

TÉSIS DE LA CARRERA DE MAESTRÍA EN CIENCIAS
FÍSICAS

ENTRELAZAMIENTO CUÁNTICO EN SISTEMAS DE
ELECTRONES ALTAMENTE CORRELACIONADOS

Nayra Adriana Álvarez Pari
Maestrando

Dr. Pablo S. Cornaglia
Director

Miembros del Jurado

Dr. Gonzalo Torroba (Instituto Balseiro)

Dr. Armando Aligia (Instituto Balseiro)

Dr. Pablo Roura-Bas (Instituto Balseiro)

Diciembre de 2019

Materia Condensada – Centro Atómico Bariloche

Instituto Balseiro
Universidad Nacional de Cuyo
Comisión Nacional de Energía Atómica
Argentina

A mi familia

Índice de contenidos

Índice de contenidos	v
Resumen	vii
1. Introducción	1
1.1. Entrelazamiento Cuántico	2
1.1.1. Estados Entrelazados	2
1.2. Medidas de Entrelazamiento	4
1.2.1. Entropía de entrelazamiento	4
1.3. Efecto Kondo	5
1.3.1. Modelo de Anderson	5
1.3.2. Modelo de Kondo	7
2. Entrelazamiento en los modelos de impureza cuántica de Anderson y Kondo	9
2.1. Aproximación de banda angosta para el modelo de una sola impureza de Anderson (SIAM):	9
2.1.1. Caso Simétrico	10
2.1.2. Caso no-simétrico	15
2.2. Función de onda variacional de Varma-Yafet:	22
2.2.1. Modelo de Kondo	27
2.3. Expansión variacional de N-grande para sistemas de impurezas magnéticas diluidas en un metal.	28
2.3.1. Entropía de entrelazamiento de la función variacional del estado fundamental $ \Psi_{GS}^{(1)}\rangle$	30
2.3.2. Función variacional del estado fundamental a orden $O(1/N)$	32
2.3.3. Entropía de entrelazamiento de la función variacional del estado fundamental $ \Psi_{GS}^{(1/N)}\rangle$	33
2.4. Entrelazamiento en el modelo de Kondo a partir de teoría de perturbaciones para J grande	35

3. Cálculos numéricos de DMRG para los modelos de la impureza de Anderson y Kondo	39
3.1. Grupo de renormalización de la matriz densidad DMRG	39
3.2. Cálculos de DMRG para el modelo de Anderson con U finito	42
3.2.1. Análisis de error asociado a la entropía obtenida mediante el cálculo de DMRG	46
3.2.2. Cálculos de DMRG para determinar la universalidad de la Entropía en función de la renormalización de la masa de las cuasipartículas en el problema de Kondo	49
3.3. Cálculos de DMRG para el modelo de Kondo	51
4. Conclusiones	57
A. Representación de cadena lineal	59
Bibliografía	61
Publicaciones	63
Agradecimientos	65

Resumen

El entrelazamiento es uno de los fenómenos más intrigantes de la mecánica cuántica y un recurso fundamental para protocolos en información cuántica. Además, es una herramienta poderosa que, mediante el análisis de sistemas de muchos cuerpos interactuantes, nos permite detectar sus transiciones de fases cuánticas, fases topológicas y entender algunas de las muchas propiedades físicas sobresalientes que presentan. Nuestro objeto de estudio en esta tesis es caracterizar el entrelazamiento cuántico debido a las interacciones en sistemas de muchos cuerpos. En particular, nos centramos en el estado fundamental de sistemas que presentan efecto Kondo.

El efecto Kondo es un concepto clave en materia condensada, permite entender el comportamiento de sistemas metálicos con fuertes correlaciones. Dicho efecto consiste en el apantallamiento del momento magnético de impurezas magnéticas en un metal, debido a la interacción con el baño de conducción. Utilizamos modelos simples para describir la física de estos sistemas como el SIAM (Modelo de Anderson para una sola impureza) y el de Kondo.

Medimos el entrelazamiento cuántico vía la entropía de von Neumann para un sistema bipartito de proyecciones de espín opuestas de los electrones. Primero se determinaron expresiones analíticas aproximadas para la entropía en función de las interacciones para cada modelo. Para SIAM se consideró la aproximación a orden cero con simetría electrón-hueco, luego trabajamos con funciones de onda variacionales con una degeneración en el momento angular igual a 2 (Varma-Yafet) y con degeneración N considerando la aproximación perturbativa en la expansión $1/N$. Para el modelo de Kondo se aplicó la teoría de perturbaciones para J grande.

Mediante el método del Grupo de Renormalización de Matriz Densidad (DMRG) se determinó la entropía de entrelazamiento en la partición de espín del estado fundamental. Se encontró numéricamente la presencia de asimetría par -impar en el número de electrones, en el caso par se observa como estado fundamental un singlete fuertemente correlacionado, mientras que en el caso impar no se observa la formación del singlete a

menos que $L \rightarrow \infty$. Además, se encontró que la entropía de entrelazamiento para cada modelo estudiado supera el máximo valor registrado $S_{\uparrow} = 1$ a base de los resultados analíticos aproximados a orden $O(1)$ y con una corrección a orden $O(1/N)$ en el SIAM.

