, en el caso de esta tesina se trabajó con funciones, que se introducirán en el próximo capítulo, cuyo comportamiento en el extremo de la cadena opuesto a la impureza debían anularse. La forma de arreglar estos problemas de convergencia es aumentando el número de estados, lo cual aumenta considerablemente el tiempo de cálculo del DMRG, pero por desgracia, no hay otra opción. En la Figura 2.2 se grafica una de estas funciones $\Sigma(x)$, mostrándose como para $m = 50$ estados no se cumple la condición de contorno. Al aumentar los estados hasta $m = 200$ se encuentra una convergencia del sistema al estado fundamental correcto, en el cual $\Sigma(x)$ en el borde de la cadena se anula.

Para el caso del 2CAM se trabajó con redes cuyo tamaño era múltiplo de 4 de

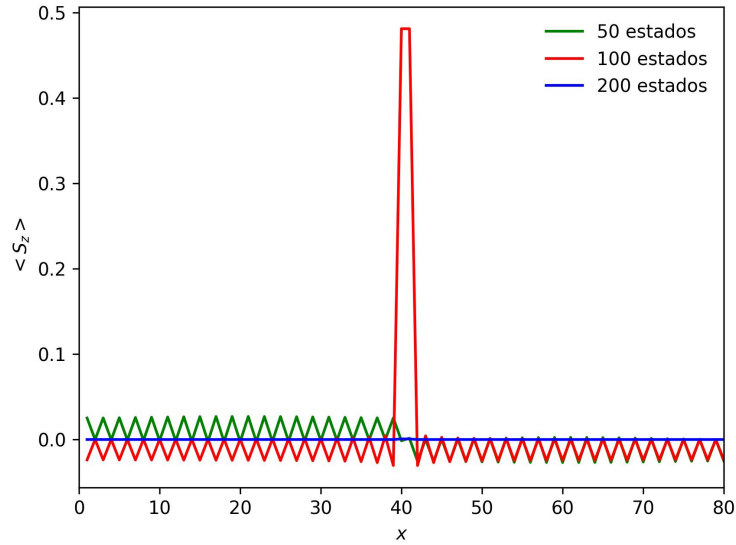


Figura 2.3: Valor medio de S_x^z en función de la distancia a la impureza para distinto número de estados. Mismos parámetros que la Figura 2.2.

manera que al medio llenar el sistema (un único electrón por orbital en promedio), el estado fundamental resulte en un singlete. En una de las tantas pruebas de las novedosas herramientas con las que se contaba, se realizaron cálculos para redes de tamaño $N/2 = 2k + 1$, siendo k un natural. Para estos casos se encontró que la mencionada función $\Sigma(x)$ no cumplía con la condición de contorno del final de la cadena.

En determinadas ocasiones puede ser incluso necesario verificar más de una propiedad física del sistema. Para algunas mediciones se observó como el valor medio de S_z resultaba distinto de cero, a pesar que debido a la simetría \mathbb{Z}_2 ($\hat{S}_i^z \rightarrow -\hat{S}_i^z$) debería ser nulo en cada sitio. Esto puede observarse en la Figura 2.3, en la cual se muestran los valores de $\langle S_z \rangle$ para toda la cadena en tres casos con distinto número de estados.

Capítulo 3

Longitud de la nube de Kondo

“I don’t know. I don’t know. I just want to do research.”

Myriam Sarachik

En este capítulo vamos a presentar un estudio de los llamados *Kondo box*: sistemas que presentan efecto Kondo y son de tamaño finito. Uno de los temas más interesantes (y poco conocidos) en la física de Kondo es la existencia y el comportamiento de la llamada “nube de Kondo”, la cual fue introducida en el primer capítulo. El estudio de esta magnitud se extenderá incluso hasta el próximo capítulo, donde se lo abordará desde el enfoque de la teoría de la información cuántica.

Los cálculos correspondientes a este capítulo fueron realizados para ambos modelos: Anderson de dos canales (2CAM) y de un canal (SIAM), siendo este último aquel que, proporcionada una referencia, permitía testear los programas implementados y sus resultados.

3.1. Introducción

La longitud de apantallamiento ξ_K está relacionada con aquellos electrones del baño de conducción que apantallan a la impureza. Para comprender mejor este concepto es útil recordar que en el estado fundamental y a bajas energías ($T \lesssim T_K$) el espín de la impureza se encuentra formando un singlete con un conjunto de electrones de conducción. Se considera que este grupo de electrones se extiende en el espacio real formando una “nube” a lo largo de la denominada longitud de Kondo. Todos los electrones de conducción dentro de esta nube se encargan de apantallar el espín de la impureza magnética y además, actúan en conjunto formando un potencial de dispersión para los electrones fuera de la nube. De manera equivalente al caso de la temperatura de Kondo, se espera que las cantidades físicas que dependen de la distancia r de electrones de conducción a la impureza sean funciones de escala de la relación r/ξ_K en lugar de depender de r y ξ_K por separado.

A diferencia del apantallamiento por carga eléctrica, el cual puede entenderse clásicamente, la nube de apantallamiento de espín se produce de forma cuántica coherente, formando un entrelazamiento de espín-singlete con la impureza. Aunque los espines interactúan localmente alrededor de la impureza, la nube de Kondo teóricamente puede extenderse en varios micrómetros.

Si bien la física de Kondo de una sola impureza magnética es muy bien conocida –excepto por su extensión espacial–, nuestra comprensión de los sistemas de múltiples impurezas como las redes de Kondo, que describen la física de los sistemas denominados fermiones pesados [10], está lejos de ser completa. En tales sistemas,

la relación de la longitud de la nube de Kondo con respecto a la distancia entre las impurezas es crucial para comprender sus propiedades. La detección y control de una nube de Kondo es, por tanto, un hito en la física de la materia condensada. Gran parte de la comprensión de la dependencia de la longitud proviene de los argumentos analíticos y numéricos de grupo de renormalización [43–46], teorías de campo medio [47, 48], la diagonalización exacta de sistemas cortos [47] y los resultados numéricos de DMRG [49–51], que también están restringidos a sistemas bastante cortos.

A lo largo de 50 años hubo varios intentos experimentales por detectar y medir la longitud de la nube de Kondo. Estos intentos fueron infructuosos y la existencia real de la nube era controvertida [52]. Solo recientemente [53] se ha detectado y logrado medir una longitud del orden de los micrones de la nube de Kondo en un sistema de punto cuántico, mediante experimentos con interferómetros.

3.2. Obtención de la longitud de apantallamiento

Determinar la longitud de apantallamiento no es una tarea fácil, aún en el ámbito de la física teórica. Diversos investigadores plantearon maneras de medirla y es justamente en eso mismo que nos enfocaremos en esta parte de la tesina. Para esta primera parte del capítulo se utilizó como referencia principal el trabajo de Holzner *et. al*¹ [50] donde los investigadores involucrados se centraron en el análisis de una función relacionada a las correlaciones de espín entre los electrones del mar de Fermi y las impurezas.

Los sistemas que presentan efecto Kondo poseen, en ausencia de anisotropía y de campo magnético, un estado fundamental singlete, $S_T = 0$. Para este estado vale

$$\langle \hat{\mathbf{S}}_d \cdot \hat{\mathbf{S}}_T \rangle = 0, \quad (3.1)$$

donde el subíndice d hace referencia a la impureza y si consideramos una impureza con un solo orbital, $\hat{\mathbf{S}}_T = \hat{\mathbf{S}}_d + \sum_{i=1}^{L-1} \hat{\mathbf{s}}_i$ con i recorriendo los sitios del baño de conducción. De estas dos relaciones se obtiene

$$\langle \hat{\mathbf{S}}_d \cdot \hat{\mathbf{S}}_T \rangle = \langle \hat{\mathbf{S}}_d \cdot \hat{\mathbf{S}}_d \rangle + \sum_{i=1}^{L-1} \frac{\langle \hat{\mathbf{S}}_d \cdot \hat{\mathbf{s}}_i \rangle}{\langle \hat{\mathbf{S}}_d \cdot \hat{\mathbf{S}}_d \rangle} = 0,$$

con lo cual

$$1 + \sum_{i=1}^{L-1} \frac{\langle \hat{\mathbf{S}}_d \cdot \hat{\mathbf{s}}_i \rangle}{\langle \hat{\mathbf{S}}_d \cdot \hat{\mathbf{S}}_d \rangle} = 0. \quad (3.2)$$

La igualdad, o condición, anterior explicita el hecho de que el espín de la impureza se verá totalmente apantallado por los espines de conducción. Dicho de una manera más burda: al considerar la totalidad del sistema queda de manifiesto el hecho de que el espín total de conducción se vuelve “igual y opuesto” al de la impureza. Esto resulta como consecuencia del tamaño finito del sistema. En una red infinita se espera que $\Sigma(x)$ se anule a una distancia dada, llamada “longitud de apantallamiento” de la impureza.

¹Como dato no menor, les comento que para ese *paper* fue utilizado como gran referencia un trabajo hecho por un grupo con gente de Rosario [54]. Particularmente, dos de los autores fueron Claudio, quien acompañó el proceso de realización de esta tesina y fue nombrado en capítulos anteriores, y Maria Eugenia, una de las docentes que estuvo presente en gran parte de mi carrera. A raíz de esto (y los comentarios de Claudio) pasamos a llamar a la “función de Holzner” como “función de Gazza-Torio”.

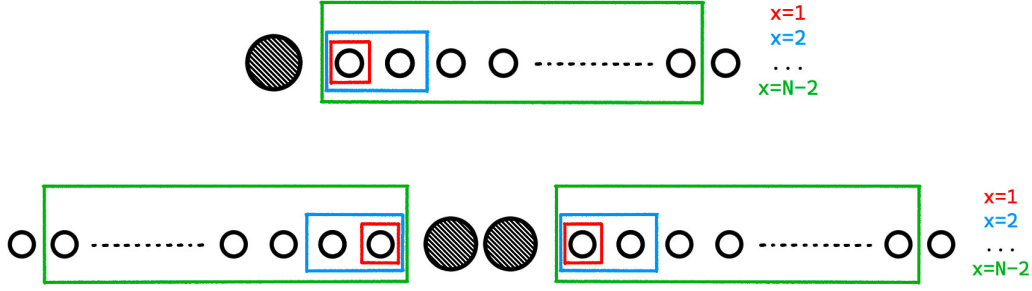


Figura 3.1: Esquema representativo del significado de x para $\Sigma(x)$ en los modelos SIAM (arriba) y 2CAM (abajo). En este último x se toma de manera simétrica con respecto a las impurezas.

El resultado de la ecuación 3.2 permite definir una magnitud que será útil para medir el apantallamiento que sufre el espín de la impureza:

$$\Sigma(x) = 1 + \sum_{i=1}^x \frac{\langle \hat{\mathbf{S}}_d \cdot \hat{\mathbf{s}}_i \rangle}{\langle \hat{\mathbf{S}}_d \cdot \hat{\mathbf{S}}_d \rangle}, \quad (3.3)$$

donde x recorre los sitios del baño de conducción, como se muestra en la parte superior de la Figura 3.1. Esta cantidad pone en evidencia la medida en que el espín total de los sitios de conducción del sitio 1 al x apantallan a la impureza. En física la elección de funciones para los estudios de propiedades de los sistemas no es azarosa y, claramente, la función que nos reúne en esta sección tiene propiedades muy útiles para ofrecer. Primero, la función de correlación está normalizada en la impureza $\Sigma(0) = 1$. Además, en ausencia de campo magnético, el sistema es $SU(2)$ invariante, por lo tanto $\Sigma(x)$ puede calcularse igualmente reemplazando $\langle \hat{\mathbf{S}}_d \cdot \hat{\mathbf{s}}_i \rangle$ por $\langle \hat{S}_d^z \cdot \hat{s}_i^z \rangle$.

La obtención de esta función implicó asumir una impureza con un único orbital y, si bien no fue explícitamente dicho, un único canal de conducción. Para el caso del 2CAM la función $\Sigma(x)$ se define de manera muy similar

$$\Sigma^{2CAM}(x) = 1 + \sum_{i=1}^x \frac{\langle \hat{\mathbf{S}}_{da} \cdot \hat{\mathbf{s}}_i \rangle}{\langle \hat{\mathbf{S}}_{da} \cdot \hat{\mathbf{s}}_i \rangle + \langle \hat{\mathbf{S}}_{db} \cdot \hat{\mathbf{s}}_i \rangle}, \quad (3.4)$$

pero con x recorriendo simétricamente las dos cadenas acopladas a las impurezas. Esto puede ser observado en la parte inferior de la Figura 3.1. $\hat{\mathbf{S}}_{da}, \hat{\mathbf{S}}_{db}$ son los operadores de espín de los orbitales a y b de la impureza, respectivamente.

Como se mencionó en el Capítulo 1, se espera que las magnitudes espaciales de sistemas con efecto Kondo sigan propiedades de escala caracterizadas por una longitud característica, la longitud de apantallamiento, siempre que ésta pueda ser contenida en el tamaño del sistema. Citando a los investigadores en Holzner *et. al*, “esta condición es equivalente a decir que el apantallamiento de espín perfecto en un sistema de tamaño finito L solo se puede lograr si el espaciado de nivel, que escala como v_F/L , es menor que T_K ”. En tal caso, existen estados de conducción de baja energía, lo que permite un apantallamiento de la impureza a través del efecto Kondo. Cuando existen estos estados, es decir, $v_F/L < T_K$, la función $\Sigma(x)$ debería tener el comportamiento de escala mencionado.

Clásicamente se esperaría que la longitud de apantallamiento sea aquella para la cual la contribución de los espines de conducción dentro de ella sea exactamente

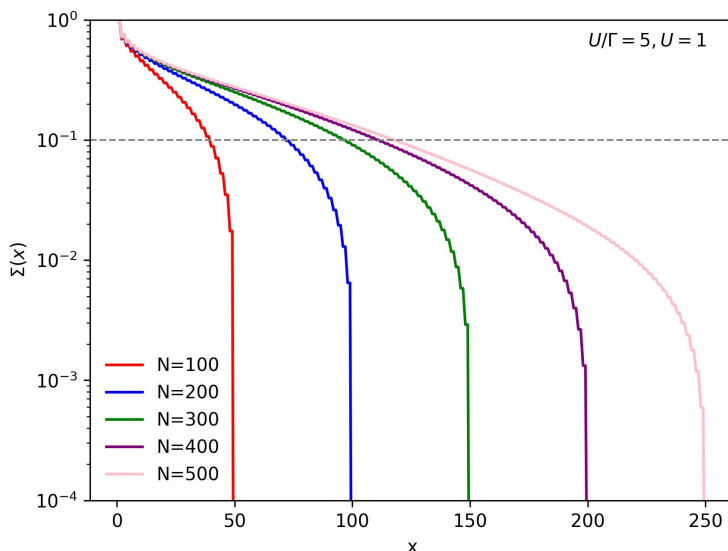


Figura 3.2: Función de correlación de espines en función de la distancia simétrica a la impureza para distintos tamaños del sistema. En línea punteada se presenta la constante $y = 0.1$ que permite encontrar la longitud de apantallamiento. Parámetros utilizados: $\varepsilon_d = -0.5$, $J_H = 1.3$, $\Delta = 0.2$, $U' = 0.3$ y $U = 1$.

igual en magnitud y opuesta en sentido al espín de la impureza. Sin embargo, debido a la condición de contorno 3.2 no es posible trabajar de esa manera. Este inconveniente surge a raíz de trabajar en sistemas de tamaño finito, con lo cual resulta más adecuado tomar a la longitud de apantallamiento como aquella para la cual $\Sigma(x)$ decayó un factor a de su valor en la impureza

$$\xi_a(L) = \min\{x; \Sigma(x) \leq 1 - a\}. \quad (3.5)$$

Esta longitud ξ_a se toma para los distintos tamaños de red, por lo cual $\xi_a = \xi_a(L)$. Sin embargo, la longitud ξ_a que realmente interesa es aquella que se obtiene para el límite termodinámico de redes infinitas. Como no fue posible realizar esto de forma directa, se procedió a buscar el valor límite al cual se va acercando $\xi_a(L)$ a medida que L aumenta.

En el trabajo de Holzner *et. al* se analiza la dependencia de ξ_a con el parámetro a . Los investigadores encontraron que comportamientos de escala universal sólo se lograban a partir de un cierto valor de a , ya que para valores más pequeños se empieza a “dejar de lado” a demasiados electrones que apantallan a la impureza y por lo tanto, no se obtiene una buena descripción del singlete de Kondo. Teniendo los resultados de este trabajo en cuenta, para los cálculos de esta tesina se tomó $a = 0,9$ (al igual que en el trabajo mencionado) con lo cual $\xi_a(L) = \xi_{0,9}(L)$. Para ejemplificar este proceso se presenta el panel izquierdo de la Figura 3.2. En línea punteada se muestra la función constante $= 0.1$ cuyas intersecciones con las distintas funciones Σ corresponden a los valores de $\xi_{0,9}(L)$.

3.3. Correlaciones espín-espín

La longitud de apantallamiento puede ser medida de varias maneras. En la tesis doctoral de Thomas Hand [55] se propone estimar esta longitud estudiando directa-

mente las correlaciones de espín

$$K(x) = \langle \hat{\mathbf{S}}_d \cdot \hat{\mathbf{s}}_x \rangle. \quad (3.6)$$

En realidad, la propuesta implica trabajar con una correlación promedio entre sitios vecinos para el SIAM

$$C(r) = \frac{1}{2} (K(x) + K(x+1)), \quad (3.7)$$

de manera tal que se suavicen las oscilaciones² que presentan las correlaciones totales. Cuando se trabaja con el 2CAM este promedio entre sitios vecinos pasa a tomarse de manera simétrica, muy similar a como se hizo en el cálculo de $\Sigma(x)$ de la sección previa.

Retomando lo dicho en el primer capítulo, el estado fundamental de un sistema que presenta efecto Kondo es el llamado “singlete de Kondo”, formado por un grupo de electrones de conducción y la impureza. En este estado y considerando el SIAM de espín 1/2, los electrones que se encuentran formando el singlete (aquellos que conviven dentro de la nube de Kondo) resultan correlacionados con la impureza de forma tal que esta magnitud disminuye con la distancia a ella como $1/r^d$, donde d es la dimensión del problema [49]. Los electrones dejados al margen de la nube, en cambio, ven su correlación con la impureza disminuyendo como e^{-Ar} , donde A es una constante. Consecuentemente, para el caso del SIAM, la dependencia con la distancia de las correlaciones de espín entre los electrones y la impureza es de la forma [49]

$$C(r) = D \left(\frac{A}{r} + B \right) e^{-r/l_K}, \quad (3.8)$$

en donde $l_K = \xi_K$ para sistemas unidimensionales³. En el caso de sistemas finitos como son las *Kondo box* no es posible aplicar las fórmulas usuales de la física de Kondo debido a que éstas se obtienen para sistemas infinitos con una banda de conducción plana. Sin embargo, se encuentran similitudes para la nube de apantallamiento de Kondo (y también para las densidades espectrales) de la *Kondo box* y los sistemas estándar [49].

En los sistemas unidimensionales, se espera que las correlaciones decaigan como $1/r$ para valores $r < \xi_K$ y luego decaigan de forma exponencial. Utilizando las longitudes de apantallamiento calculadas por el método de Holzner *et. al*, entonces, puede verificarse si se cumplen este tipo de comportamientos o no.

3.4. Resultados

3.4.1. Longitud de apantallamiento

En la los paneles izquierdos de la Figura 3.3 se muestran las funciones $\Sigma(x)$ para el 2CAM (arriba) y el SIAM (abajo) en función de la distancia a la impureza para sistemas de 500 sitios, incluyendo la(s) impureza(s). A la derecha en esta misma figura, se observan las funciones $\Sigma(x)$ pero ahora habiéndose realizado un escaleo de

²La dependencia espacial de magnitudes físicas de sistemas con una superficie de Fermi suele presentar oscilaciones del tipo $\propto \cos(2k_F r)$. En el presente trabajo siempre se trabajó con bandas de conducción semillenas, es decir el momento de Fermi vale $k_F = \pi/2$. Consecuentemente, hay oscilaciones $\propto \cos(\pi i)$: oscilaciones par-impar en los sitios i .

³En sistemas de mayor dimensión se debe tener en cuenta que la longitud de correlación y el tamaño de la nube Kondo no son iguales, sino que siguen una ley de la forma $l_K = (\xi_K/k_F^{d-1})^{1/d}$, siendo k_F el momento de Fermi.

la forma $\Sigma(x) \rightarrow \Sigma(x/\xi_{0,9})$. En los cuatro paneles de dicha figura se pueden apreciar las oscilaciones par-impar mencionadas previamente. Al realizar este cambio, todas las funciones colapsan, en buena medida, en una única curva universal. Este comportamiento es el esperado debido a las propiedades de *scaling* que posee el efecto Kondo: las propiedades físicas del sistema tienen un comportamiento universal siguiendo leyes de escala. Una diferencia apreciable en cuanto a la “calidad” del comportamiento universal se presenta entre ambos modelos: para el SIAM, las curvas se acomodan de manera directa sobre una curva universal, mientras que para el 2CAM el comportamiento universal se presenta de una forma más, por decirlo de alguna manera, borrosa. Ocurre que para estos análisis se trabajó con sistemas de igual tamaño en ambos modelos, lo cual implica que los canales de conducción del 2CAM tienen la mitad del tamaño que aquellos correspondientes al SIAM. Lo ideal hubiese sido trabajar con sistemas 2CAM cuyas semi cadenas (un orbital de la impureza más un canal de conducción) posean el mismo tamaño que los sistemas SIAM utilizados. Un inconveniente asociado a esto reside en el método numérico utilizado: como se mencionó anteriormente (Capítulo 2), el tiempo de convergencia del método crece exponencialmente con el tamaño del sistema. De todos modos, al comparar ambos paneles de la Figura 3.3 para el 2CAM se nota con una simple inspección como las curvas, originalmente separadas, comienzan a ubicarse cómodamente siguiendo el lineamiento de una curva universal. Nótese que las curvas correspondientes a la mayor hibridización, $\Delta = 1,282$, son las que más se apartan de la curva universal, esto es así porque para tal Δ el sistema ya no está en régimen de Kondo (hay demasiadas fluctuaciones de carga), invalidándose entonces la universalidad.

Los comportamientos universales presentes en el efecto Kondo aplican a todas las propiedades físicas del sistema. En aquellas de carácter espacial, las leyes de escala se asocian a una única escala de longitud ξ_K , definida para el límite termodinámico. Entonces, comportamientos de esta índole deberían ser observados también en aquella función que describe el cambio de la longitud de apantallamiento del sistema a medida que varía el tamaño del mismo. Curvas que describen lo mencionado anteriormente son presentadas en la Figura 3.4. Al igual que en la Figura 3.3, en los paneles del lado izquierdo se encuentran las longitudes de apantallamiento para distintos tamaños del sistema, mientras que en el lado derecho se exhibe el comportamiento universal al que sucumben estas curvas al ser escaleadas con $L \rightarrow L/\xi_{0,9}$.

Por otro lado, en la Figura 3.5 se muestra como $\xi_{0,9}$ depende de la hibridización Δ del sistema siguiendo una ley de la forma $e^{-1/\Delta}$. Este tipo de dependencia era el esperado ya que, mediante argumentos de grupo de renormalización, se estima que [43, 44]

$$\xi_K \propto \frac{1}{T_K}, \quad (3.9)$$

mientras, por otro lado, $T_K \propto e^{-1/\Delta}$. De allí que $\xi_K \propto e^{1/\Delta}$. Siguiendo esta línea de pensamiento, resulta natural analizar más profundamente la relación entre $\xi_{0,9}$ y la temperatura de Kondo. En el caso del SIAM de espín 1/2, la temperatura de Kondo está dada por

$$T_K^{S=1/2} = \sqrt{U\Delta} e^{\frac{\pi\varepsilon_d(\varepsilon_d+U)}{2U\Delta}}, \quad (3.10)$$

mientras que para el modelo de espín 1 recientemente se ha encontrado [13] un comportamiento de la forma

$$T_K^{2CAM} = c\sqrt{\frac{\Delta^3}{W}} \left(T_K^{S=1/2}\right)^2 = c\sqrt{\frac{\Delta^3}{W}} e^{\frac{\pi\varepsilon_d(\varepsilon_d+U)}{U\Delta}}, \quad (3.11)$$

con c una constante de orden uno y el semi-ancho de la banda de conducción como la unidad de energía, $W = 1$.

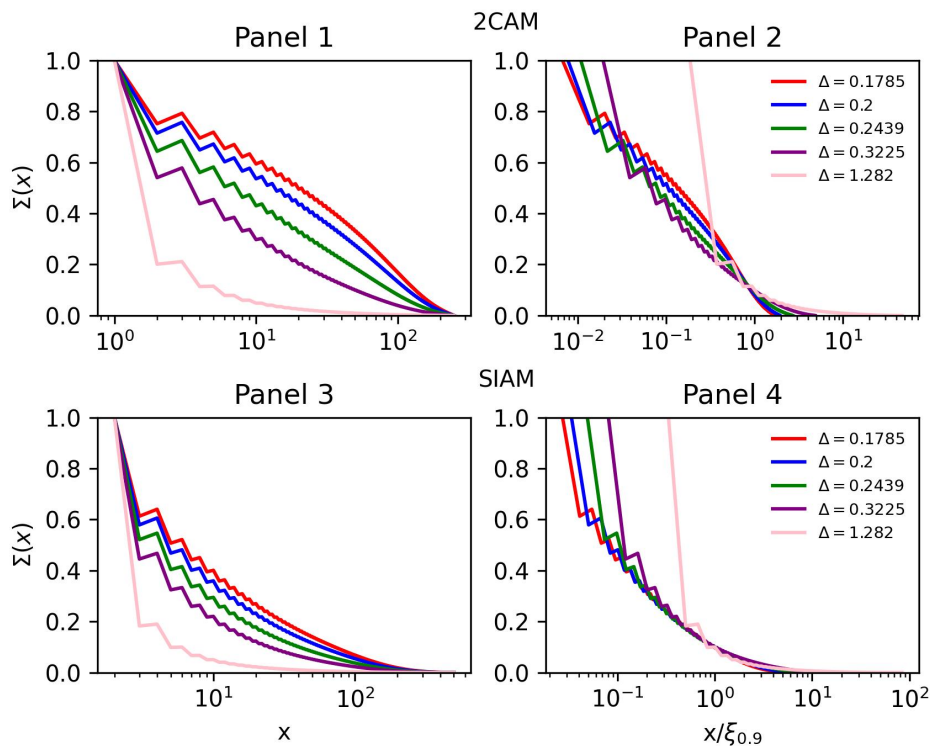


Figura 3.3: Izquierda: función $\Sigma(x)$ para sistemas con distintos valores de hibridación en función de la distancia a la impureza. Derecha: mismas funciones pero ahora rescaleadas con $x \rightarrow x/\xi_{0.9}$. Parámetros del 2CAM: $\varepsilon_d = -U/2 = -0.5$, $J_H = 1.2$, $U' = 0.3$ y $N = 500$. Parámetros del SIAM: $\varepsilon_d = -U/2 = -0.5$ y $N = 500$.

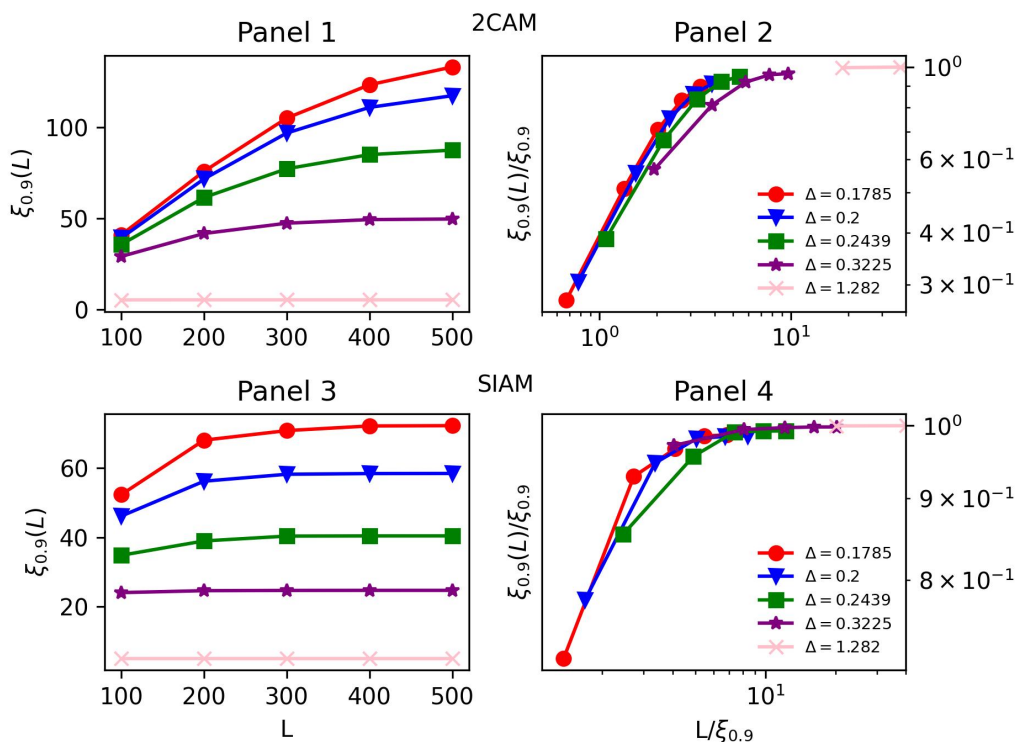


Figura 3.4: Izquierda: longitud de apantallamiento para sistemas con distintos valores de hibridación en función del tamaño del sistema. Derecha: mismas longitudes pero ahora rescaleadas con $L \rightarrow L/\xi_{0.9}$. Los puntos representan los valores de $\xi_{0.9}(L)$ obtenidos y la línea sólida es una ayuda visual. Mismos parámetros de la Figura 3.3.

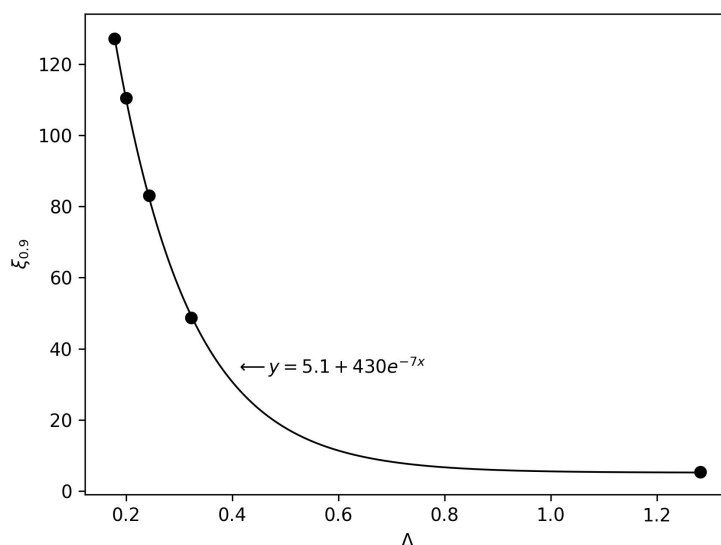


Figura 3.5: Longitud de apantallamiento $\xi_{0,9}$ para el 2CAM en función de la hibridización. Los puntos representan los valores de $\xi_{0,9}$ obtenidos mediante $\Sigma(x)$ y en línea sólida se presenta el ajuste realizado. Mismos parámetros de la Figura 3.3.

En la Figura 3.6 se muestra cómo los resultados obtenidos para $\xi_{0,9}$ se relacionan con la temperatura de Kondo de cada sistema. Para el SIAM de espín 1/2 (derecha), las longitudes de apantallamiento obtenidas presentan un comportamiento en concordancia a la ecuación 3.10, $\ln(\sqrt{U\Delta}\xi_{0,9}) \propto 1/\Delta$. En el caso del 2CAM de espín 1 (izquierda), un comportamiento similar a la ecuación 3.11 es encontrado. Se estima que el limitado número de puntos es la causa de que no pueda observarse del todo la relación con la temperatura de Kondo para este modelo, así como las cuestiones de tamaño previamente discutidas.

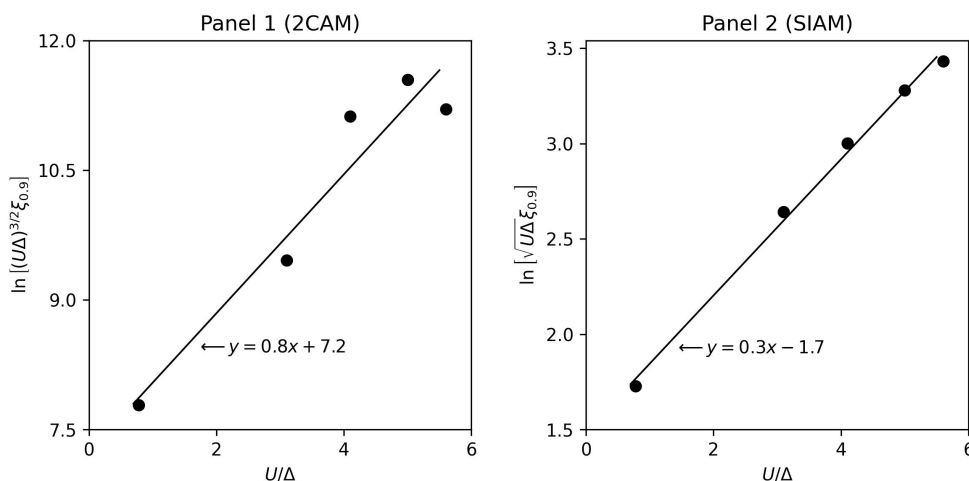


Figura 3.6: Comparación de la dependencia de $\xi_{0,9}$ con U y Δ para el 2CAM (izquierda) y SIAM (derecha). Los puntos representan los valores de $\xi_{0,9}$ obtenidos mediante $\Sigma(x)$ y en línea sólida se presenta el ajuste realizado. Mismos parámetros de la Figura 3.3.

De todos modos, los resultados obtenidos para ambos modelos confirman en buena medida que la relación conjeturada $\xi_K \propto 1/T_K$ es válida también para el

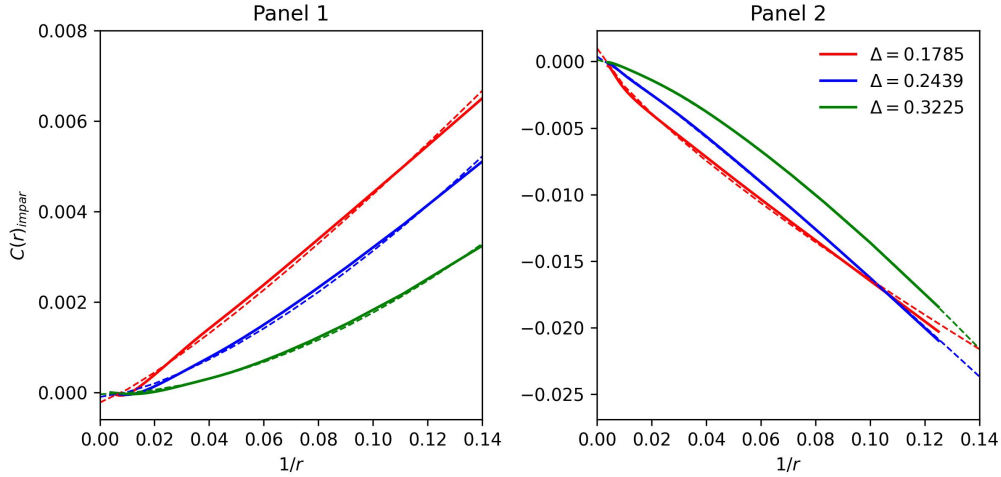


Figura 3.7: Correlaciones $C(r)$ en función de la distancia a la impureza para las subredes impar (izquierda) y par (derecha) con distintos valores de hibridización. La línea punteada representa los valores medidos, mientras que la línea a trazos muestra los ajustes realizados de la forma $1/r^\alpha$, con $1.2 < \alpha_{\text{impar}} < 1.8$ y $0.7 < \alpha_{\text{par}} < 1.3$ en cada subred. Los parámetros utilizados son los mismos que en la Figura 3.1 para $N = 500$.

modelo de Anderson de dos canales. Esto indica que las características esenciales del singlete de Kondo son las mismas independientemente de la estructura orbital de la impureza, al menos en el caso del efecto Kondo completamente apantallado.

3.4.2. Correlaciones de espín entre impureza y electrones de conducción

Debido a la presencia de oscilaciones $2k_F$ en las correlaciones de espín, no resulta sencillo trabajar de manera directa con esta magnitud. Por esta razón, a veces resulta más cómodo separar al sistema en dos subredes: una con los sitios de la red pares y otra con los impares, las cuales se espera reflejen los comportamientos esperados para el sistema “entero”. Por otro lado, los decaimientos mencionados en la sección 3.3 están apuntados a modelos SIAM de espín $1/2$. Teniendo esto presente, no resultaría extraño que se encuentre algún parámetro distinto para el 2CAM de espín 1. Con esto en mente, se espera que los decaimientos tengan una forma $1/r^\alpha$ para el 2CAM, donde α será un parámetro a determinar.

La Figura 3.7 muestra las funciones $C(r)$ calculadas para las subredes par e impar. Los ajustes realizados a estas curvas exhiben el comportamiento esperado de $1/r^\alpha$ para los sitios del baño de conducción cercanos a la impureza. Asimismo, los valores del parámetro α presentan un crecimiento en función del aumento en la hibridización. Este resultado coincide con el hecho de que a medida que aumenta la hibridización disminuye la cantidad de electrones de conducción que se necesitan para apantallar el espín de la impureza.