Por último, usando herramientas tanto numéricas y analíticas, encontramos que el entrelazamiento cuántico entre proyecciones de espín de los electrones es una función universal monótona de la renormalización de la masa de las cuasipartículas Z . Esto podría utilizarse para obtener experimentalmente el entrelazamiento de espín y provee una nueva interpretación para Z .

Abstract

Entanglement is one of the most intriguing phenomena in quantum mechanics and a fundamental resource for protocols in quantum information. It is also a powerful tool that, by analyzing interacting many-body systems, allows us to detect their quantum phase transitions, topological phases and to understand some of the many outstanding physical properties they exhibit. Our aim of study in this thesis is to characterize quantum entanglement due to interactions in many-body systems. In particular, we focus on the ground state of systems manifesting the Kondo effect.

The Kondo effect is a key concept in condensed matter, it allows us to understand the behavior of metallic systems with strong correlations. This effect consists in the screening of the local magnetic moment at the impurity by the conduction electrons. We use simple models to describe the physics of these systems such as SIAM (Single Impurity Anderson Model) and the Kondo model.

We measure the quantum entanglement using the von Neumann entropy for a bipartite system of opposite spin projections of electrons. First, approximate analytical expressions for the entropy as a function of the interactions were determined for each model. For SIAM we considered the zero-order approximation with electron-hole symmetry, then we worked with variational wave functions with a degeneracy in angular momentum equal to 2 (Varma-Yafet) and with N degeneracy considering a perturbation theory in $1/N$. For the Kondo model, the perturbation theory was applied for large J .

Using the Density Matrix Renormalization Group (DMRG) method, the entanglement entropy between opposite spin projection electrons in the ground state was determined. The presence of odd-even asymmetry in the number of electrons was found numerically, in the even case a strongly correlated singlet is observed as the ground state, while in the odd case no singlet formation is observed unless $L \rightarrow \infty$. In addition, it was found that the entanglement entropy for each model studied exceeds the maximum recorded value of $S_{\uparrow} = 1$ based on the approximate analytical results at order $O(1)$ and with a correction to order $O(1/N)$ in SIAM.

Finally, using both numerical and analytical tools, we find that the quantum entanglement between opposite spin projections is a monotonic universal function of the quasiparticle mass enhancement Z in the Kondo regime. This could be used to obtain experimentally the spin entanglement and provides a new interpretation for Z .

Capítulo 1

Introducción

“A great deal of my work is just playing with equations and seeing what they give”

— Paul Dirac

Los sistemas de electrones fuertemente correlacionados han sido de gran interés durante las últimas décadas [1]. La fuerte interacción entre los electrones en estos sistemas es responsable de la presencia de propiedades físicas sobresalientes y fenómenos importantes, como la superconductividad a “altas temperaturas”, aisladores de Mott, sistemas de fermiones pesados y transiciones de fase cuánticas, entre otros. El problema Kondo es un caso paradigmático de comportamiento cuántico de muchos cuerpos con correlaciones fuertes y ha sido intensamente estudiado a lo largo de los años [2]. Aparece tanto en la física de impurezas magnéticas diluidas en un metal como en el transporte cuántico a través de nanoestructuras. También es la base de la teoría de campo medio dinámico que permite el tratamiento de materiales fuertemente correlacionados superando dificultades que presentan los métodos basados en la teoría de funcional densidad (DFT).

En el problema de Kondo, una impureza magnética de espín- $\frac{1}{2}$ se acopla antiferromagnéticamente a los electrones no interactuantes de un mar de Fermi. Los modelos que se emplean para comprender de manera más simple los aspectos fundamentales de la física de este tipo de sistemas son el de Anderson (descripción de una sola impureza magnética que se hibridiza con un baño de electrones de conducción no interactuantes) y el de Kondo (descripción mediante la interacción de intercambio espín-espín entre la impureza y el baño).

En estos sistemas cuánticos, las interacciones entre los electrones dan origen a correlaciones entre los subsistemas del espacio de Hilbert correspondiente. Estas correlaciones

se pueden utilizar para caracterizar al sistema y detectar transiciones de fase cuánticas (a temperatura cero) cuando se modifica uno de los parámetros del hamiltoniano. Entre estas correlaciones, el entrelazamiento cuántico, en particular, es un recurso para criptografía, comunicación y se cree que es la base para un mayor poder de las computadoras cuánticas respecto a las clásicas.