3.4.3. Sistemas no isotrópicos

La función $\Sigma(x)$, definida en la sección 3.2, deja de tener las propiedades mencionadas una vez que se incluye una anisotropía en el sistema. Sin embargo, manteniendo cuidados a la hora de evaluar la convergencia del estado fundamental de DMRG, es posible realizar el mismo análisis de datos que se planea para sistemas isotrópicos. De esta manera se obtienen nuevas longitudes de apantallamiento $\xi_{0,9}$ con una dependencia en la anisotropía, las cuales se presentan en la Figura 3.8 junto

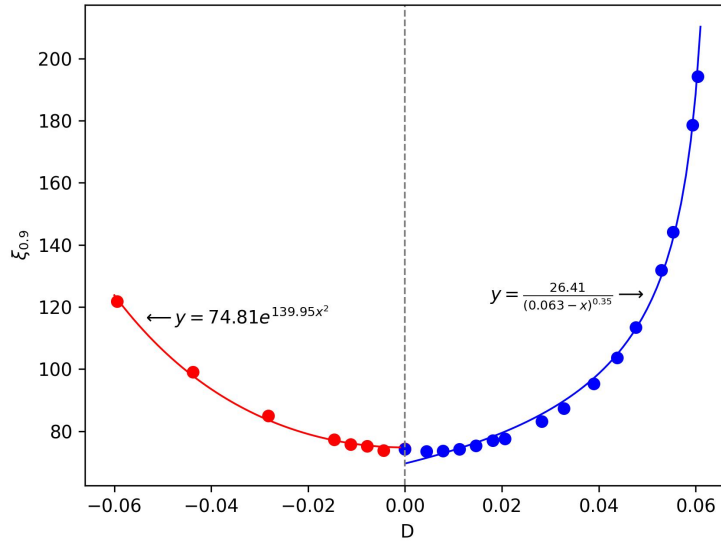


Figura 3.8: Longitud de apantallamiento $\xi_{0,9}$ en función de la anisotropía D (puntos) y ajustes realizados (línea sólida). Parámetros del 2CAM: $\varepsilon_d = -U/2 = -0.5$, $J_H = 1.2$, $U' = 0.3$, $\Delta = 0.2538$ y $N = 500$.

con sus respectivos ajustes. En lo que a éstos respecta, su forma funcional estará relacionada a la temperatura de Kondo mediante $\xi_{0,9} \propto 1/T_K$. Para valores negativos de anisotropía [26] y un modelo SIAM de espín 1/2, la temperatura de Kondo depende exponencialmente de este parámetro, con lo cual en el caso del 2CAM de espín 1 la dependencia es del tipo exponencial cuadrática. Del otro lado del eje de anisotropías, en los valores positivos, la dependencia será un tanto distinta. De [29] se sabe que este último modelo sufre una TQPT para un valor positivo de anisotropía D_c y que además, en $0 < D < D_c$ la temperatura de Kondo T_K^* presenta una dependencia con D del tipo ley de potencias

$$T_K^*(D) \propto T_K^0 \left(\frac{D_c - D}{D_c} \right)^2, \quad (3.12)$$

donde $T_K^0 = T_K(D = 0)$. De esta manera, la longitud de apantallamiento presentará un comportamiento del tipo

$$\xi_{0,9}(D) \propto \left(\frac{D_c}{D_c - D} \right)^\beta, \quad (3.13)$$

siendo β un parámetro a determinar debido a que se trabaja con sistemas de tamaño finito. Los resultados obtenidos en el semieje de anisotropía positiva de la Figura 3.8 indican claramente que existe un valor crítico de anisotropía para el cual la longitud de apantallamiento diverge, correspondiente a una transición de fase cuántica en la que se destruye el efecto Kondo. Para los parámetros elegidos la TQPT ocurre para $D_c \simeq 0.063$. Físicamente se encuentra que al aumentar la anisotropía, la nube de Kondo comienza a “comerse” al sistema rápidamente hasta llegar a valores cercanos a D_c donde el sistema queda completamente dentro de la nube.

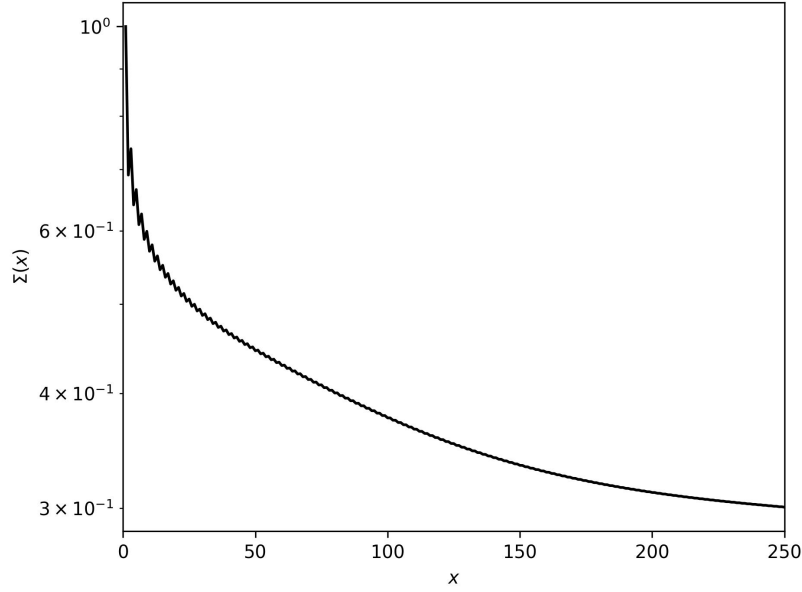


Figura 3.9: Función $\Sigma(x)$ para $D = 0.1 > D_c$ utilizando los mismos parámetros de la Figura 3.8.

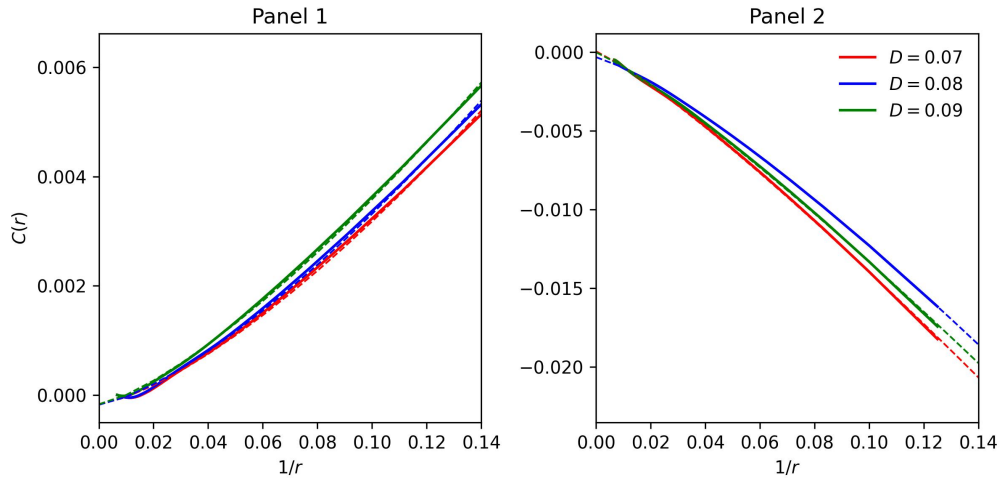


Figura 3.10: Correlaciones $C(r)$ en función de la distancia a la impureza para las subredes impar (izquierda) y par (derecha) con distintos valores de $D > D_c$. La línea punteada representa los valores medidos, mientras que la línea a trazos muestra los ajustes realizados. Los parámetros utilizados son los mismos que en la Figura 3.1 para un sistema con $N = 300$.

Para $D > D_c$ el estado fundamental ya no es un singlete de Kondo entre impureza y baños de conducción. La anisotropía magnética D es tan alta que el grado de libertad magnético de la impureza se *quenchea*, se apaga: el estado de la impureza corresponde esencialmente a la componente $S^z = 0$ del triplete. Por lo tanto pierde sentido hablar de una longitud de apantallamiento como en la fase Kondo. Sin embargo, en principio, mediante la función $\Sigma(x)$ podría seguir siendo posible definir una longitud ξ_a^q que dé una idea sobre la correlación entre impureza y los baños de conducción. En la Figura 3.9 se muestra cómo tal longitud $\xi_{0,9}^q$ engloba a todo el sistema, volviéndose imposible obtenerla mediante el método de Holzner *et. al.* Sin embargo, nada se pierde al indagar en otras magnitudes físicas de este caso. La Figura 3.10 presenta los resultados obtenidos para las correlaciones de espín $C(r)$ entre

la impureza y los sitios del baño de conducción para ambas subredes. Se encuentra que estas correlaciones presentan un comportamiento del tipo $1/r^\beta$ ($\beta \neq \alpha$, con α el parámetro definido para $D = 0$), donde el parámetro del exponente disminuye a medida que la anisotropía se aparta del valor crítico.

La ley de potencia obtenida es llamativa porque indica que, a pesar que se favorece fuertemente la componente $S^z = 0$ del triplete en la impureza, ésta sigue correlacionada con “muchos” electrones de conducción⁴. Por lo tanto, cualitativamente, el decaimiento de la correlación de espín es la misma dentro de la nube de Kondo que en la fase $D > D_c$. Sin embargo, se encuentra que las correlaciones de espín disminuyen apreciablemente con la anisotropía. Una prueba de ello es que $\Sigma(x)$ presenta menos variación respecto a su valor $\Sigma(0) = 1$ cuando aumenta D . Los resultados obtenidos indican que no existe una transición abrupta de las correlaciones cuando se atraviesa la transición de fase cuántica, sino que éstas van decayendo monótonamente al variar la anisotropía.

⁴Contrariamente, un decaimiento exponencial de la correlación con r indicaría que solo unos pocos electrones están correlacionados con la impureza.

Capítulo 4

Entropía de entrelazamiento

“Truth can change its form depending on the observer.”

Maria Ushiromiya

En este capítulo se presenta el estudio de la entropía de entrelazamiento para distintas biparticiones del modelo de impureza de dos canales en función, principalmente, de la anisotropía magnética. Gracias a los trabajos de Wu [17] se sabe que las transiciones de fase cuánticas son señaladas por medio de una discontinuidad en alguna medida del entrelazamiento en un sistema cuántico. El objetivo perseguido en esta parte del trabajo fue, entonces, encontrar un indicio de la transición de fase para valores $D \simeq D_c$ en sistemas de tamaño finito y profundizar el entendimiento del estado fundamental del sistema a través del fenómeno de entrelazamiento cuántico. Además, se discute el comportamiento del sistema por medio de la entropía de entrelazamiento ante los cambios en la hibridización, ocupación de la impureza y otros parámetros. Para interpretar estos resultados se utilizó un modelo de juguete del sistema (ver Anexo A) que permite entender, con un sistema muy simplificado, la física del problema original.

Debido a los largos tiempos de cálculo de DMRG, algunas curvas presentadas en este capítulo no están “completas”. Esto no representa más que un problema estético para el trabajo, ya que las curvas incompletas alcanzan a mostrar los comportamientos físicos de las magnitudes estudiadas. El único problema es, entonces, que queda *feo* que algunas puedan llegar a más valores que otras.

Por último, para evitar confusiones relacionadas a los esquemas del Capítulo 1 se aclara que a partir de ahora los círculos vacíos hacen referencia a orbitales del baño de conducción, mientras que los que estén llenos representarán a los orbitales de la impureza. Como a lo largo de este capítulo se trabajó con distintas geometrías, se agregó a modo de ayuda visual un pequeño esquema en algunas figuras para señalar esto. Es importante tener presente que, en estos esquemas, un sólo círculo vacío representa a la totalidad de un baño de conducción y no solamente a uno de sus orbitales.

4.1. Entrelazamiento en la nube de Kondo

De manera muy similar a lo que se realizó en el Capítulo 3, se presume posible la medición de la longitud del singlete de Kondo por medio de la entropía de entrelazamiento. ¿No resulta más intuitivo estudiar la longitud de un *algo* que presenta un entrelazamiento cuántico mediante la mismísima entropía de entrelazamiento? En la Figura 4.1 se presenta, en analogía directa a la Figura 3.2, la entropía de

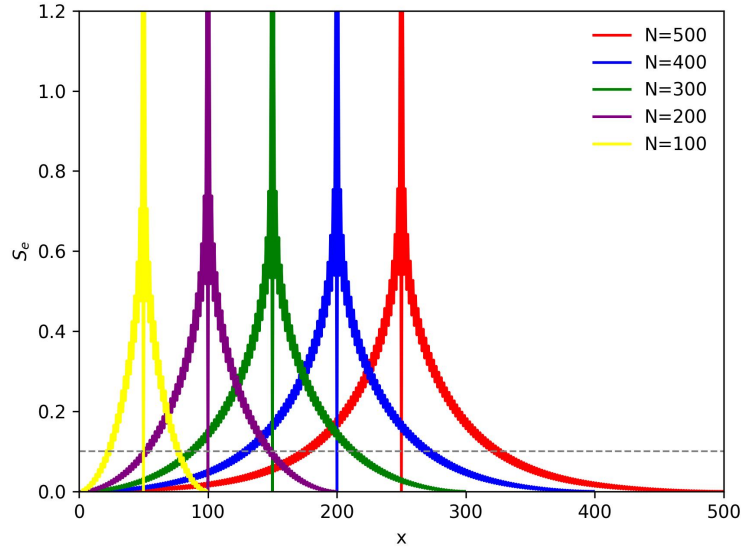


Figura 4.1: Entropía de entrelazamiento en función del punto de corte del sistema para distintos tamaños de éste. En línea punteada se presenta la constante $y = 0.1$ que permite encontrar la longitud de apantallamiento. Mismos parámetros que en la Figura 3.2

entrelazamiento entre el bloque A (formado por la porción de sistema que va desde el primero hasta el sitio x) y el resto del sistema, para distintos tamaños N . En línea punteada se marca la constante $S_e = 0.1$ que permite encontrar aquellos valores de x para los cuales la entropía de entrelazamiento decayó un 90 % de su valor en la mitad del sistema. Esto permite calcular la longitud del singlete de Kondo, $\xi_a^{S_e}$: cuando la entropía de entrelazamiento entre el bloque A y el resto es muy pequeña se puede pensar que el bloque A no forma parte del singlete, no está entrelazado con la región donde está la impureza. A primera vista se nota como la entropía resulta simétrica con respecto al centro del sistema, donde reside la impureza. Los resultados obtenidos para esta nueva longitud de apantallamiento, ya en el límite termodinámico, se muestran en la Figura 4.2 siendo comparados con aquellos obtenidos en el Capítulo 3. La comparación de ambos resultados expone una dependencia lineal entre ellos, indicada por una proporcionalidad mediante un factor de orden uno.

Quizás la Figura 4.2 no parezca demasiado relevante ya que “simplemente” permite obtener resultados que ya se conocían mediante otro método. Sin embargo no es trivial que las correlaciones de espín, que definen a la función $\Sigma(x)$, den la misma información espacial que la entropía de entrelazamiento: estos resultados evidencian la existencia de un singlete de Kondo en el cual los electrones de conducción que lo conforman están espacialmente localizados alrededor de la impureza. ¡La nube de Kondo existe! Obtener una longitud de apantallamiento mediante la entropía de entrelazamiento que coincida con las predicciones teóricas (como la proporcionalidad inversa a la temperatura de Kondo), permite comprender con mayor simplicidad el hecho de que dentro de esta longitud se encierra el estado singlete de Kondo.

4.2. Entropía en sistemas no isotrópicos

Los paneles izquierdos de la Figura 4.3 presentan el cambio que se da en la entropía de entrelazamiento entre los subsistema a (canal a más orbital a de la impureza) y subsistema b (canal b más orbital b de la impureza) al variar la an-

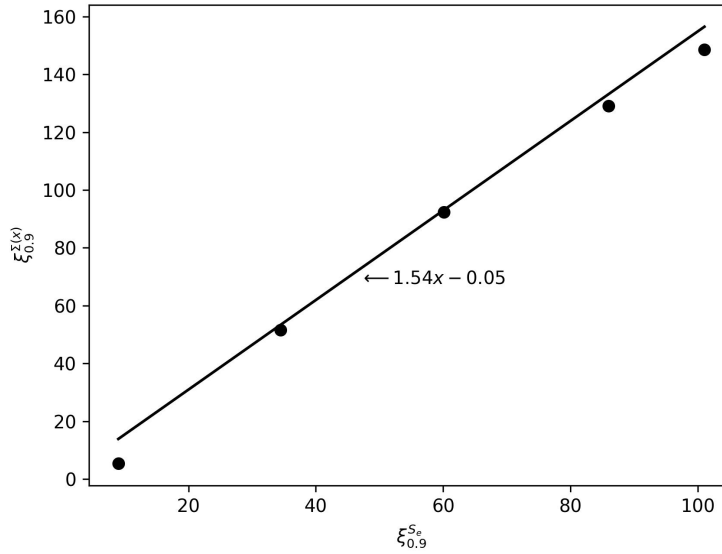


Figura 4.2: Longitud de apantallamiento $\xi_{0,9}$ obtenida mediante la entropía de entrelazamiento en función de aquella obtenida mediante la función $\Sigma(x)$. Los puntos son los resultados obtenidos para distintos valores de hibridación (los mismos que se utilizó en el Capítulo 3) mientras que la línea sólida representa un ajuste.

isotropía presente. A grandes rasgos, la entropía se asemeja a una función escalón con un pequeño “pozo” en las cercanías a $D = 0$. El límite inferior de esta función ($D < 0$) corresponde a $\ln(2)$, indicando, por un lado, que ambos subsistemas están cuánticamente entrelazados y, por otro lado, el valor particular $\ln(2)$ implica que en cada subsistema hay un grado de libertad que puede tomar dos valores posibles, correspondientes a los grados de libertad entrelazados¹. Cálculos realizados usando NRG [13] indican que en el rango de anisotropía negativa, el estado fundamental del sistema es un singlete de Kondo conformado por la impureza con espín 1 y los baños de conducción. Dado que el corte para el cual se calcula la entropía se realiza exactamente entre ambos subsistemas, estos resultados indican que ambos se encuentran entrelazados y el singlete de Kondo no es el simple producto de dos singletes, uno en cada subsistema. Los dos electrones de la impureza forman un espín 1 y éste forma un singlete con ambos canales al mismo tiempo.

Por otro lado, el límite para anisotropías positivas es $\ln(4)$. Para interpretar este resultado resulta necesario un análisis más profundo del sistema, el cual puede ser obtenido mediante un modelo de juguete. En el Anexo A se realiza dicho análisis considerando un pequeño modelo en donde los dos baños de conducción son reemplazados por dos espines 1/2, al igual que cada orbital de la impureza. De esta forma, el nuevo sistema simplificado, esquematizado en la Figura 4.5, consta de cuatro espines 1/2: dos “espines de conducción” y otros dos “espines de la impureza”. Para anisotropías muy positivas este modelo de juguete posee como estado fundamental un estado producto de dos estados triples de $S_z = 0$: los dos espines de la impureza por un lado y los dos espines de conducción por el otro. Como la entropía corta al sistema por la mitad, surgen dos $\ln(2)$ provenientes de cortar estos triples por la mitad. Tomando una notación del tipo $|a, b\rangle = |\text{imp } a, \text{imp } b\rangle$ y

¹Para entender mejor que se quiere decir, se puede recurrir a la analogía con el entrelazamiento en un singlete formado por dos espines 1/2: cada espín tiene un grado de libertad que puede tomar los valores \uparrow, \downarrow , siendo estos números cuánticos los que se encuentran entrelazados. Cuando el espín 1 tiene proyección de espín \uparrow , el otro espín tendrá proyección \downarrow , y viceversa.

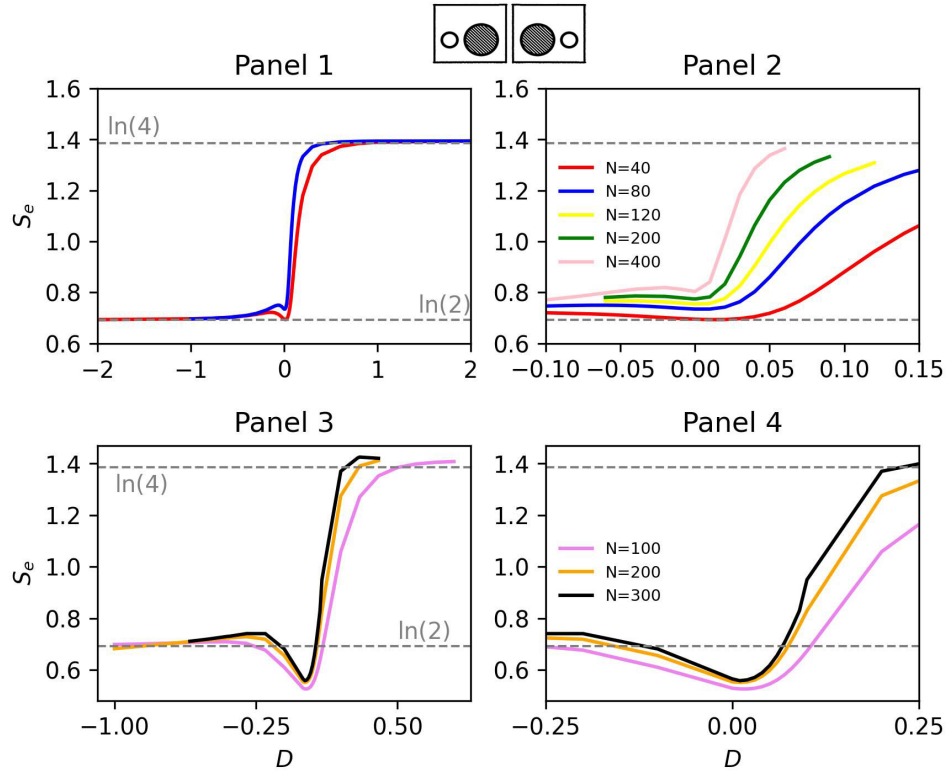


Figura 4.3: Entropía de entrelazamiento partiendo al sistema en los subsistemas a y b (o izquierdo y derecho). Parámetros: $\varepsilon_d = -0.4$, $\Delta = 0.2$, $U = J_H = 40$, $U' = 10$, $W = 1$ (arriba); $\varepsilon_d = -0.5$, $J_H = 1.3$, $\Delta = 0.2$, $U' = 0.3$, $U = 1$ y $W = 1$ (abajo).

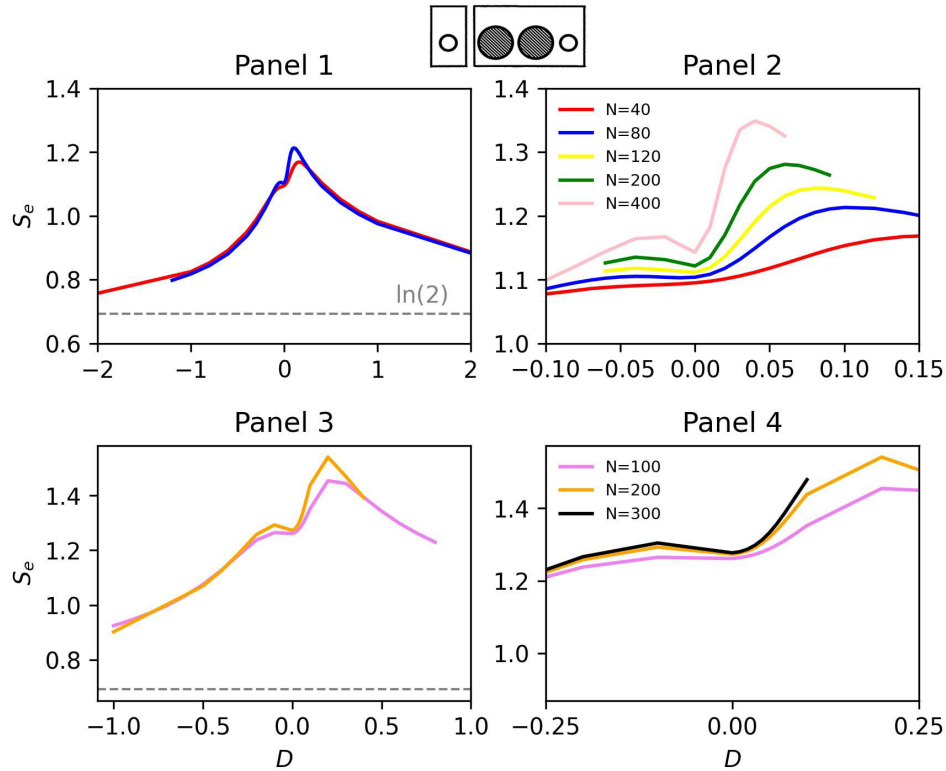


Figura 4.4: Entropía de entrelazamiento separando al canal de conducción a del resto del sistema. Mismos parámetros de la Figura 4.3.

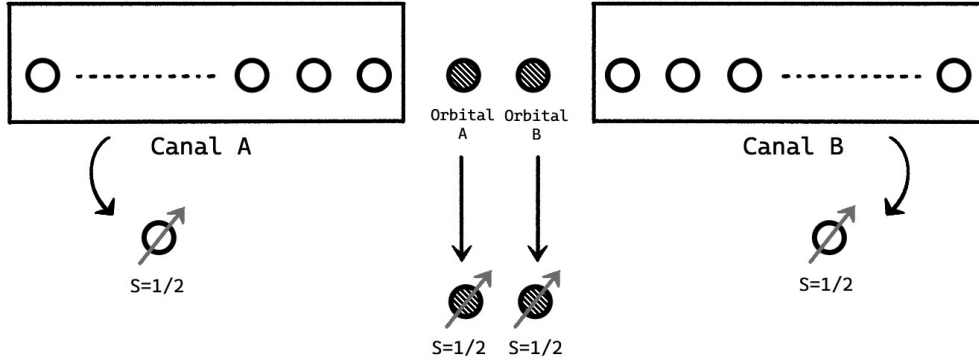


Figura 4.5: Esquema del modelo de juguete para el 2CAM.

$|c, d\rangle_c = |\text{conduccion a, conduccion b}\rangle$, el estado fundamental para $D \gg 0$ tendría la forma

$$|\psi_{D \gg 0}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle) \otimes \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\downarrow\rangle_c + |\downarrow\uparrow\rangle_c). \quad (4.1)$$

Vale mencionar que este resultado no es para nada intuitivo: se podría esperar que al ser D muy positivo la impureza es magnéticamente inerte, haciendo que ambos canales de conducción dejen de "verse". Sin embargo, se encuentra que los canales están entrelazados entre sí para cualquier valor de anisotropía.

Como se mencionó anteriormente, la forma de escalón que toma la entropía de entrelazamiento presenta una especie de "pozo" en las cercanías a $D = 0$. En el lado derecho de la Figura 4.3 se aprecia el hecho de que aumentar el tamaño del sistema provoca que este pozo suba de manera más abrupta. Extrapolando a sistemas en el límite termodinámico, se presume que la entropía presentará un salto finito desde un valor cercano a $\ln(2)$ hacia $\ln(4)$. Anteriormente en esta tesina (ver Capítulo 1) se mencionó que las transiciones de fase cuánticas son delatadas por una discontinuidad en alguna medida del entrelazamiento. Combinando esto y los resultados obtenidos, resulta razonable esperar que este salto en la entropía ocurra para un valor $D = D_c$ estrechamente relacionado a la TQPT encontrada en [29]. En este caso, la fase de líquido *non-Landau* ($D > D_c$) se encontraría caracterizada por una entropía de entrelazamiento $S_e^{\text{non-Landau}} = \ln(4)$ e independiente de la anisotropía. Otro resultado puede ser encontrado al observar el lado derecho de la Figura 4.3: pareciera ser que en la fase convencional de líquido de Fermi ($D < D_c$) S_e sí depende de la anisotropía, ya que el valor $S_e(D = 0)$ tiende a aumentar a medida que lo hace el tamaño del sistema pero siempre manteniendo el límite $S_e(D \rightarrow -\infty) = \ln(2)$.

La diferencia entre los paneles inferiores y superiores de las Figuras 4.3 y 4.4 yace en la elección de parámetros. A pesar de que en ambos casos éstos resultan distintos, el comportamiento de la entropía de entrelazamiento no cambia. Los resultados obtenidos son entonces robustos frente al cambio de parámetros, siempre que se esté en el régimen de tener un espín 1 aproximadamente en la impureza.

De igual manera que en lo discutido recientemente, en la Figura 4.4 se presenta la entropía de entrelazamiento al separar al sistema en el canal de conducción izquierdo (canal a) por un lado, y los dos orbitales de la impureza y el canal derecho por el otro (orbitales a y b de la impureza y canal b). Del lado derecho de esta figura se puede observar un *zoom* a la región cercana a $D = 0$. A diferencia del caso

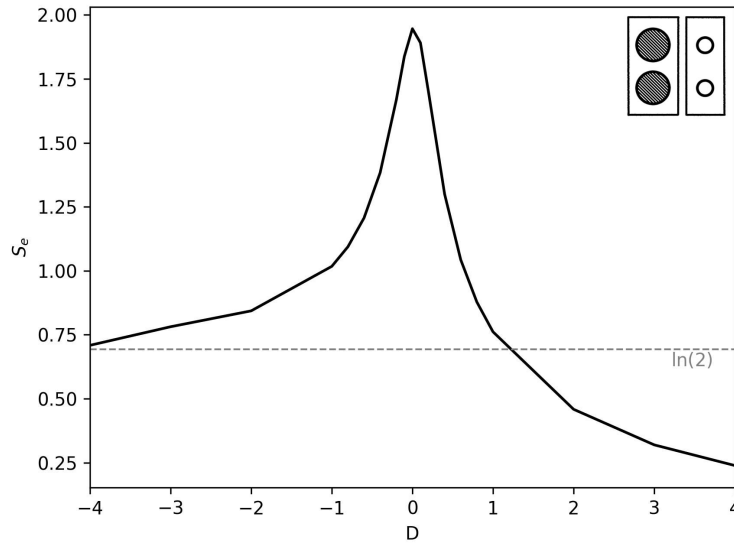


Figura 4.6: Entropía de entrelazamiento entre la impureza y los dos canales de conducción utilizando la geometría escalera. Parámetros: $\varepsilon_d = -0.4$, $\Delta = 0.2$, $U = J_H = 40$, $U' = 10$, $W = 1$ y $N=16$. El pequeño tamaño del sistema se debe a que para esta geometría resulta muy costoso numéricamente realizar cálculos, ya que la geometría ladder implica un hopping a segundos vecinos, haciendo menos eficaz el cálculo mediante MPS.

anterior, para un corte de este tipo se observa que ambos límites tienden a $\ln(2)^2$. Para valores negativos de anisotropía este límite puede entenderse de la misma manera que en el caso anterior: el estado fundamental es un singlete conformado por ambos subsistemas. Al cortar al subsistema a aparece el factor $\ln(2)$. En el caso de anisotropía positiva, el factor $\ln(2)$ nace de cortar el entrelazamiento (tripleto) entre los canales de conducción. Es necesario tener presente para este análisis el hecho de que los orbitales de la impureza se encuentran entrelazados entre sí pero no así con los baños, los cuales si están entrelazados entre ellos.

Como broche de oro para esta sección se presenta en la Figura 4.6, la entropía de entrelazamiento calculada para una geometría de tipo escalera o *ladder*. Este tipo de configuración es el utilizado usualmente para calcular entropías de entrelazamiento, pero que para utilizar junto a DMRG resulta muy poco eficiente numéricamente. El corte en esta geometría se realiza dejando por un lado la totalidad de la impureza (ambos orbitales) y por el otro a los dos canales de conducción. Para valores muy negativos de D se recupera el límite ya mencionado de $\ln(2)$, mientras que para D muy positivo la impureza se desentrelaza de los baños de conducción, como corresponde al estado producto 4.1.

A priori, el resultado obtenido para el límite de anisotropía positiva resulta contra intuitivo debido al entrelazamiento que presentan los baños de conducción. Se presume que este estado nace a raíz de una combinación particular de condiciones: a valores muy altos de anisotropía, el estado fundamental de la impureza resulta en un tripleto con $S_z = 0$, mientras que por otro lado, la interacción de intercambio entre los espines de la impureza y los de conducción favorece la presencia de espines antiparalelos. Con la intención de satisfacer ambas condiciones al mismo tiempo,

²Este límite fue verificado para redes mucho más pequeñas (no presentadas en las gráficas), debido a que para alcanzar estos valores se requieren valores $|D| \sim 10$, resultando muy costoso numéricamente.

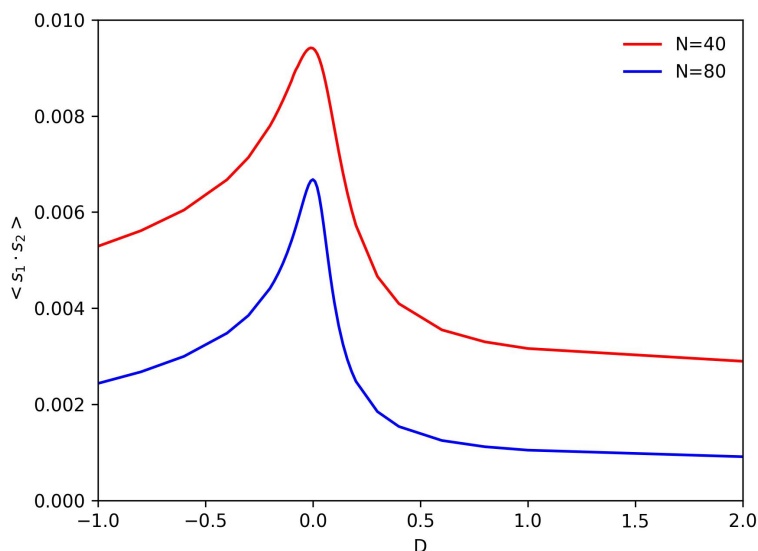


Figura 4.7: Correlación $\langle \hat{s}_1 \cdot \hat{s}_2 \rangle$ entre electrones de conducción primeros vecinos de la impureza. Los parámetros utilizados son los mismos que en la Figura 4.6.

los electrones de conducción deben correlacionarse entre sí, provocando un entrelazamiento entre ellos. En el modelo de juguete del Anexo A se demuestra que el estado fundamental de los “espines de conducción” es también un estado triplete de $S_z = 0$. Para calmar las inquietudes al respecto, en la Figura 4.7 se muestra la correlación $\langle \hat{s}_1 \cdot \hat{s}_2 \rangle$ entre los electrones de conducción \hat{s}_1 y \hat{s}_2 primeros vecinos de la impureza (izquierda y derecha, respectivamente). Al aumentar la anisotropía la correlación entre tales espines tiende a un valor constante positivo, sosteniendo una correlación tipo triplete. En redes de mayor tamaño se espera encontrar un estado triplete de conducción conformado por más electrones que los primeros vecinos a la impureza. De esta forma podría definirse una longitud característica similar a $\xi_{0,9}$, la cual permitiría conocer la extensión de los baños de conducción que se encuentra entrelazada.

4.3. Modificaciones ante la variación de parámetros

Para profundizar sobre el efecto Kondo, considerar las variaciones de la entropía de entrelazamiento con respecto a más parámetros que los vistos anteriormente puede ser muy útil. Esta sección se encuentra dedicada a tal estudio para permitir una mejor comprensión del modelo que se utilizó.

4.3.1. Cambios en la ocupación de la impureza

Si bien el interés principal de esta tesina recae en el 2CAM de espín 1, resulta interesante estudiar que es lo que ocurre en el sistema al cambiar la ocupación de la impureza. Situaciones en donde la ocupación de la impureza se aleja de $n_d \sim 2$ son de interés en sistemas tales como la molécula de níqueloceno sobre cobre (vista en la capítulo 1).

La ocupación de la impureza se ve esencialmente controlada por la energía del orbital localizado. En el caso del 2CAM existe una degeneración en los orbitales de la impureza, provocando que la ocupación sea idéntica en ambos. En la Figura 4.8

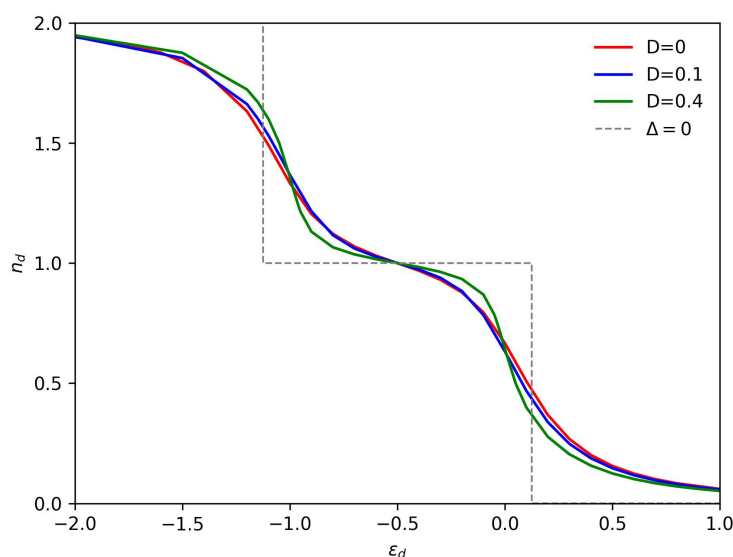


Figura 4.8: Ocupación de la impureza por orbital en función de la energía de los orbitales para diferentes valores de anisotropía. Parámetros: $\Delta = 0.2$, $U = J_H = 1$, $U' = 0$, $W = 1$ y $N = N_e = 16$.

se muestra la ocupación de cada orbital de la impureza en función de la energía de ocupación ε_d para distintos valores de anisotropía, así como para el caso de la impureza desacoplada de ambos baños de conducción ($\Delta = 0$), donde la ocupación no depende de la anisotropía. Se encuentra que la presencia de ésta modifica muy poco la ocupación de la impureza, aún para un valor físicamente muy grande como es $D = 0.4$ ³. A medida que aumenta D la ocupación de la impureza tiende lentamente a aquella que posee la misma al estar desacoplada de los baños. Este resultado puede ser visualizado más sencillamente si se considera un valor de ε_d tal que $n_d \sim 2$. En este caso, si D es muy grande el estado de la impureza es muy cercano a la componente con $S_z = 0$ del triplete. Como las energías de los estados con 1 y 3 electrones aumentan con D ocurre que la hibridización se torna menos efectiva para fluctuar la ocupación de la impureza.