Según la mecánica cuántica, un estado puro de un sistema se puede describir a partir de un elemento de su espacio de Hilbert. Para un sistema bipartito, el espacio de Hilbert asociado se puede escribir como el producto tensorial $\mathcal{H} = \mathcal{H}_a \otimes \mathcal{H}_b$ de los espacios correspondientes a cada uno de los subsistemas. Dado un elemento del espacio $|\Psi\rangle \in \mathcal{H}$ se puede expresar como $|\Psi\rangle = |\Psi_a\rangle \otimes |\Psi_b\rangle$ a excepción del caso en el que haya *entrelazamiento* entre los estados de a y b .

La entropía de entrelazamiento de von Neumann permite cuantificar el entrelazamiento en sistemas bipartitos y la utilizaremos para analizar estas correlaciones en el estado fundamental de los modelos antes mencionados.

En este primer capítulo se introducen conceptos fundamentales del entrelazamiento cuántico que serán útiles para una comprensión del trabajo y los modelos utilizados en la descripción del problema de Kondo.

1.1. Entrelazamiento Cuántico

El entrelazamiento es un fenómeno cuántico en el cual los estados individuales de dos o más partículas no pueden describirse de manera independiente y es necesario una descripción del sistema como un todo, incluso cuando las partículas están separadas espacialmente una distancia muy grande. Además, el entrelazamiento está asociado a correlaciones que no tienen análogo clásico [3].

1.1.1. Estados Entrelazados

Un sistema cuántico compuesto puede descomponerse en dos o más subsistemas. El espacio de Hilbert \mathcal{H} asociado al mismo está dado por el producto tensorial $\mathcal{H}_1 \otimes \dots \otimes \mathcal{H}_n$ de los espacios correspondientes a cada uno de los subsistemas.

A continuación, consideramos sistemas cuánticos bipartitos, i.e., sistemas compuestos de dos subsistemas diferentes (A y B), descritos por el espacio de Hilbert $\mathcal{H} = \mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B$.

Definición 1: (Entrelazamiento en estados puros): Sea $|\Psi_c\rangle \in \mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B$. Entonces: $|\Psi_c\rangle$ está *entrelazado* $\iff \nexists |\Psi_A\rangle \in \mathcal{H}_A, |\Psi_B\rangle \in \mathcal{H}_B$ tal que $|\Psi_c\rangle = |\Psi_A\rangle \otimes |\Psi_B\rangle$.

Si se considera, por ejemplo, un sistema de dos partículas con espines $\frac{1}{2}$. La primera partícula tiene dos estados posibles $|\uparrow\rangle_1$ y $|\downarrow\rangle_1$ y de manera similar la segunda con $|\uparrow\rangle_2$ y $|\downarrow\rangle_2$. Sea el siguiente estado,

$$|\Psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} |\uparrow\rangle_1 |\downarrow\rangle_2 - \frac{1}{\sqrt{2}} |\downarrow\rangle_1 |\uparrow\rangle_2$$

Se observa una superposición de productos de estados y que no es posible representar como un producto de un estado para la partícula 1 y uno para la partícula 2, resultando en un estado entrelazado. Por tanto, si medimos el observable de espín en la proyección \hat{z} en la partícula 1 y resulta el autovalor correspondiente a espín- \uparrow , entonces sabemos que la otra partícula tiene espín- \downarrow . La medición de una partícula colapsa a la medición de ambas (independientemente de su separación espacial). Sin embargo, para que haya entrelazamiento no es suficiente que la función de onda $|\Psi\rangle$ sea una superposición de productos de estados. Sea, por ejemplo,

$$|\Psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{4}} (|\uparrow\rangle_1 |\uparrow\rangle_2 + |\uparrow\rangle_1 |\downarrow\rangle_2 + |\downarrow\rangle_1 |\uparrow\rangle_2 + |\downarrow\rangle_1 |\downarrow\rangle_2),$$

puede verse que

$$|\Psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\rangle_1 + |\downarrow\rangle_1) \otimes \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\rangle_2 + |\downarrow\rangle_2).$$

Es una superposición de productos de estados pero puede escribirse como un solo producto de estados, por tanto no está entrelazado. De manera que es útil encontrar una forma más directa para detectar el entrelazamiento. Esto se logra obteniendo el operador densidad asociado al estado y evaluando la traza sobre uno de los subsistemas para obtener la matriz reducida del otro.

Definición 2. (Matriz de densidad reducida) Sea el espacio de Hilbert $\mathcal{H} = \mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B$ con la matriz de densidad ρ . La matriz de densidad reducida del subespacio A se obtiene evaluando la traza sobre los estados B

$$\rho_A = Tr_B \rho. \quad (1.1)$$

Por lo tanto, la condición $Tr(\rho_A^2) = 1$ es un sello de un estado no-entrelazado. Si encontramos $Tr(\rho_A^2) \neq 1$ entonces el estado está entrelazado. A continuación se introduce una medida de cuantificar este entrelazamiento.