En la Figura 4.9 se grafica la variación de la entropía de entrelazamiento en función de la ocupación n_d de la impureza para dos particiones distintas del sistema. Los parámetros elegidos provocan una simetría de reflexión alrededor del medio llenado de la impureza, con lo cual el sistema se encuentra en un “punto simétrico” donde hay una simetría hueco-partícula: los estados con uno y tres electrones contribuyen de igual manera. Si bien la ocupación de la impureza resulta relativamente insensible ante la presencia de anisotropía, este no es el caso de la entropía de entrelazamiento. Cuando se mide la entropía separando al sistema en dos mitades iguales (panel izquierdo), ésta resulta máxima para una ocupación de medio llenado, encontrándose a su vez una marcada dependencia con la anisotropía en este punto: para $D \sim 0$ se tiene $S_e \sim \ln(2)$, mientras que para D grande $S_e \sim \ln(4)$. Estos resultados coinciden con los obtenidos en las Figuras 4.3 y 4.4. Para anisotropías físicamente razonables ($D \leq 0.1$), la entropía de entrelazamiento se vuelve independiente de D cuando el valor medio de la ocupación total de la impureza se escapa del rango $1 \leq n_d \leq 3$: se

³Teniendo en cuenta que los valores típicos de anisotropía en sistemas nanoscópicos son del orden de unos pocos meV, mientras que los semi-anchos W de las bandas de conducción son del orden de fracciones de eV, un valor $D = 0.4$ (en unidades de $W = 1$) es extremadamente grande.

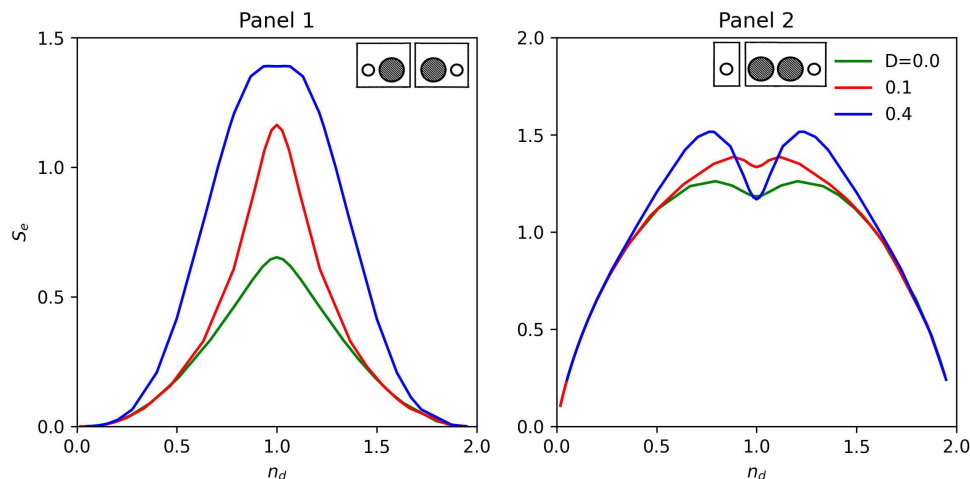


Figura 4.9: Entropía de entrelazamiento en función de la ocupación de cada orbital de la impureza. Panel derecho: separación del sistema en los subsistemas izquierdo y derecho. Panel izquierdo: corte del sistema dejando al canal 1 separado del resto. Los parámetros utilizados son los mismos que en la Figura 4.8.

necesita de la presencia de aproximadamente dos electrones para que la anisotropía tenga un efecto en la impureza.

Cuando la entropía de entrelazamiento se mide separando un solo canal del resto del sistema (panel derecho de la Figura 4.9), el comportamiento en función de la anisotropía es no monótono y se observa una menor variación con respecto a lo que ocurría en el caso anterior. Resulta llamativo el hecho de que el máximo en la entropía se encuentre desplazado con respecto al medio llenado, aunque este resultado es más notorio para valores demasiado grandes de anisotropía ($D \geq 0.4$). Para $D \sim 0$ se encuentra que la entropía de entrelazamiento se vuelve casi constante en el rango de ocupación total de la impureza $1 \leq n_d \leq 3$. Este resultado puede interpretarse como que la estructura de entrelazamiento del singlete de Kondo para el modelo de dos orbitales es poco sensible a la ocupación, siempre que se tengan contribuciones importantes de los estados con dos electrones.

4.3.2. Variación con la hibridización

La hibridización entre la impureza y los canales de conducción que la acompañan es quien permite que se establezca el efecto Kondo en un sistema: los saltos de los electrones entre ambos sistemas se terminan traduciendo en una interacción de intercambio antiferromagnética que provoca la formación del singlete de Kondo. Son de principal interés aquellas hibridizaciones pequeñas en comparación a otros parámetros como, por ejemplo la energía de ionización de la impureza. En tal caso, es posible definir un “buen momento” magnético en la impureza. Sin embargo, para comprender mejor el estado fundamental del 2CAM resulta muy útil estudiar el comportamiento de la entropía de entrelazamiento en función de la hibridización.

En la Figura 4.10 se presenta la entropía de entrelazamiento para las dos particiones del sistema utilizadas hasta ahora. En el caso donde la entropía se mide cortando al sistema en dos subsistemas simétricos (panel izquierdo), la entropía tiende a cero al aumentar la hibridización. Al haber tomado valores no tan grandes para la interacción de Hund y la repulsión de Hubbard, cuando la hibridización es del orden de estos parámetros, el estado fundamental del sistema consiste en el estado producto de los estados fundamentales de cada subsistema por separado. Estos dos subsis-

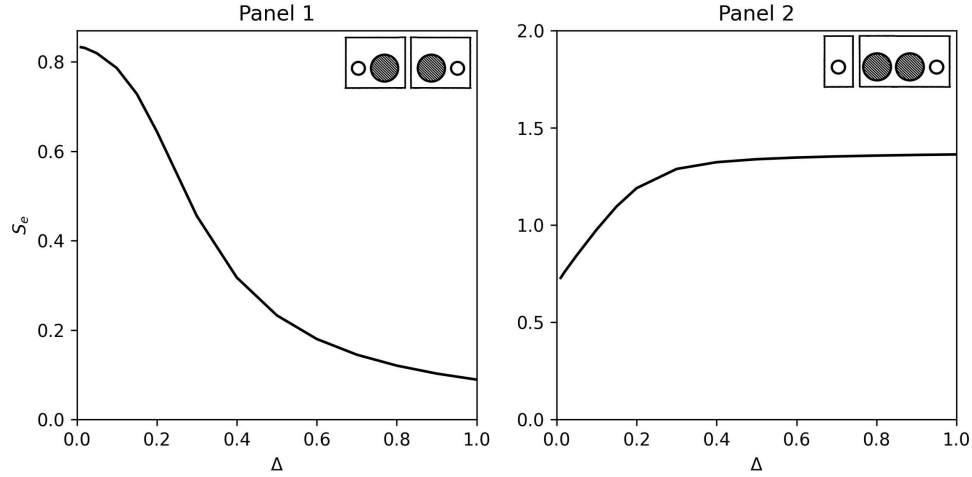


Figura 4.10: Entropía de entrelazamiento en función de la hibridización. Parámetros utilizados: $\varepsilon_d = 0.4$, $U = J_H = 1$, $U' = 0$, $W = 1$, $D = 0$ y $N = 120$.

temas no se "sienten" entre ellos y por lo tanto, cuentan con un entrelazamiento despreciable.

Por otro lado, cuando se separa a un canal del resto del sistema (panel derecho de la Figura 4.10) la entropía tiende a $\ln(4)$ al aumentar la hibridización. Previamente, cuando se analizó la dependencia de la entropía de entrelazamiento con la anisotropía se había obtenido este mismo límite. Sin embargo, tal resultado encontraba su origen en el "entrelazamiento doble" que ocurría entre los dos subsistemas (orbitales y canales por separado, estando desentrelazados entre ellos). La diferencia con ese caso es que ahora, más precisamente en el párrafo anterior, se encontró que ambos subsistemas están desentrelazados. El límite de $\ln(4)$ deriva, entonces, de otro entrelazamiento. Cuando la hibridización es muy alta existen fuertes fluctuaciones de carga en la impureza, permitiendo pensar que el estado fundamental posee contribuciones importantes de los cuatro estados: vacío, simple ocupado *up*, simple ocupado *down* y doble ocupado. De esta forma, el límite $\ln(4)$ se obtiene de un entrelazamiento entre el canal *a* y su respectivo orbital. Esto sugiere que el estado fundamental resulta ser una combinación de los cuatro estados de la impureza junto con estados de su baño de conducción asociado. Este resultado puede ser interpretado de la siguiente manera: además del singlete usual de espín, este estado cuenta con un "singlete" en el sector de carga (por ejemplo, el estado vacío de la impureza aparece estrechamente ligado con un estado de conducción de M electrones, mientras que el doble ocupado lo está con un estado de conducción con $M - 2$ electrones). Para dar un sustento a esta idea, en la Figura 4.11 se muestra la entropía de entrelazamiento en función de la hibridización para la geometría escalera⁴ separando los orbitales de la impureza y ambos baños. Efectivamente, se encuentra para este caso que la entropía tiende al límite $2 \times \ln(2)$ cuando la hibridización aumenta. El factor 2 que aparece surge de que ahora se tienen dos sistemas de una impureza acoplada a un único canal. Finalmente, para $\Delta \rightarrow 0$ la entropía es cercana a $2 \times \ln(2)$, valor correspondiente al doble de la entropía asociada a un singlete de Kondo convencional de espín $1/2$.

⁴Si bien este cálculo se realizó para una red pequeña ($N=16$), es lógico pensar que el resultado es válido para redes de mayor tamaño.

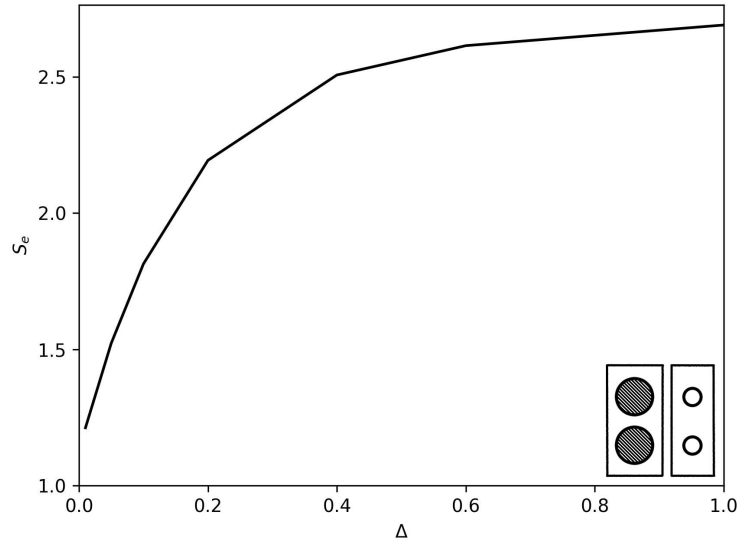


Figura 4.11: Entropía de entrelazamiento en función de la hibridización utilizando la geometría escalera. Parámetros utilizados: $\varepsilon_d = 0.4$, $U = J_H = 1$, $U' = 0$, $W = 1$, $D = 0$ y $N = 16$.

4.3.3. Presencia de campo magnético

Al agregar un campo magnético al sistema se destruye fácilmente el efecto Kondo. El campo favorece una proyección determinada de espín por sobre las otras, reduciendo así las fluctuaciones de espín necesarias para la formación de singletes.

El panel izquierdo de la Figura 4.12 muestra la entropía de entrelazamiento partiendo el sistema al medio en función del campo magnético aplicado para distintos valores de anisotropía. En el lado derecho de esta misma figura se presentan resultados similares pero ahora cortando al sistema de forma tal que quede el canal a separado del resto. La variación que se observa al modificar el campo magnético es idéntica en ambos casos: al aumentar el campo el entrelazamiento del sistema tiende a cero. Este resultado no es de extrañar dado que el campo magnético destruye al efecto Kondo, resultando en la ausencia de un singlete de Kondo como estado fundamental del sistema. Una diferencia cuantitativa es que el entrelazamiento entre los subsistemas tiende a cero mucho más rápidamente que aquel que se da entre un canal y el resto del sistema. Un dado campo magnético resulta más efectivo para desentrelazar los subsistemas que para realizar esto mismo entre un canal y su respectivo orbital. De manera general, el campo magnético necesario para destruir un singlete de Kondo es del orden de T_K para el caso de anisotropía nula. De esto último se desprende el hecho de que será necesario un campo menor para destruir el singlete de Kondo en el 2CAM de espín 1 que en el caso de espín 1/2. Esto último es debido a que la temperatura de Kondo para $S=1$ es mucho menor que la correspondiente a $S=1/2$.

En sistemas no isotrópicos con $D > 0$ la anisotropía favorece una proyección de espín $S_z = 0$, provocando que el campo magnético requerido para desentrelazar a las partes del sistema sea mayor que para $D < 0$. Este último caso favorece a aquellos estados con proyecciones $S_z = \pm 1$, provocando así que un campo magnético pequeño favorezca fácilmente a una de ellas y, consecuentemente, destruyendo el efecto Kondo.

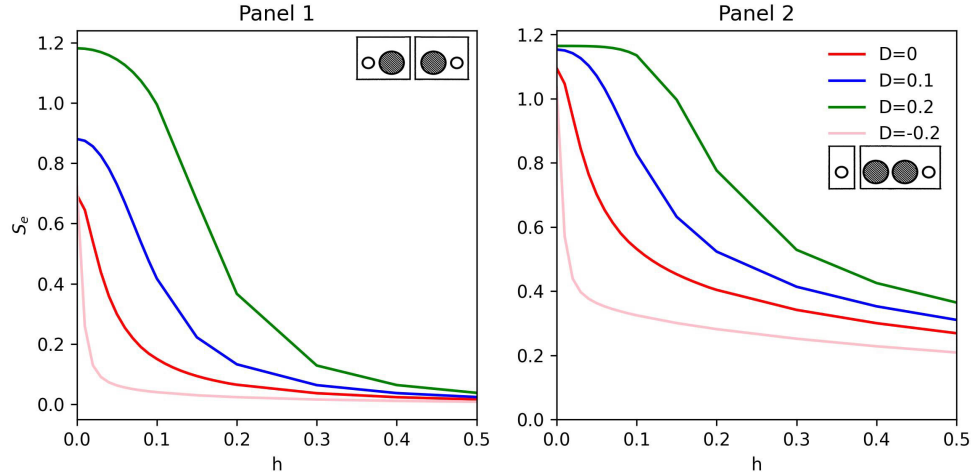


Figura 4.12: Entropía de entrelazamiento en función de un campo magnético h aplicado en la impureza. Cada panel presenta un corte distinto en el sistema: separación entre subsistemas (izquierda) y separación entre canal izquierdo y el resto del sistema (derecha). Parámetros: $\varepsilon_d = -0.4$, $\Delta = 0.2$, $U = J_H = 40$, $U' = 10$, $W = 1$ y $N = 40$.

4.4. Modelo de Kondo de espín 1

El modelo de Kondo de espín 1 es el límite del 2CAM cuando se eligen parámetros tales que la ocupación de la impureza es cercana a dos y su estado fundamental sea entonces un estado triplete. El hamiltoniano de Kondo en este caso es

$$\hat{H}_K = \sum_{i=0}^{N-1} \sum_{\alpha\sigma} t_\alpha \left(\hat{c}_{i\alpha\sigma}^\dagger \hat{c}_{i+1\alpha\sigma} + \text{h.c.} \right) + \sum_{\alpha} J_\alpha \hat{\mathbf{S}} \cdot \hat{\mathbf{s}}_{0\alpha}, \quad (4.2)$$

donde $\alpha = a, b$ refiere a los canales de conducción, t_α es el *hopping* asociado al canal α , $\hat{\mathbf{S}}$ es el operador de espín $S = 1$ correspondiente a la impureza y $\hat{\mathbf{s}}_{0\alpha}$ corresponde a los espines electrónicos en el extremo de los canales de conducción pegados al espín de la impureza. Utilizando este modelo se repitieron los cálculos realizados previamente con el modelo de Anderson. La idea fue ver que los resultados pueden ser reproducidos cualitativamente, ya que para una comparación cuantitativa se necesitaban tomar parámetros en el modelo de Anderson que complicaban los cálculos (por ejemplo, $\varepsilon_d \rightarrow \infty$). Numéricamente el modelo de Kondo resulta más sencillo de trabajar. Sin embargo, el modelo de Anderson representa de manera más realista a los sistemas físicos con impurezas de dos orbitales y además, permite un análisis más profundo del sistema.

En la Figura 4.13 se muestra la entropía de entrelazamiento separando al sistema en el canal a por un lado y el resto por el otro. Estas curvas recuperan los límites y comportamientos de sus respectivas hermanas del modelo de Anderson (ver Figura 4.4). Para valores muy grandes de $|D|$, la entropía tiende a $\ln(2)$. En la zona cercana a $D = 0$ se observa el mismo tipo de “pozo” que en el modelo de Anderson, el cual presenta subidas más abruptas al aumentar el tamaño de red.