1.2. Medidas de Entrelazamiento

El entrelazamiento es y ha sido un fenómeno cuántico de gran interés. Este hace posible la teleportación y el posible incremento en la velocidad de algoritmos cuánticos, entre otros [4]. Los sistemas entrelazados, son en gran medida un recurso para la comunicación cuántica y el procesamiento de información [5]. Como tal, es relevante cuantificar la cantidad de entrelazamiento asociado a cualquier estado. Por tal motivo existen numerosas propuestas de medidas de entrelazamiento [6], de las cuales haremos uso de la entropía de entrelazamiento de *von Neumann*.

1.2.1. Entropía de entrelazamiento

Es la generalización para sistemas cuánticos de la entropía de Shannon. Es una medida de entrelazamiento que permite describir cuantitativamente las correlaciones cuánticas sin análogo clásico.

Definición 3. Dado un sistema cuántico descrito por una matriz de densidad ρ . Entonces la entropía de *Von Neumann* se define como:

$$S(\rho) = -Tr(\rho \log_2 \rho) \quad (1.2)$$

Si λ_i son los autovalores de ρ entonces se puede reescribir la entropía como:

$$S(\rho) = - \sum_i \lambda_i \log_2 \lambda_i \quad (1.3)$$

La entropía de von Neumann adquiere el mínimo valor de cero si y solo si uno de los autovalores es la unidad, por lo tanto los otros son cero. El sistema en este caso será un estado puro. Adquiere el máximo valor de $\log_2 d$, donde d es la dimensión del espacio de estados, solo si todos los autovalores toman el valor de $\frac{1}{d}$.

Definición 4. Sea $|\Psi_c\rangle \in \mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B$ un estado puro, $dim(\mathcal{H}_A) \leq dim(\mathcal{H}_B)$. Entonces $|\Psi_c\rangle$ está **máximamente entrelazado** $\iff \rho_A = \frac{1}{dim(\mathcal{H}_A)}$.

Definición 5. Propiedades generales de la entropía de von Neumann como medida de entrelazamiento de estados puros:

Sea $\rho = |\Psi\rangle \langle \Psi|$ la matriz de densidad del estado puro $|\Psi\rangle$ en $\mathcal{H} = \mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B$, $dim(\mathcal{H}_A) \geq dim(\mathcal{H}_B)$. Entonces:

1. $S(\rho_A) = 0 \iff |\Psi\rangle$ es separable
2. $S(\rho_A) > 0 \iff |\Psi\rangle$ está entrelazado.

3. $\dim(\mathcal{H}) = d$ y $S(\rho) = \log_2(d) \Rightarrow \rho = \frac{1}{d}$, ρ pertenece a un estado máximamente entrelazado.

4. ρ en $\mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B$ pertenece a un estado puro $\Rightarrow S(\rho_A) = S(\rho_B)$.

1.3. Efecto Kondo

El efecto Kondo descubierto en 1930 es un fenómeno bien conocido y ampliamente estudiado en la física de la materia condensada. Se manifiesta mediante comportamientos anómalos en las propiedades de transporte de metales a bajas temperaturas, por ejemplo, en la resistividad y en la potencia termoeléctrica. Estos comportamientos se deben a la presencia de impurezas magnéticas que interactúan con el mar de electrones de conducción del metal.

Una de las manifestaciones del efecto de las impurezas magnéticas, es la presencia de un mínimo en la resistencia de algunos metales. En muchos metales, la resistencia decrece monótonamente al disminuir la temperatura porque el scattering de fonones decrece rápidamente a bajas temperaturas. Para explicar el mínimo en la resistividad, Kondo se basó en un modelo simple que fija un momento magnético local en el sitio de la impureza y este se acopla vía interacción de intercambio J con los electrones de conducción. Usando la teoría de perturbaciones a tercer orden en el acoplamiento J , encontró una contribución del tipo $\ln T$ en la resistividad. Este término incrementa a bajas temperaturas para un acoplamiento antiferromagnético y al incluirse junto a la contribución de fonones se puede describir el mínimo. Sin embargo, $\ln T$ diverge para $T \rightarrow 0$, por tanto, los cálculos perturbativos de Kondo no serían válidos a bajas temperaturas, conocido como el “Problema de Kondo”.

Dos sistemas fuertemente correlacionados permitieron encontrar soluciones exactas a este problema, el modelo de Kondo y el modelo de una sola impureza de Anderson. Son básicos arquetipos de modelos que describen las impurezas magnéticas en un metal.

1.3.1. Modelo de Anderson

La presencia de impurezas magnéticas en un baño de electrones libres, puede generar un potencial lo suficientemente atractivo como para inducir estados virtuales ligados resonantes, es decir, un electrón de conducción en un estado localizado en la vecindad de la impureza debido al scattering resonante en el sitio de la impureza, por tanto, tendrá una función de onda que decae exponencialmente con la distancia a la impureza. La resonancia en este caso, se puede calcular usando funciones atómicas (orbitales tipo f) para una impureza aislada y considerar como se modifican con la presencia de los electrones de conducción. Habrá un término de hibridación V_k entre el orbital de la

impureza y los estados de Bloch de los electrones de conducción. Los estados en una impureza se parecen a los estados tipo d o f , porque al tener un momento angular grande, el potencial efectivo debido al momento angular tiene el efecto de localizar dichos estados.

El hamiltoniano de Anderson considera un único nivel en la impureza con repulsión coulombiana $U > 0$ y para el metal se supone un baño de electrones de conducción no interactuantes:

$$\hat{\mathcal{H}} = \sum_{k,\sigma} \epsilon_{k\sigma} c_{k\sigma}^\dagger c_{k\sigma} + \sum_{k,\sigma} V_{kf} (c_{k\sigma}^\dagger c_{f\sigma} + h.c.) + U n_{f\uparrow} n_{f\downarrow} + \sum_{\sigma} \epsilon_{f\sigma} c_{f\sigma}^\dagger c_{f\sigma}. \quad (1.4)$$

Donde, denotamos el estado localizado como el nivel f , $\epsilon_{f\sigma}$ ($\epsilon_{k\sigma}$) es la energía del estado localizado (baño de conducción), el cual, en ausencia de campo magnético se denota ϵ_f (ϵ_k). Los operadores $c_{k\sigma}^\dagger$ y $c_{k\sigma}$ crean y destruyen un electrón en la banda de conducción con vector de onda k y proyección de espín σ y $c_{f\sigma}^\dagger$ y $c_{f\sigma}$ lo hacen en el nivel de la impureza.

El parámetro $\sigma = \uparrow, \downarrow$ indica la proyección de espín del electrón a lo largo del eje $\hat{\mathbf{z}}$, $n_{k\sigma} = c_{k\sigma}^\dagger c_{k\sigma}$ es el operador de número de electrones en la banda de conducción, V_{kf} el término de hibridización y el parámetro U representa el costo energético de una doble ocupación en el estado localizado.

La relación entre los parámetros ϵ_f , U y V_k determinan la física del modelo, permitiendo clasificarlo en 3 regímenes según los valores de los parámetros:

- $V_k = 0$: Se presenta un desacople entre el gas de electrones y la impureza, aparece un momento magnético local cuando, $\epsilon_f < \epsilon_F$ (ϵ_F nivel de Fermi) con $-\epsilon_f < U$ y $2\epsilon_f + U > \epsilon_F$ para penalizar la doble ocupación que no resulta en un momento magnético. Esto no afecta a las propiedades de transporte del metal.
- $U=0$: Caso no interactuante, la susceptibilidad se comporta como Pauli y para $\epsilon_f \ll \epsilon_F$ aparecen resonancias de Fano.
- $V_k \neq 0$ y $U > 0$: Para $\epsilon_f < \epsilon_F$ se tiene la presencia de dos procesos importantes, la aparición de un momento magnético local debido a los valores altos que suele tener la repulsión coulombiana, favoreciendo la simple ocupación del nivel de la impureza y por ende estados magnéticos. El segundo proceso es el apantallamiento de este momento magnético debido a la hibridización con los electrones de conducción. La temperatura a la que aparece este apantallamiento es la temperatura de Kondo, T_K , la escala de energía característica del problema. Además, a bajas temperaturas estos procesos combinados modifican el espectro de energía

y aparece una resonancia en el nivel de Fermi que modifica las propiedades de transporte (resonancia de Kondo).

1.3.2. Modelo de Kondo

El modelo de Kondo fue introducido por J. Kondo [7] a fin de explicar el mínimo en la resistividad que presentaban metales con impurezas magnéticas diluidas. Este modelo describe la interacción de un momento magnético local y los electrones de conducción de un metal con una dispersión ϵ_k mediante la interacción de intercambio espín-espín. Este modelo representa muy bien el sector de baja energía del sistema.

A partir del modelo de Anderson, en el régimen de parámetros que permiten la presencia de un momento magnético local (para $V_{kf} \ll U$, $V_{kf} \ll -\epsilon_f$ y $\epsilon_f < \epsilon_F$ y $-\epsilon_f < U$) se puede realizar una transformación canónica para simplificar el hamiltoniano. Además, despreciamos las fluctuaciones de carga considerando el subespacio de baja energía, el cual, posee un solo espín \uparrow o \downarrow en la impureza. Esta transformación da lugar al hamiltoniano de Kondo [8]

$$\hat{\mathcal{H}} = \sum_{k,\sigma} \epsilon_k c_{k\sigma}^\dagger c_{k\sigma} + J \hat{S} \cdot \hat{s}_o, \quad (1.5)$$

donde \hat{S} es el espín localizado asociado a la impureza, \hat{s}_o es la densidad de espín en el sitio de la impureza de los electrones de la banda de conducción y J representa al acoplamiento espín-espín entre el espín de la impureza y del baño de conducción. J está dado por la expresión

$$J = 2V^2 \frac{U}{\epsilon_f(\epsilon_f + U)} > 0, \quad (1.6)$$

siendo un acoplamiento antiferromagnético.