4.4.1. Distintas interacciones de intercambio

Hasta ahora se consideró que los orbitales, al igual que los canales, se encontraban degenerados. Además, la hibridización entre ellos se mantuvo idéntica para ambos subsistemas. Llamando $J_{I,D}$ a las interacciones de intercambio a izquierda y

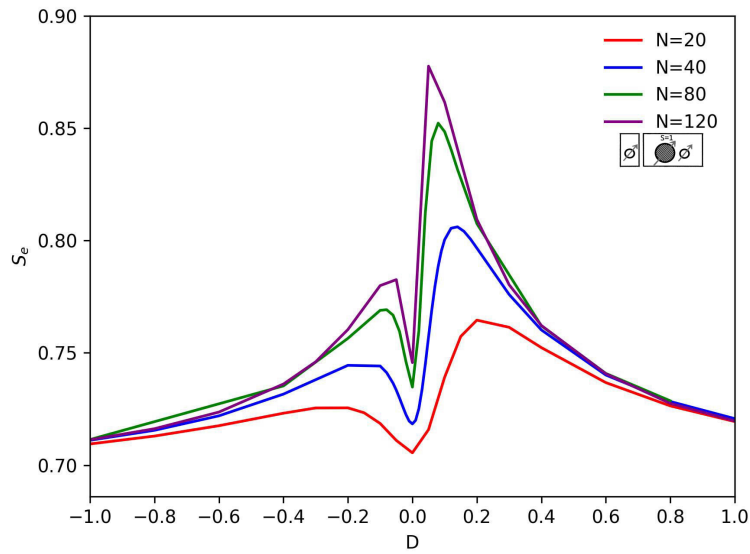


Figura 4.13: Entropía de entrelazamiento para el modelo de Kondo en función de la anisotropía cortando al sistema de manera tal que el canal a quede separado del resto. Parámetros: $J = 0.2$ y $W = 1$.

derecha respectivamente, en la Figura 4.14 se presenta la entropía de entrelazamiento, manteniendo fijo $J_I = 0.2$, en función de la anisotropía para distintos valores de J_D . Debido a este cambio, ahora no es lo mismo partir al sistema dejando al canal izquierdo separado del resto que hacerlo con el del lado derecho y por lo tanto se debe hacer esa distinción. Se denota como “A” a la partición asociada a dicho canal.

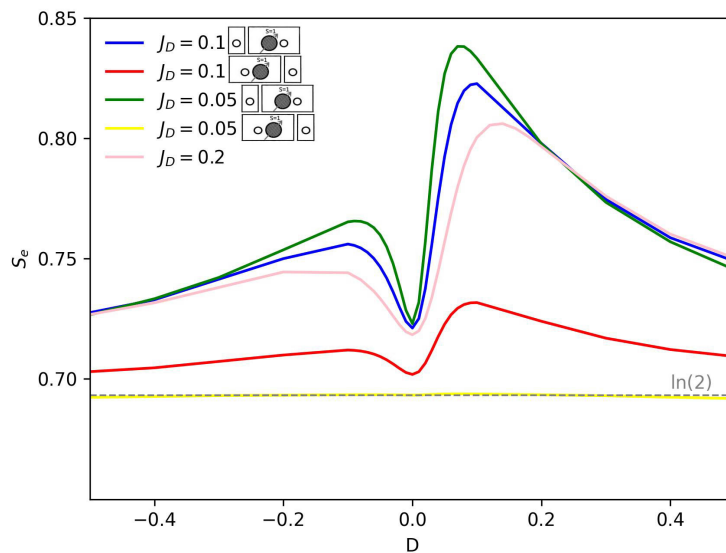


Figura 4.14: Entropía de entrelazamiento para el modelo de Kondo en función de la anisotropía para distintas interacciones de intercambio J_D en el lado derecho. Debido a los distintos valores de J_D no es indistinto calcular la entropía cortando al sistema en el canal izquierdo o derecho, razón por la cual se indica como “A” al canal tomado para cada curva. Parámetros: $J = 0.2$ y $W = 1$.

Al tomar “A” como el canal más fuertemente acoplado se observan cambios leves al reducirse el intercambio de la impureza con el otro canal. Si se asocia la posición “D” del pico de estas curvas con la transición de fase se encuentra que al reducirse J_D este valor crítico también disminuye. En el caso $J_D = 0$ el sistema se transforma en un espín 1 acoplado a un único baño de conducción, siendo su estado fundamental el estado Kondo subapantallado. Para este sistema se sabe que la anisotropía crítica que permite transicionar a una fase sin efecto Kondo es $D_c = 0^+$ [56], resultado consistente con el obtenido en la Figura 4.14. Finalmente, si “A” corresponde al canal menos acoplado a la impureza, la entropía se vuelve constante e igual a $\ln(2)$ para interacciones de intercambio apreciablemente diferentes.

Capítulo 5

Conclusiones y perspectivas

A lo largo de esta tesina se realizó un estudio de las propiedades espaciales del modelo de Anderson de una impureza magnética de espín $S = 1$, con dos orbitales acoplados a dos canales de conducción (2CAM), utilizando el método de grupo de renormalización de la matriz densidad (DMRG) gracias a la librería ITensor. Este sistema ha sido estudiado con anterioridad utilizando el método de renormalización numérico (NRG), el cual presenta grandes complicaciones para el estudio de las propiedades espaciales.

Se encontró que en la fase Kondo del 2CAM se reproducen las propiedades espaciales ya conocidas para modelos más simples, como el modelo de Anderson SIAM consistente en una impureza con un único orbital acoplada a un solo baño de conducción. Esto es un indicio de que las propiedades del singlete de Kondo, para el caso del efecto Kondo completamente apantallado, son cualitativamente independientes de la estructura orbital de la impureza. En particular, se calculó la longitud de la nube de Kondo ξ_K y se verificó que satisface en buena medida la relación $\xi_K \propto 1/T_K$. Cuantitativamente sí existe una diferencia marcada con los resultados del SIAM: como la temperatura de Kondo del modelo de dos orbitales es mucho menor, la nube de Kondo es más extensa. Podemos pensar que como el espín de la impureza es 1, entonces se necesitan mucho más electrones para su apantallamiento que para una impureza de espín 1/2. Los comportamientos encontrados, los cuales nacen originalmente de un estudio sobre las correlaciones de espín entre la impureza y los sitios del baño de conducción, son verificados mediante el análisis de la entropía de entrelazamiento del sistema. Con esta última cantidad resulta más intuitiva la definición de la nube de Kondo, entidad que contiene a los sitios (de la impureza y del baño de conducción) que participan en la formación del singlete de Kondo para el estado fundamental del sistema.

Estudiando el mismo modelo pero incluyendo una anisotropía en la impureza fueron encontrados indicios de una transición de fase cuántica topológica entre dos líquidos de Fermi para un valor $D_c > 0$. Uno de ellos es el ya conocido líquido de Fermi-Landau para sistemas con efecto Kondo totalmente apantallado. El restante fue recientemente nombrado como “líquido de Fermi *non-Landau*” y poco se conocía de su estado fundamental. Gracias a la entropía de von Neumann como medida de entrelazamiento fue posible comprender que este estado exhibe un entrelazamiento “doble”: entre los orbitales de la impureza por un lado, y ambos baños de conducción por el otro. Este resultado resulta no trivial, ya que intuitivamente se esperaba que dicho estado consista en un producto de los estados fundamentales de cada uno de los tres subsistemas: la impureza y cada uno de los baños por separado.

En estudios posteriores se espera profundizar en el estudio de las propiedades espaciales de la nube de Kondo en sistemas de mayor tamaño. Debido a los tiempos

de cómputo del DMRG resultó complicado trabajar con sistemas muy grandes, con lo cual se pretende lidiar más adelante. Con tales sistemas se buscaría realizar un estudio más cuidadoso de tamaño finito que permita estimar con mayor precisión el valor de D_c y luego, compararlo con el correspondiente obtenido mediante NRG. Asimismo, es muy importante corroborar los resultados de esta tesina haciendo extrapolaciones al límite termodinámico, tales como el comportamiento de la entropía de entrelazamiento cerca de $D = D_c$ y la longitud de apantallamiento tendiendo a infinito cerca de este mismo punto crítico.

Por otro lado, recientemente ha llegado a oídos del grupo el concepto de “orbitales naturales” [51]: serían orbitales del baño de conducción que predominantemente se acoplan y se entrelazan con la impureza, y cuya extensión en el espacio real abarca a más de uno de los orbitales “originales” del baño. Con ayuda de los expertos en cálculo numérico del grupo se espera poder incursionar en esta nueva herramienta y así profundizar en el entendimiento del singlete de Kondo para impurezas multiorbitales. Por último y siguiendo esta idea, sería interesante realizar estudios utilizando la concurrencia como medida de entrelazamiento. La concurrencia da información sobre el entrelazamiento entre dos partes del sistema que no son necesariamente complementarias, por ejemplo, informa sobre cómo se entrelaza la impureza con un orbital electrónico específico. Esta herramienta podría ser de utilidad a la hora de estudiar el estado fundamental en la fase $D > D_c$.

Anexo A

Modelos de juguete

Mucho se ha hablado de la imposibilidad de realizar estudios analíticos sobre sistemas de muchos cuerpos. En estos casos existe la posibilidad de trabajar con un modelo simplificado del sistema: los *toy models*. Estos modelos simplificados resultan muy útiles para explicar cualitativamente los comportamientos del sistema original.

En este Anexo se presenta el cálculo analítico de la entropía de entrelazamiento para dos *toy models* con el objetivo de proveer una base para la interpretación de los resultados del Capítulo 4 .

A.1. Dos espines 1/2 y un espín 1

El modelo de la impureza de Kondo de espín 1 acoplada a dos baños de conducción puede simplificarse al reemplazar cada baño por un único espín 1/2. De esta forma se tiene un sistema consistente en una impureza $\hat{\mathbf{S}}$ de espín $S = 1$ acoplada mediante la interacción de intercambio J_D al operador de espín 1/2 $\hat{\mathbf{s}}_D$ y mediante la interacción J_I al operador de espín 1/2 $\hat{\mathbf{s}}_I$. D e I hacen referencia a espines 1/2 a derecha e izquierda de la impureza, respectivamente. Además, el espín 1 tiene anisotropía de ion simple D . El hamiltoniano de este modelo resulta

$$\hat{H} = \sum_{\alpha=D,I} J_{\alpha} \hat{\mathbf{s}}_{\alpha} \cdot \hat{\mathbf{S}} + D \left(\hat{S}^z \right)^2. \quad (\text{A.1})$$

A.1.1. Determinación del estado fundamental

Para calcular la entropía de entrelazamiento es necesario encontrar el estado fundamental del hamiltoniano (A.1). Por simplicidad a la hora de realizar los cálculos conviene expresar al operador $\hat{\mathbf{S}}$ en termino de los operadores escalera \hat{S}^+ y \hat{S}^-

$$\hat{H} = \sum_{\alpha=D,I} J_{\alpha} \left[\frac{1}{2} \left(\hat{s}_{\alpha}^+ \hat{S}^- + \hat{s}_{\alpha}^- \hat{S}^+ \right) + \hat{s}_{\alpha}^z \hat{S}^z \right] + D \left(\hat{S}^z \right)^2, \quad (\text{A.2})$$

donde la acción de los operadores involucrados sobre estados $|SM\rangle$

$$\hat{S}^+ |S, M\rangle = \sqrt{S(S+1) - M(M+1)} |S, M+1\rangle, \quad (\text{A.3a})$$

$$\hat{S}^- |S, M\rangle = \sqrt{S(S+1) - M(M-1)} |S, M-1\rangle, \quad (\text{A.3b})$$

$$\hat{S}^z |S, M\rangle = M |S, M\rangle, \quad (\text{A.3c})$$

siendo S el espñin total y M su proyección a lo largo del eje de cuantización \hat{z} . Por ejemplo, para $S = 1$ ($M = \pm 1, 0$) se tiene

$$\hat{S}^+ |0\rangle = \sqrt{2} |1\rangle, \quad \hat{S}^+ |-1\rangle = \sqrt{2} |0\rangle, \quad \hat{S}^- |1\rangle = \sqrt{2} |0\rangle, \quad \hat{S}^- |0\rangle = \sqrt{2} |-1\rangle, \quad (\text{A.4})$$

donde han sido expresados los estados por su número cuántico M obviando la notación $S = 1$.

Dado que

$$\left[\hat{H}, \sum_{\alpha} \hat{s}_{\alpha}^z + \hat{S}^z \right] = 0, \quad (\text{A.5})$$

se encuentra que S_{tot}^z es un buen número cuántico. En este problema los posibles valores de la proyección del espín total son $S_{\text{tot}}^z = \pm 2, \pm 1, 0$. El proceso de diagonalización del hamiltoniano se realizará entonces en cada uno de los subespacios asociados a estos valores.

Subespacios $S_{\text{tot}}^z = \pm 2$

Como ambos subespacios son unidimensionales, los estados con $S_{\text{tot}}^z = \pm 2$ son autoestados del hamiltoniano (A.1):

$$\hat{H}|\uparrow, 1, \uparrow\rangle = \left(\frac{J_D}{2} + \frac{J_I}{2} + D \right) |\uparrow, 1, \uparrow\rangle \quad (\text{A.6a})$$

$$\hat{H}|\downarrow, -1, \downarrow\rangle = \left(\frac{J_D}{2} + \frac{J_I}{2} + D \right) |\downarrow, -1, \downarrow\rangle. \quad (\text{A.6b})$$

Ambos estados se encuentran degenerados por simetría y el autovalor asociado a ellos es

$$E(S_{\text{tot}}^z = \pm 2) = \frac{J_D}{2} + \frac{J_I}{2} + D \quad (\text{A.7})$$

Subespacios $S_{\text{tot}}^z = \pm 1$

Para trabajar en este subespacio es conveniente considerar la base

$$\{|1\rangle \equiv |\uparrow, 0, \uparrow\rangle \quad |2\rangle \equiv |\uparrow, 1, \downarrow\rangle \quad |3\rangle \equiv |\downarrow, 1, \uparrow\rangle\}. \quad (\text{A.8})$$

La acción del hamiltoniano sobre los elementos de esta base es

$$\hat{H}|1\rangle = \frac{J_D}{\sqrt{2}}|2\rangle + \frac{J_I}{\sqrt{2}}|3\rangle, \quad (\text{A.9a})$$

$$\hat{H}|2\rangle = \left(\frac{J_D}{2} - \frac{J_I}{2} + D \right) |2\rangle + \frac{J_D}{\sqrt{2}}|1\rangle, \quad (\text{A.9b})$$

$$\hat{H}|3\rangle = \left(-\frac{J_D}{2} + \frac{J_I}{2} + D \right) |3\rangle + \frac{J_I}{\sqrt{2}}|1\rangle. \quad (\text{A.9c})$$

Tomando el caso de intercambios iguales $J_D = J_I \equiv J$ es posible encontrar una expresión simple de la energía del estado fundamental en este subespacio

$$E_{\text{gs}}(S_{\text{tot}}^z = \pm 1) = \frac{D}{2} - \sqrt{\left(\frac{D}{2} \right)^2 + J^2}, \quad (\text{A.10})$$

siendo los otros autovalores D y $\frac{D}{2} + \sqrt{\left(\frac{D}{2} \right)^2 + J^2}$.

Subespacio $S_{\text{tot}}^z = 0$

En el subespacio $S_{\text{tot}}^z = 0$ conviene definir la base

$$|1\rangle \equiv |\uparrow, 0, \downarrow\rangle, \quad |2\rangle \equiv |\downarrow, 0, \uparrow\rangle, \quad |3\rangle \equiv |\uparrow, -1, \uparrow\rangle, \quad |4\rangle \equiv |\downarrow, 1, \downarrow\rangle \quad (\text{A.11})$$

sobre la cual el hamiltoniano actúa de la forma

$$\hat{H}|1\rangle = \frac{J_D}{\sqrt{2}}|3\rangle + \frac{J_I}{\sqrt{2}}|4\rangle \quad (\text{A.12a})$$

$$\hat{H}|2\rangle = \frac{J_I}{\sqrt{2}}|3\rangle + \frac{J_D}{\sqrt{2}}|4\rangle, \quad (\text{A.12b})$$

$$\hat{H}|3\rangle = \frac{J_D}{\sqrt{2}}|1\rangle + \frac{J_I}{\sqrt{2}}|2\rangle + \left(D - \frac{J_I}{2} - \frac{J_D}{2}\right)|3\rangle, \quad (\text{A.12c})$$

$$\hat{H}|4\rangle = \frac{J_D}{\sqrt{2}}|2\rangle + \left(D - \frac{J_I}{2} - \frac{J_D}{2}\right)|4\rangle. \quad (\text{A.12d})$$

Sumando y restando de manera conveniente los estados previamente definidos, se logra reducir la diagonalización del hamiltoniano a la de dos bloques de tamaño 2×2

$$\hat{H} \left(\frac{|1\rangle + \sigma|2\rangle}{\sqrt{2}} \right) = \frac{J_D + \sigma J_I}{\sqrt{2}} \left(\frac{|3\rangle + \sigma|4\rangle}{\sqrt{2}} \right), \quad (\text{A.13a})$$

$$\hat{H} \left(\frac{|3\rangle + \sigma|4\rangle}{\sqrt{2}} \right) = \frac{J_D + \sigma J_I}{\sqrt{2}} \left(\frac{|1\rangle + \sigma|2\rangle}{\sqrt{2}} \right) + \left(D - \frac{J_I}{2} - \frac{J_D}{2} \right) \left(\frac{|3\rangle + \sigma|4\rangle}{\sqrt{2}} \right), \quad (\text{A.13b})$$

donde $\sigma = \pm$. Los cuatro autovalores resultantes son

$$E_{\pm}^{\sigma} = \frac{1}{2} \left(D - \frac{J_I}{2} - \frac{J_D}{2} \right) \pm \frac{1}{2} \sqrt{\left(D - \frac{J_I}{2} - \frac{J_D}{2} \right)^2 + 2(J_I + \sigma J_D)^2}. \quad (\text{A.14})$$

La energía del estado fundamental corresponde, para intercambios antiferromagnéticos J_{α} , a E_{-}^{+} :

$$E_{\text{gs}}(S_{\text{tot}}^z = 0) = \frac{1}{2} \left(D - \frac{J_I}{2} - \frac{J_D}{2} \right) - \frac{1}{2} \sqrt{\left(D - \frac{J_I}{2} - \frac{J_D}{2} \right)^2 + 2(J_I + J_D)^2} \quad (\text{A.15})$$

Se encuentra numéricamente que el estado fundamental de menor energía es el correspondiente a $S_{\text{tot}}^z = 0$, para cualquier elección de los parámetros D e intercambios antiferromagnéticos J_D, J_I . Puede parecer paradójico que, aún para valores muy negativos de D , se favorezca el autoespacio $S_{\text{tot}}^z = 0$. Para entender esto, debe notarse que D actúa sólo en el espín 1: cuando D es muy negativo al estado fundamental contribuirán esencialmente los estados de espín 1 con proyecciones $M = \pm 1$, siendo despreciable la componente con $M = 0$. Pero, por otro lado, debido a las interacciones de intercambio antiferromagnéticas con los “espines de conducción” se verán favorecidos aquellos estados donde tales espines tengan proyecciones antiparalelas a la del espín 1. Esto lleva a una proyección del espín total igual a cero en el estado fundamental.

Como para el cálculo de la entropía de entrelazamiento se necesitaba el estado fundamental del sistema, en lo que sigue se trabajará con el estado fundamental de $S_{\text{tot}}^z = 0$.

A.1.2. Función de onda del estado fundamental

El estado fundamental una vez normalizado resulta

$$|\text{gs}\rangle = \alpha \left(\frac{|\uparrow, 0, \downarrow\rangle + |\downarrow, 0, \uparrow\rangle}{\sqrt{2}} \right) + \beta \left(\frac{|\uparrow, -1, \uparrow\rangle + |\downarrow, 1, \downarrow\rangle}{\sqrt{2}} \right), \quad (\text{A.16})$$

siendo

$$\alpha = \frac{1}{\sqrt{1 + \left(\xi - \sqrt{1 + \xi^2}\right)^2}}, \quad \beta = \frac{\xi - \sqrt{1 + \xi^2}}{\sqrt{1 + \left(\xi - \sqrt{1 + \xi^2}\right)^2}}, \quad \xi = \frac{D - \frac{J_I}{2} - \frac{J_D}{2}}{\sqrt{2}(J_I + J_D)}. \quad (\text{A.17})$$

Por simplicidad se tomará $J_D = J_I = J$. Resta analizar algunos límites para los valores de D . Si $D = 0$ se tiene el singlete de espín 1:

$$|\text{gs}\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}} \left[\frac{|\uparrow, 0, \downarrow\rangle + |\downarrow, 0, \uparrow\rangle}{\sqrt{2}} - |\uparrow, -1, \uparrow\rangle - |\downarrow, 1, \downarrow\rangle \right], \quad (\text{A.18})$$

Para el caso $D \gg J$, asimismo, resulta

$$|\text{gs}\rangle \propto \left(\frac{|\uparrow, 0, \downarrow\rangle + |\downarrow, 0, \uparrow\rangle}{\sqrt{2}} \right) - \frac{4\sqrt{2}J}{D} \left(\frac{|\uparrow, -1, \uparrow\rangle + |\downarrow, 1, \downarrow\rangle}{\sqrt{2}} \right). \quad (\text{A.19})$$

Como era de esperar, se percibe que contribuyen apreciablemente solo los estados con proyección nula del espín 1. Finalmente, si $D \ll -J$, entonces

$$|\text{gs}\rangle \propto \left(\frac{|\uparrow, 0, \downarrow\rangle + |\downarrow, 0, \uparrow\rangle}{\sqrt{2}} \right) + \frac{D}{\sqrt{2}J} \left(\frac{|\uparrow, -1, \uparrow\rangle + |\downarrow, 1, \downarrow\rangle}{\sqrt{2}} \right). \quad (\text{A.20})$$

En este caso contribuyen al estado fundamental mayormente los estados con proyecciones $M = \pm 1$ del espín 1.

A.1.3. Entropías de entrelazamiento

La entropía de entrelazamiento se calcula entre dos bloques complementarios A y B que forman el sistema mediante la traza de la matriz densidad del sistema, $\hat{\rho} = |\text{gs}\rangle\langle\text{gs}|$, respecto de los grados de libertad de, por ejemplo, el bloque B. De esa forma se obtiene la matriz reducida del bloque A

$$\hat{\rho}_A = \text{Tr}_B(\hat{\rho}). \quad (\text{A.21})$$

Diagonalizando esta matriz y obteniendo sus autovalores λ se obtiene la entropía de entrelazamiento

$$S_e(A) = - \sum_{\lambda} \lambda \ln \lambda. \quad (\text{A.22})$$

A = espín 1

En este primer caso se tomará al bloque A como el espín 1 y al bloque B como el conjunto de los dos “espines de conducción” 1/2. Siguiendo lo mencionado anteriormente, es necesario trazar respecto de los estados de los espines 1/2: $|\uparrow_L \uparrow_D\rangle, |\uparrow_L \downarrow_D\rangle, |\downarrow_L \uparrow_D\rangle, |\downarrow_L \downarrow_D\rangle$. La matriz densidad reducida resultante es

$$\hat{\rho}_{S=1} = \text{Tr}_{\text{cond}} |\text{gs}\rangle\langle\text{gs}| = \frac{\beta^2}{2} (|1\rangle\langle 1| + |-1\rangle\langle -1|) + \alpha^2 |0\rangle\langle 0|. \quad (\text{A.23})$$

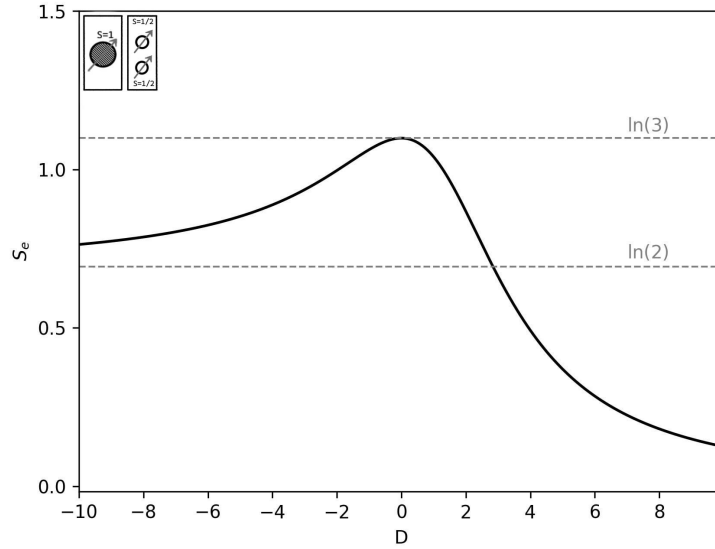


Figura A.1: Entropía de entrelazamiento del modelo de tres espines. Parámetros utilizados: $J_D = J_I = 1$.

Esta matriz, con autovalores $\lambda = \alpha^2, \beta^2/2$, estando este último dos veces degenerado. La entropía de entrelazamiento resulta

$$S_e = -\alpha^2 \ln \alpha^2 - \beta^2 \ln \left(\frac{\beta^2}{2} \right). \quad (\text{A.24})$$

En base a la anisotropía D pueden estudiarse los tres casos límite:

- Si $D = 0$ se obtiene $\alpha = \frac{1}{\sqrt{3}}, \beta = \sqrt{\frac{2}{3}}$, por lo tanto

$$S_e(D = 0) = \ln 3 \simeq 1,098. \quad (\text{A.25})$$

Este resultado se puede entender a partir de la estructura de la función de onda (A.18): en un singlete de espín 1 se “entremezclan” los tres estados de la impureza de espín 1 con los dos espines 1/2: $M = \pm 1, 0$. Esto es la generalización del caso $S_e = \ln 2$ para un singlete usual formado por dos espines 1/2.

- Si $D \gg J$ entonces $\alpha \simeq 1, \beta \simeq \frac{4\sqrt{2}J}{D}$:

$$S_e(D \gg J) \simeq -\frac{64J^2}{D^2} \ln \left(\frac{4J}{D} \right). \quad (\text{A.26})$$

Esta entropía tiende a cero cuando $D \rightarrow \infty$. Este resultado se entiende observando la forma de la función de onda (A.19): cuando $D \gg J$, ésta es esencialmente el estado producto de la componente $M = 0$ del espín 1 y del triplete de proyección nula formado entre los dos espines 1/2. Esto permite interpretar el comportamiento de la entropía de entrelazamiento para sistemas extendidos resueltos con DMRG.

- Si $D \ll -J$, $\alpha \simeq \frac{\sqrt{2}J}{D}, \beta \simeq 1$, por lo tanto

$$S_e(D \ll -J) \simeq \ln 2 - \frac{2J^2}{D^2} \ln \left(\frac{2J^2}{D^2} \right). \quad (\text{A.27})$$

Este valor tiende $\ln 2$ para $D \rightarrow -\infty$. Nuevamente al analizar función de onda correspondiente, ahora (A.20), se encuentra que se forma un estado entrelazado entre las componentes $M = \pm 1$ del espín 1, y los estados $|\downarrow_I \downarrow_D\rangle, |\uparrow_I \uparrow_D\rangle$ de los espines 1/2.

En la Figura A.1 se presenta la entropía de entrelazamiento para $J_D = J_I = 1$ en función de D . Los límites analíticos calculados y discutidos previamente se recuperan en este cálculo numérico. Esta entropía, calculada para sistemas de mayor tamaño, presenta un comportamiento cualitativamente similar a la del modelo de juguete y reproduciendo correctamente los dos límites para $D \rightarrow \pm\infty$. Si se mantiene una interacción de intercambio fija, por ejemplo, $J_I = 1$, variando la otra interacción J_D , la dependencia de S_e con D se ve poco modifico, resultando en que comportamiento cualitativo no se altera. La estructura de entrelazamiento del estado fundamental es entonces robusta frente a la presencia de asimetría en las interacciones de ambos canales con el espín 1.

A = espín izquierdo

Ahora se traza con respecto de los grados de libertad del espín 1 y del espín 1/2 derecho (subsistema B). Esto lleva a la matriz reducida de A

$$\hat{\rho}_{s_I} = \frac{\alpha^2 + \beta^2}{2} (|\uparrow\rangle\langle\uparrow| + |\downarrow\rangle\langle\downarrow|) = \frac{1}{2}. \quad (\text{A.28})$$

La matriz reducida en este caso es proporcional a la identidad para cualquier elección de los parámetros (por supuesto, siempre que los intercambios sean antiferromagnético). La entropía de entrelazamiento resulta simplemente en

$$S_e(A = s_I) = \ln 2. \quad (\text{A.29})$$

La función de onda (A.18) indica que el espín izquierdo (o el derecho) está entrelazado con estados del resto del sistema (espín 1 más espín derecho) de proyección opuesta, naciendo de allí el logaritmo de dos.

A.2. Cuatro espines 1/2

Con el fin de agregar más ingredientes al modelo de juguete se puede reemplazar el espín 1 del modelo anterior por dos espines 1/2 con una interacción de Hund J_H . Cuando esta sea muy grande se espera encontrar los mismos resultados que con el modelo anterior (A.1). Se tienen ahora cuatro espines 1/2: dos espines $\hat{\mathbf{S}}_a, \hat{\mathbf{S}}_b$ corresponden a la “impureza” y dos $\hat{\mathbf{S}}_I, \hat{\mathbf{S}}_D$ a los canales de conducción izquierdo y derecho, respectivamente. El hamiltoniano es

$$\hat{H} = J_I \hat{\mathbf{S}}_I \cdot \hat{\mathbf{S}}_a + J_D \hat{\mathbf{S}}_D \cdot \hat{\mathbf{S}}_b - J_H \hat{\mathbf{S}}_a \cdot \hat{\mathbf{S}}_b + D \left(\hat{S}_a^z + \hat{S}_b^z \right)^2. \quad (\text{A.30})$$

Dado que la proyección total de espín

$$\hat{S}_{\text{tot}}^z = \hat{s}_I^z + \hat{s}_D^z + \hat{S}_a^z + \hat{S}_b^z \quad (\text{A.31})$$

conmuta con el hamiltoniano es posible diagonalizarlo en cada sector con una proyección total de espín bien definida. Mediante un estudio análogo al realizado en el modelo (A.1), se encuentra que el estado fundamental corresponde al subespacio con proyección total nula. Para este subespacio se define la base

$$\begin{aligned} |1\rangle &\equiv |\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow\rangle, & |2\rangle &\equiv |\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\rangle, & |3\rangle &\equiv |\downarrow\downarrow\uparrow\uparrow\rangle \\ |4\rangle &\equiv |\downarrow\downarrow\uparrow\uparrow\rangle, & |5\rangle &\equiv |\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\rangle, & |6\rangle &\equiv |\downarrow\uparrow\uparrow\downarrow\rangle, \end{aligned} \quad (\text{A.32})$$

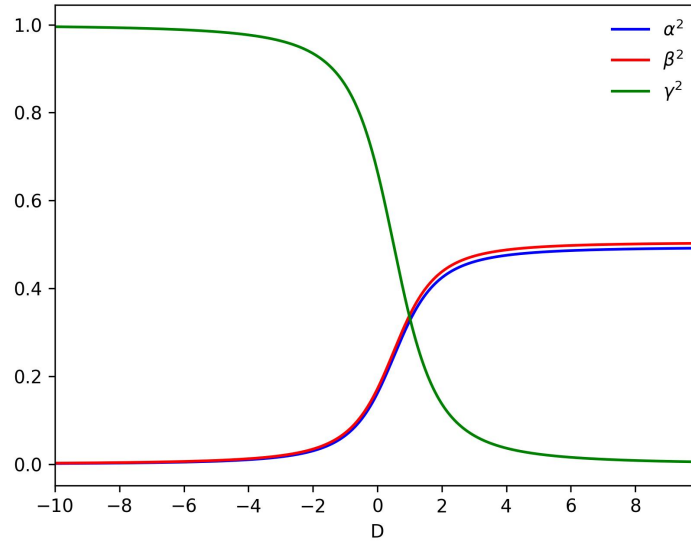


Figura A.2: Coeficientes $\alpha^2, \beta^2, \gamma^2$ (ver ecuación A.35) de la función de onda en función de D . Parámetros: $J = 1, J_H = 100$.

sobre la cual el hamiltoniano (por simplicidad considerándose solamente el caso $J_D = J_I \equiv J$) actúa como

$$\hat{H}|1\rangle = \frac{2J + J_H}{4}|1\rangle - \frac{J_H}{2}|2\rangle, \quad (\text{A.33a})$$

$$\hat{H}|2\rangle = \frac{J_H - 2J}{4}|2\rangle - \frac{J_H}{2}|1\rangle + \frac{J}{2}(|5\rangle + |6\rangle), \quad (\text{A.33b})$$

$$\hat{H}|3\rangle = \frac{J_H - 2J}{4}|3\rangle - \frac{J_H}{2}|4\rangle + \frac{J}{2}(|5\rangle + |6\rangle), \quad (\text{A.33c})$$

$$\hat{H}|4\rangle = \frac{2J + J_H}{4}|4\rangle - \frac{J_H}{2}|3\rangle, \quad (\text{A.33d})$$

$$\hat{H}|5\rangle = \left(D - \frac{2J + J_H}{4}\right)|5\rangle + \frac{J}{2}(|2\rangle + |3\rangle), \quad (\text{A.33e})$$

$$\hat{H}|6\rangle = \left(D - \frac{2J + J_H}{4}\right)|6\rangle + \frac{J}{2}(|2\rangle + |3\rangle). \quad (\text{A.33f})$$

Por simple inspección de estas relaciones se observa que la matriz hamiltoniana tiene una estructura diagonal en bloques de tamaño 3×3 . Numéricamente se encuentra que el estado fundamental está generado por los estados

$$|a\rangle = \frac{|1\rangle + |4\rangle}{\sqrt{2}}, \quad |b\rangle = \frac{|2\rangle + |3\rangle}{\sqrt{2}}, \quad |c\rangle = \frac{|5\rangle + |6\rangle}{\sqrt{2}}, \quad (\text{A.34})$$

es decir,

$$|gs\rangle = \alpha \left(\frac{|\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow\rangle + |\downarrow\downarrow\uparrow\uparrow\rangle}{\sqrt{2}} \right) + \beta \left(\frac{|\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow\rangle}{\sqrt{2}} \right) + \gamma \left(\frac{|\uparrow\downarrow\uparrow\uparrow\rangle + |\downarrow\uparrow\downarrow\downarrow\rangle}{\sqrt{2}} \right) \quad (\text{A.35})$$

En la Figura A.2 se grafica la dependencia de los coeficientes de la función de onda con la anisotropía para $J = 1, J_H = 100$. Se encuentra que para toda anisotropía

$\alpha \simeq \beta$. Para estos cálculos se toma un valor muy alto de la interacción Hund con el fin de que la impureza sea efectivamente un espín $S=1$.

Si $D \ll -J$, $\gamma \simeq 1$, $\alpha \simeq \beta \simeq 0$ y la función de onda consiste mayormente en estados con proyección $S^z = \pm 1$ de los espines “impureza”:

$$|\text{gs}(D \ll -J)\rangle = \frac{|\uparrow\downarrow\downarrow\uparrow\rangle + |\downarrow\uparrow\uparrow\downarrow\rangle}{\sqrt{2}}. \quad (\text{A.36})$$

Si $D \gg J$, entonces $\gamma \simeq 0$, $\alpha \simeq \beta \simeq \frac{1}{\sqrt{2}}$. La proyección $S^z = 0$ de los dos espines de la impureza es muy favorecida, resultando una función de onda

$$|\text{gs}\rangle = \frac{1}{2} (|\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow\rangle + |\downarrow\downarrow\uparrow\uparrow\rangle + |\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow\rangle). \quad (\text{A.37})$$

Con solo mirar esta función de ondas, algo resulta impactante: es el estado producto de dos tripletes de proyección de espín nula, uno formado entre los dos espines de la impureza y el otro entre los espines “de conducción” $\mathbf{s}_I, \mathbf{s}_D$

$$|\text{gs}(D \gg J)\rangle = |1, 0\rangle_{\text{cond}} \otimes |1, 0\rangle_{\text{imp}}. \quad (\text{A.38})$$

Esta observación cumplirá un rol fundamental en el estudio de la entropía de entrelazamiento de este modelo simplificado, y también para el modelo de Anderson en redes más grandes.