Capítulo 2

Entrelazamiento en los modelos de impureza cuántica de Anderson y Kondo

“What we observe is not nature itself, but nature exposed to our method of questioning.”

— Werner Heisenberg

En este capítulo, se obtienen analíticamente expresiones para la entropía de entrelazamiento, utilizando aproximaciones para el estado fundamental de los modelos de impureza de Anderson y Kondo. Se considera, por un lado, el llamado límite de banda angosta [9] y por otro una función de onda variacional de Varma-Yafet [10] para el caso de degeneración $N = 2$ en el momento angular iónico. Asimismo, se obtuvo el estado fundamental con el método de expansión variacional de N grande.

2.1. Aproximación de banda angosta para el modelo de una sola impureza de Anderson (SIAM):

Esta aproximación, también conocida como “límite molecular”, reemplaza el continuo de la banda de conducción por un único nivel “o” en el nivel de Fermi con energía $\epsilon_F = 0$. Esto es equivalente a tomar $\epsilon_k \rightarrow 0$ en el hamiltoniano (1.4) y el nivel de la banda de conducción que se acopla a la impureza corresponde a

$$c_{o\sigma} = \frac{1}{V} \sum_k V_{kf} c_{k\sigma}. \quad (2.1)$$

10 Entrelazamiento en los modelos de impureza cuántica de Anderson y Kondo

El hamiltoniano en la aproximación de banda angosta se puede escribir como

$$\hat{\mathcal{H}}_0 = \sum_{\sigma} V(c_{o\sigma}^{\dagger}c_{f\sigma} + h.c.) + Un_{f\uparrow}n_{f\downarrow} + \epsilon_f \sum_{\sigma} c_{f\sigma}^{\dagger}c_{f\sigma}, \quad (2.2)$$

donde no se consideran los estados de la banda que no se hibridizan con la impureza. A continuación, obtenemos el estado fundamental considerando tanto el caso con simetría electrón-hueco $\epsilon_f = -U/2$ como el caso no-simétrico. El primero nos permite simplificar el problema y obtener expresiones analíticas sencillas para la entropía de entrelazamiento en función de los parámetros del modelo.

2.1.1. Caso Simétrico

Tomando el modelo con simetría electrón-hueco tenemos: $2\epsilon_f + U = 0$, por tanto, el estado doblemente ocupado y vacío en la impureza son degenerados. Siendo el hamiltoniano representado por:

$$\hat{\mathcal{H}}_0 = \sum_{\sigma} V(c_{\sigma}^{\dagger}c_{f\sigma} + h.c.) + Un_{f\uparrow}n_{f\downarrow} - \frac{U}{2} \sum_{\sigma} c_{f\sigma}^{\dagger}c_{f\sigma} \quad (2.3)$$

El espacio de Fock de este hamiltoniano de dos niveles se representa por una base de 16 estados posibles, los cuales pueden ser clasificados por el número total de electrones N_e porque \hat{N}_e conmuta con $\hat{\mathcal{H}}_0$ y de esta manera facilita el cálculo de los autovalores y sus autovectores correspondientes. Considerando nuestro estudio restringido a las propiedades del estado fundamental, podemos simplificar los cálculos tomando el subespacio de baja energía, ($N_e = 2$) con una base de 6 estados posibles. La matriz hamiltoniana para este subespacio es:

$$\hat{\mathcal{H}}_0 = \begin{pmatrix} -\frac{U}{2} & 2V \\ 2V & 0 \end{pmatrix} \quad (2.4)$$

en la base $\{ |S=0\rangle_a, |S=0\rangle_b \}$, donde $|S=0\rangle_a = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow, \downarrow\rangle - |\downarrow, \uparrow\rangle)$ es un estado singlete entre los sitios de la impureza y el baño, mientras que $|S=0\rangle_b = \frac{1}{\sqrt{2}}(|-, \uparrow\downarrow\rangle + |\uparrow\downarrow, -\rangle)$ entre ambos sitios doblemente ocupados. Los dos sitios en cada ket $|s_1, s_2\rangle$ corresponden al estado localizado o de impureza “ f ” y del nivel de conducción “ o ” respectivamente.

Diagonalizando obtenemos la energía $\epsilon_{GS} = -\frac{U}{4} - \sqrt{(\frac{U}{4})^2 + 4V^2}$ que corresponde al estado fundamental con autovector de la forma

$$|\Psi_{GS}\rangle = \frac{\alpha}{\sqrt{2}}(|\uparrow, \downarrow\rangle - |\downarrow, \uparrow\rangle) + \frac{\beta}{\sqrt{2}}(|-, \uparrow\downarrow\rangle + |\uparrow\downarrow, -\rangle) \quad (2.5)$$

En el régimen de correlación fuerte $V \ll U$ tenemos $\epsilon_{GS} \approx -\frac{U}{2} - 8\frac{V^2}{U}$ y se obtiene la relación entre los coeficientes $\beta = -\frac{4V}{U}\alpha$. De esta relación vemos que $|\alpha|^2 \gg |\beta|^2$ de manera que los estados doblemente ocupado y vacío en la impureza tienen poca probabilidad de ocurrir, lo que se esperaba.