A.2.1. Entropía de entrelazamiento

A = espín izquierdo más espín “a” de la impureza

Sea A el bloque conformado por el espín de conducción izquierdo y el espín “a” de la impureza. Trazando en el resto del sistema, se encuentra que la matriz reducida de A es

$$\begin{aligned} \hat{\rho}_A = & \frac{\alpha^2}{2} (|\uparrow\uparrow\rangle\langle\uparrow\uparrow| + |\downarrow\downarrow\rangle\langle\downarrow\downarrow|) + \frac{\beta^2 + \gamma^2}{2} (|\uparrow\downarrow\rangle\langle\uparrow\downarrow| + |\downarrow\uparrow\rangle\langle\downarrow\uparrow|) \\ & + \beta\gamma (|\uparrow\downarrow\rangle\langle\downarrow\uparrow| + |\downarrow\uparrow\rangle\langle\uparrow\downarrow|), \end{aligned} \quad (\text{A.39})$$

donde en los estados $|\sigma\sigma'\rangle$, σ corresponde al espín de la izquierda y σ' al espín “a” de la impureza. Esta matriz densidad se expresa de manera más compacta si se pasa de los estados $|\sigma\sigma'\rangle$ a los tripletes y singletes formados entre ambos espines 1/2

$$|\uparrow\uparrow\rangle = |1, 1\rangle, \quad |\downarrow\downarrow\rangle = |1, -1\rangle, \quad |\uparrow\downarrow\rangle = \frac{|1, 1\rangle + |0, 0\rangle}{\sqrt{2}}, \quad |\downarrow\uparrow\rangle = \frac{|1, 1\rangle - |0, 0\rangle}{\sqrt{2}}. \quad (\text{A.40})$$

En esta base, la matriz diagonal reducida resulta diagonal

$$\begin{aligned} \hat{\rho}_A = & \frac{\alpha^2}{2} (|1, 1\rangle\langle 1, 1| + |1, -1\rangle\langle 1, -1|) + \frac{(\beta + \gamma)^2}{2} |1, 0\rangle\langle 1, 0| \\ & + \frac{(\beta - \gamma)^2}{2} |0, 0\rangle\langle 0, 0|. \end{aligned} \quad (\text{A.41})$$

Finalmente, la entropía de entrelazamiento es

$$S_e = -\alpha^2 \ln \left[\frac{\alpha^2}{2} \right] - \frac{(\beta + \gamma)^2}{2} \ln \left[\frac{(\beta + \gamma)^2}{2} \right] - \frac{(\beta - \gamma)^2}{2} \ln \left[\frac{(\beta - \gamma)^2}{2} \right]. \quad (\text{A.42})$$

Para esta entropía se pueden analizar algunos casos particulares:

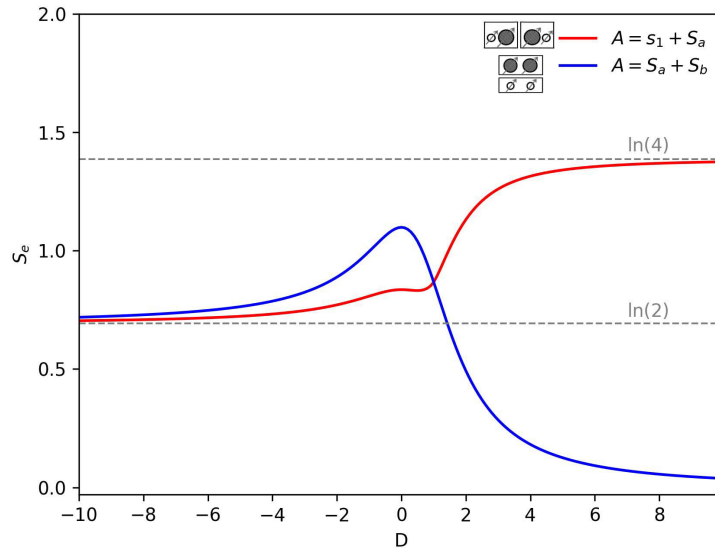


Figura A.3: Entropía de entrelazamiento del modelo de cuatro espines. Curva roja: el bloque A contiene al espín izquierdo y al espín "a" de la impureza. Curva azul: el bloque A contiene a los dos espines de la impureza. Parámetros: $J = 1, J_H = 1000$.

- Si $D \gg J$, $\gamma \simeq 0, \alpha \simeq \beta \simeq 1/\sqrt{2}$. Por lo tanto

$$S_e(D \gg J) = \ln 4. \quad (\text{A.43})$$

En este límite la matriz densidad reducida (A.41) es proporcional a la identidad: los cuatro estados del espacio de Hilbert del bloque A contribuyen de igual manera, de allí $\ln 4$. De manera más física y simple se puede interpretar esto analizando la forma del estado fundamental (A.38): al cortar el sistema por la mitad se están cortando los dos tripletes, contribuyendo cada uno de ellos con $\ln 2$ a la entropía.

- Si $D = 0$, $\alpha \simeq \beta \simeq 1/\sqrt{6}$, $\gamma \simeq \sqrt{2/3}$ ¹ Por lo tanto,

$$S_e(D = 0) \simeq \ln \left(\frac{4}{\sqrt{3}} \right). \quad (\text{A.44})$$

- Si $D \ll -J$ $\gamma \simeq 1, \alpha \simeq \beta \simeq 0$. La matriz densidad reducida (A.39) tiene únicamente contribuciones iguales de los estados $|\uparrow\downarrow\rangle, |\downarrow\uparrow\rangle$. Consecuentemente la entropía es

$$S_e(D \ll -J) = \ln 2. \quad (\text{A.45})$$

Se la función de onda (A.36) se desprende que los estados $|\uparrow\downarrow\rangle, |\downarrow\uparrow\rangle$ de ambos bloques, A y B , están entrelazados.

En la Figura A.3 se grafica la entropía de entrelazamiento en función de D (curva negra continua). Este comportamiento permite entender los resultados obtenidos mediante DMRG para modelos de Anderson.

¹Estos valores son buenas aproximaciones cuando $J_H \gg J$, resultando exactas en el límite $J_H \rightarrow \infty$.

A = espines “a” y “b” de la impureza

Otra partición del sistema puede ser realizada considerando al bloque A como los espines de la impureza y al bloque B como los espines de conducción. Esta partición es la más natural si se busca entender cómo se entrelaza la impureza con los baños de conducción en sistemas extendidos. La matriz densidad reducida es, en término de los estados singlete y triplete del bloque A (es decir, singlete y tripletes de la “impureza”)

$$\hat{\rho}_A = \frac{\gamma^2}{2} (|1, 1\rangle\langle 1, 1| + |1, -1\rangle\langle 1, -1|) + \frac{(\beta + \alpha)^2}{2} |1, 0\rangle\langle 1, 0| + \frac{(\beta - \alpha)^2}{2} |0, 0\rangle\langle 0, 0|. \quad (\text{A.46})$$

Formalmente tiene una expresión semejante a (A.39): se intercambian $\alpha \leftrightarrow \gamma$, sin embargo, los grados de libertad del bloque A son diferentes ya que ahora corresponden a los espines “impureza”.

La entropía de entrelazamiento es

$$S_e = -\gamma^2 \ln \left[\frac{\gamma^2}{2} \right] - \frac{(\beta + \alpha)^2}{2} \ln \left[\frac{(\beta + \alpha)^2}{2} \right] - \frac{(\beta - \alpha)^2}{2} \ln \left[\frac{(\beta - \alpha)^2}{2} \right]. \quad (\text{A.47})$$

Para $J_H \gg J$, $\alpha \simeq \beta$, por lo tanto, $2\alpha^2 = 1 - \gamma^2$ y la entropía se reduce a

$$S_e = -\gamma^2 \ln \left(\frac{\gamma^2}{2} \right) - (1 - \gamma^2) \ln (1 - \gamma^2) \quad (\text{A.48})$$

Repitiendo el análisis para valores límites de D :

- Si $D \gg J$, $\gamma \simeq 0$, consecuentemente

$$S_e(D \gg J) = 0, \quad (\text{A.49})$$

lo cual deriva directamente del hecho de que el estado fundamental (A.38) es un estado producto de un estado “impureza” por un estado “conducción”, no habiendo entonces entrelazamiento entre ambos bloques.

- Si $D = 0$, $\gamma^2 = \frac{2}{3}$ y

$$S_e(D = 0) = \ln 3. \quad (\text{A.50})$$

- Para $D = 0$ y $J_H \gg J$ el estado fundamental del sistema es un singlete de espín 1 entre ambos bloques y su entropía entonces corresponde a $\ln 3$, por las tres componentes que conforman el singlete.

- Para $D \ll -J$, $\gamma \simeq 1$ y

$$S_e(D \ll -J) = \ln 2. \quad (\text{A.51})$$

Este resultado se puede entender de manera completamente análoga a como se hizo en la partición anterior: los estados $|\uparrow\downarrow\rangle, |\downarrow\uparrow\rangle$ de cada bloque están entrelazados.

La curva roja a trazos de la figura A.3 muestra S_e en función de D . Este comportamiento se obtiene también en el modelo de Anderson en redes más grandes al utilizar la geometría escalera.

A = espín izquierdo

Finalmente se analiza el entrelazamiento entre el espín izquierdo y el resto del sistema. En este caso la matriz reducida es proporcional a la identidad:

$$\hat{\rho}_A = \frac{1}{2} (|\uparrow\rangle\langle\uparrow| + |\downarrow\rangle\langle\downarrow|). \quad (\text{A.52})$$

Consecuentemente la entropía de entrelazamiento para todo D es

$$S_e = \ln 2, \quad (\text{A.53})$$

resultado que coincide con el obtenido en el modelo simplificado que se estudió anteriormente.

Bibliografía

- [1] R. A. Jishi, *Feynman Diagram Techniques in Condensed Matter Physics*. Cambridge University Press, 2013.
- [2] W. de Haas, J. de Boer, and G. van den Berg, “The electrical resistance of gold, copper and lead at low temperatures,” *Physica*, vol. 1, no. 7, pp. 1115–1124, 1934.
- [3] T. Child, M. Cross, A. Tully, and M. Werner, *An Introduction to the Kondo Effect*. Notas de PHYS 502 - Condensed Matter Physics I, University of British Columbia, Vancouver, Canadá, 2018.
- [4] J. Kondo, “Resistance Minimum in Dilute Magnetic Alloys,” *Progress of Theoretical Physics*, vol. 32, pp. 37–49, Jul 1964.
- [5] M. P. Sarachik, E. Corenzwit, and L. D. Longinotti, “Resistivity of Mo-Nb and Mo-Re alloys containing 1 % Fe,” *Phys. Rev.*, vol. 135, pp. A1041–A1045, Aug 1964.
- [6] K. G. Wilson, “The renormalization group: Critical phenomena and the Kondo problem,” *Rev. Mod. Phys.*, vol. 47, pp. 773–840, Oct 1975.
- [7] P. Wiegmann, “Exact solution of the s-d exchange model (Kondo problem),” *Journal of Physics C: Solid State Physics*, vol. 14, p. 1463, 1981.
- [8] N. Andrei, “Solution of the Kondo problem,” *North-Holland Mathematics Studies*, vol. 61, pp. 169–177, 1982.
- [9] L. Kouwenhoven and L. Glazman, “Revival of the Kondo effect,” *Physics World*, vol. 14, pp. 33–38, Jan 2001.
- [10] A. C. Hewson, *The Kondo Problem to Heavy Fermions*. Cambridge Studies in Magnetism, Cambridge University Press, 1993.
- [11] P. W. Anderson, “Localized magnetic states in metals,” *Phys. Rev.*, vol. 124, pp. 41–53, Oct 1961.
- [12] F. D. M. Haldane, “Scaling theory of the asymmetric Anderson model,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 40, pp. 416–419, Feb 1978.
- [13] G. Blesio, *Física de Kondo y aproximaciones diagramáticas*. Tesis de Doctorado en Física, Universidad Nacional de Rosario, 2019.
- [14] Ph. Nozières and A. Blandin, “Kondo effect in real metals,” *J. Phys. France*, vol. 41, no. 3, pp. 193–211, 1980.
- [15] A. Einstein, B. Podolsky, and N. Rosen, “Can quantum-mechanical description of physical reality be considered complete?,” *Phys. Rev.*, vol. 47, pp. 777–780, May 1935.

-
- [16] R. C. Caro, R. Franco Peñaloza, and J. Silva Valencia, “Calculation of concurrence to the Heisenberg model,” *Revista Brasileira de Ensino de Física*, vol. 32, pp. 1–7, Set 2010.
- [17] L.-A. Wu, M. S. Sarandy, and D. A. Lidar, “Quantum phase transitions and bipartite entanglement,” *Physical Review Letters*, vol. 93, p. 250404, Dec 2004.
- [18] C. Cohen-Tannoudji, B. Claude Cohen-Tannoudji, P. Davies, B. Dui, D. Betts, B. Diu, F. Laloe, S. Hemley, N. Ostrowsky, D. Ostrowsky, *et al.*, *Quantum Mechanics, Volume 1*. A Wiley-Interscience publication, Wiley, 1977.
- [19] V. Benedetti, *Entropía de entrelazamiento de gravitones linealizados*. Tesina de Licenciatura en Física, Universidad Nacional de Rosario, 2019.
- [20] S. Y. Cho and R. H. McKenzie, “Quantum entanglement in the two-impurity Kondo model,” *Phys. Rev. A*, vol. 73, p. 012109, Jan 2006.
- [21] S. Chakravarty, “Scaling of von Neumann entropy at the Anderson transition,” *International Journal of Modern Physics B*, vol. 24, p. 1823–1840, May 2010.
- [22] Z. Xuan and T. Pei-Qing, “Quantum phase transition and von Neumann entropy of quasiperiodic Hubbard chains,” *Chinese Physics B*, vol. 17, pp. 1623–1628, May 2008.
- [23] M.-H. Chung and D. P. Landau, “Von Neumann entropy and bipartite number fluctuation in quantum phase transitions,” *Phys. Rev. B*, vol. 83, p. 113104, Mar 2011.
- [24] M.-F. Yang, “Reexamination of entanglement and the quantum phase transition,” *Phys. Rev. A*, vol. 71, p. 030302, Mar 2005.
- [25] F. Cerisola, *Notas de clase de la cátedra de Física Teórica 2*. Facultad de Ciencias Exactas y Naturales, Universidad de Buenos Aires, 2020.
- [26] G. G. Blesio, L. O. Manuel, A. A. Aligia, and P. Roura-Bas, “Fully compensated Kondo effect for a two-channel spin $S=1$ impurity,” *Physical Review B*, vol. 100, p. 075434, Aug 2019.
- [27] S. Di Napoli, M. A. Barral, P. Roura-Bas, L. O. Manuel, A. M. Llois, and A. A. Aligia, “Kondo physics in a Ni impurity embedded in O-doped Au chains,” *Phys. Rev. B*, vol. 92, p. 085120, Aug 2015.
- [28] G. G. Blesio, L. O. Manuel, P. Roura-Bas, and A. A. Aligia, “Topological quantum phase transition between Fermi liquid phases in an Anderson impurity model,” *Physical Review B*, vol. 98, p. 075434, Nov 2018.
- [29] R. Žitko, G. G. Blesio, L. O. Manuel, and A. A. Aligia, “Iron phthalocyanine on Au(111) is a “non-Landau” Fermi liquid,” *Nature Communications*, vol. 12, p. 6027, Oct 2021.
- [30] M. Ormaza, P. Abufager, B. Verlhac, N. Bachellier, M.-L. Bocquet, N. Lorente, and L. Limot, “Controlled spin switching in a metallocene molecular junction,” *Nature Communications*, vol. 8, p. 1974, Dec 2017.
- [31] M. Mohr, M. Gruber, A. Weismann, D. Jacob, P. Abufager, N. Lorente, and R. Berndt, “Spin dependent transmission of nickelocene-Cu contacts probed with shot noise,” *Phys. Rev. B*, vol. 101, p. 075414, Feb 2020.

-
- [32] N. Alvarez, *Entrelazamiento cuántico en sistemas de electrones altamente correlacionados*. Tesis de Maestría, Instituto Balseiro, Universidad Nacional de Cuyo, 2020.
- [33] N. Aucar, *Fases topológicas en sistemas cuasi-unidimensionales de espín-1/2*. Tesina de Licenciatura en Física, Universidad Nacional de Rosario, 2018.
- [34] F. Lisandrini, *Frustración Cinética y Antiferromagnetismo*. Tesina de Licenciatura en Física, Universidad Nacional de Rosario, 2015.
- [35] B. Bravo, *Efecto Kondo en el modelo de una impureza de Anderson: Estudio mediante un método combinado*. Tesina de Licenciatura en Física, Universidad Nacional de Rosario, 2010.
- [36] L. Chinellato, *Modos cero de Majorana y Fases Topológicas en Nanocables Superconductores*. Tesina de Licenciatura en Física, Universidad Nacional de Rosario, 2022.
- [37] S. R. White, “Density matrix formulation for quantum renormalization groups,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 69, pp. 2863–2866, Nov 1992.
- [38] D. J. Griffiths and D. F. Schroeter, *Introduction to Quantum Mechanics*. Cambridge University Press, 3 ed., 2018.
- [39] C. Eckart and G. M. Young, “The approximation of one matrix by another of lower rank,” *Psychometrika*, vol. 1, pp. 211–218, 1936.
- [40] R. Verresen, “Examples of matrix product states.” Physics Stack Exchange. URL:<https://physics.stackexchange.com/q/266597> (version: 2016-07-06).
- [41] M. Fishman, S. R. White, and E. M. Stoudenmire, “The ITensor software library for tensor network calculations,” *arXiv*, no. 2007.14822, 2020.
- [42] J. Bezanson, S. Karpinski, V. B. Shah, and A. Edelman, “Julia: A fast dynamic language for technical computing,” *arXiv*, no. 1209.5145, 2012.
- [43] E. S. Sørensen and I. Affleck, “Scaling theory of the Kondo screening cloud,” *Phys. Rev. B*, vol. 53, pp. 9153–9167, Apr 1996.
- [44] I. Affleck, *The Kondo Screening Cloud: What It Is and How to Observe It*, pp. 1–44. World Scientific, 2010.
- [45] J. Park, S.-S. B. Lee, Y. Oreg, and H.-S. Sim, “How to directly measure a Kondo cloud’s length,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 110, p. 246603, Jun 2013.
- [46] G. Yoo, S.-S. B. Lee, and H.-S. Sim, “Detecting Kondo entanglement by electron conductance,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 120, p. 146801, Apr 2018.
- [47] C. A. Büsser, G. B. Martins, L. Costa Ribeiro, E. Vernek, E. V. Anda, and E. Dagotto, “Numerical analysis of the spatial range of the Kondo effect,” *Phys. Rev. B*, vol. 81, p. 045111, Jan 2010.
- [48] L. C. Ribeiro, G. B. Martins, G. Gómez-Silva, and E. V. Anda, “Numerical study of the Kondo cloud using finite-U slave bosons,” *Phys. Rev. B*, vol. 99, p. 085139, Feb 2019.
- [49] T. Hand, J. Kroha, and H. Monien, “Spin correlations and finite-size effects in the one-dimensional Kondo box,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 97, p. 136604, Sep 2006.

-
- [50] A. Holzner, I. P. McCulloch, U. Schollwöck, J. von Delft, and F. Heidrich-Meisner, “Kondo screening cloud in the single-impurity anderson model: A density matrix renormalization group study,” *Physical Review B*, vol. 80, p. 205114, Nov 2009.
- [51] C. Yang and A. E. Feiguin, “Unveiling the internal entanglement structure of the Kondo singlet,” *Phys. Rev. B*, vol. 95, p. 115106, Mar 2017.
- [52] P. Coleman, “Local moment physics in heavy electron systems,” *AIP Conference Proceedings*, vol. 629, no. 1, pp. 79–160, 2002.
- [53] I. Borzenets, J. Shim, J. Chen, A. Ludwig, A. Wieck, S. Tarucha, H.-S. Sim, and M. Yamamoto, “Observation of the Kondo screening cloud,” *Nature*, vol. 579, pp. 210–213, Mar 2020.
- [54] S. Costamagna, C. J. Gazza, M. E. Torio, and J. A. Riera, “Anderson impurity in the one-dimensional Hubbard model for finite-size systems,” *Physical Review B*, vol. 74, p. 195103, Nov 2006.
- [55] T. Hand, *Finite-Size Effects In a One-Dimensional Kondo-Box*. Tesis de Doctorado, Universität Bonn, 2006.
- [56] P. S. Cornaglia, P. R. Bas, A. A. Aligia, and C. A. Balseiro, “Quantum transport through a stretched spin-1 molecule,” *EPL (Europhysics Letters)*, vol. 93, p. 47005, Feb 2011.