	Energía	Estados
1	0	$\frac{1}{\sqrt{2}}(\uparrow\downarrow, -\rangle - -, \uparrow\downarrow\rangle)$
2	$-\frac{U}{2}$	$ \uparrow, \uparrow\rangle$
		$ \downarrow, \downarrow\rangle$
		$\frac{1}{\sqrt{2}}(\uparrow, \downarrow\rangle + \downarrow, \uparrow\rangle)$
3	$-\frac{U}{4} - \sqrt{(\frac{U}{4})^2 + 4V^2}$	$ \Psi_{GS}\rangle = \alpha(\frac{ \uparrow, \downarrow\rangle - \downarrow, \uparrow\rangle}{\sqrt{2}}) + \beta(\frac{ \uparrow\downarrow, -\rangle + -, \uparrow\downarrow\rangle}{\sqrt{2}})$
4	$-\frac{U}{4} + \sqrt{(\frac{U}{4})^2 + 4V^2}$	$\lambda(\frac{ \uparrow, \downarrow\rangle - \downarrow, \uparrow\rangle}{\sqrt{2}}) + \chi(\frac{ \uparrow\downarrow, -\rangle + -, \uparrow\downarrow\rangle}{\sqrt{2}})$

Tabla 2.1: Energías de los 6 estados posibles de la base del subespacio para $N_e = 2$ electrones en el sistema molecular.

En la tabla 2.1 se presenta la base de 6 estados con sus respectivas energías. Para el régimen de correlación fuerte el estado de más baja energía es el singlete $\frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow, \downarrow\rangle - |\downarrow, \uparrow\rangle)$.

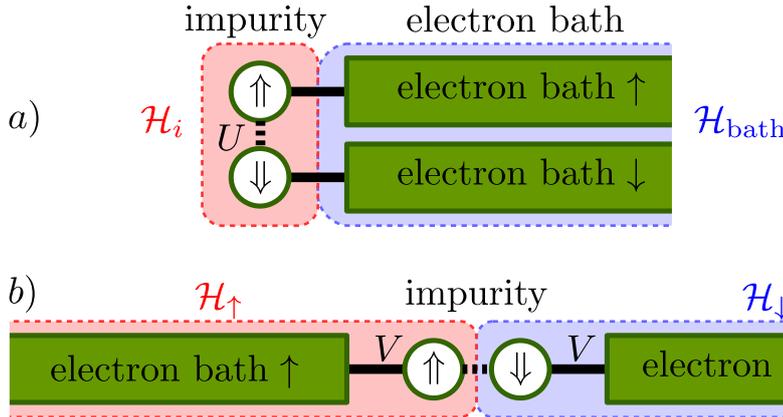


Figura 2.1: Esquema del modelo de Anderson, para una impureza con degeneración de Kramers, incluyendo las dos particiones del espacio de Hilbert total \mathcal{H} considerado para calcular la entropía de entrelazamiento: a) $\mathcal{H} = \mathcal{H}_i \otimes \mathcal{H}_{bath}$, b) $\mathcal{H} = \mathcal{H}_\uparrow \otimes \mathcal{H}_\downarrow$. La repulsión coulombiana U entre las proyecciones opuestas de espín de los electrones en la impureza y el acoplamiento de hibridación V entre la impureza y los electrones de conducción, se indican en la figura.

A continuación, se calculan las entropías de entrelazamiento para las siguientes particiones: $\mathcal{H} = \mathcal{H}_\uparrow \otimes \mathcal{H}_\downarrow$ (partición entre proyecciones opuestas de espín, para una

12 Entrelazamiento en los modelos de impureza cuántica de Anderson y Kondo

degeneración del momento angular $N = 2$ ($j = 1/2$) Fig. 2.1(b). Para el caso de degeneración N , se realiza una partición entre los valores de proyecciones de espín $m = -j, -j + 1, \dots, j - 1, j$. positivos y negativos, por tanto, $\mathcal{H} = \mathcal{H}_{m<0} \otimes \mathcal{H}_{m>0}$. La siguiente partición Fig. 2.1(a) $\mathcal{H} = \mathcal{H}_i \otimes \mathcal{H}_{bath}$ divide el espacio de Hilbert total \mathcal{H} en dos subespacios, los estados con todas las posibles proyecciones de espín de la impureza “i” y del baño de conducción “bath”. Al trabajar con aproximación de banda angosta, definimos un estado localizado “f” (impureza) y un solo nivel de conducción “o” que se acopla con la impureza, la partición será $\mathcal{H} = \mathcal{H}_f \otimes \mathcal{H}_o$.

Para la partición entre proyecciones de espín con una degeneración de momento angular $N = 2$ se calculó la entropía de entrelazamiento S_{\uparrow} a partir de la matriz densidad reducida ρ_{\uparrow} , la cual se obtiene realizando únicamente la traza parcial “espín- \downarrow ” sobre la matriz densidad total $\rho = |\Psi_{GS}\rangle \langle \Psi_{GS}|$, $\rho_{\uparrow} = Tr_{\downarrow} \rho$, los grados de libertad sobre los cuales se realiza la traza son: $\{ |\downarrow\rangle_f \otimes |-\rangle_o, |-\rangle_f \otimes |\downarrow\rangle_o \}$. Siendo $\alpha, \beta \in \mathbb{R}$ y teniendo en cuenta la normalización de $|\Psi_{GS}\rangle$, la matriz ρ_{\uparrow} queda

$$\rho_{\uparrow} = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & \alpha\beta \\ \alpha\beta & \frac{1}{2} \end{pmatrix} \quad (2.6)$$

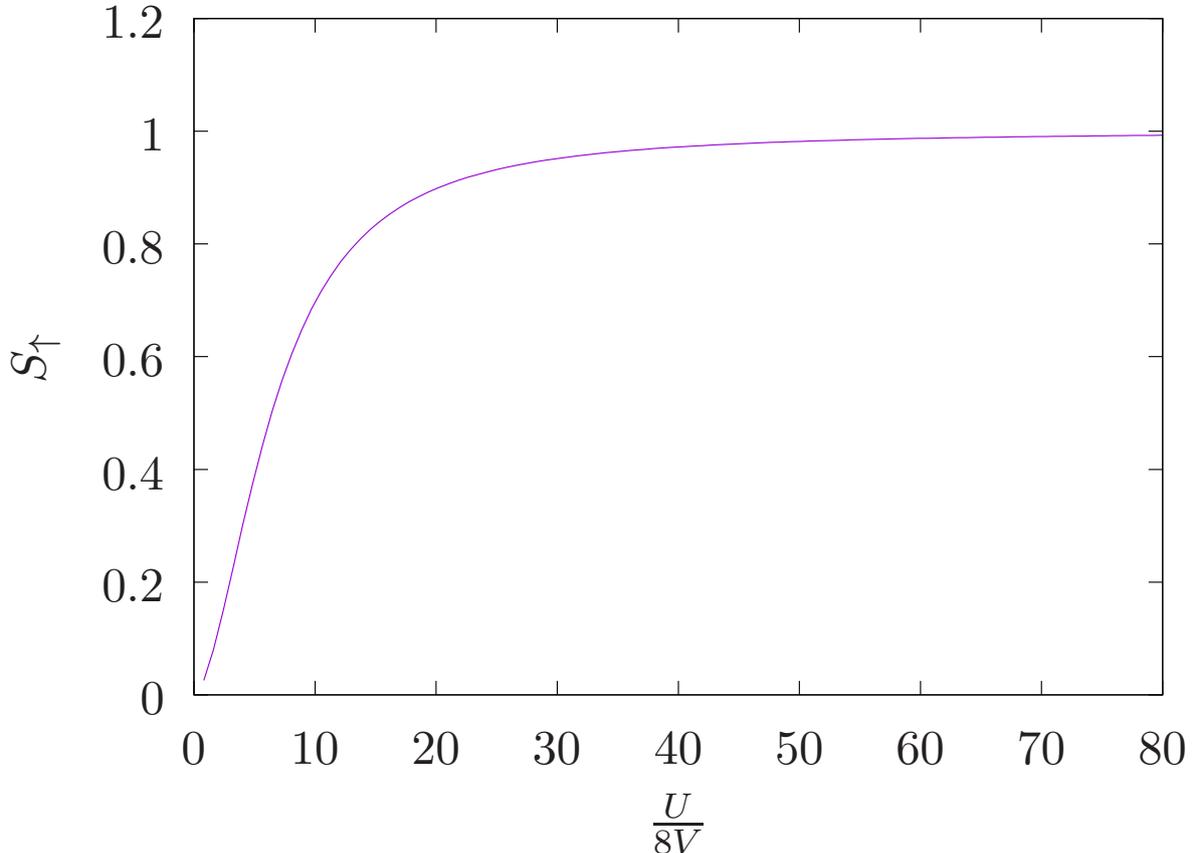


Figura 2.2: Entropía de entrelazamiento S_{\uparrow} del estado fundamental del SIAM en el límite de banda angosta en función de $\frac{U}{8V}$. V corresponde al término de hibridación.

En el régimen de interacción fuerte $U \rightarrow \infty$, la entropía $S_{\uparrow} = 1$, este valor corresponde a un estado máximamente entrelazado ($\beta = 0$ y $\alpha = 1$), siendo una superposición de estados singletes de los sitios “f” (impureza) y “o” (baño).

Para el caso general los autovalores son $\lambda_{\pm} = \frac{1}{2} \pm \alpha\beta$, la entropía de entrelazamiento se puede expresar como:

$$S_{\uparrow} = - \left(\frac{1}{2} + \frac{\gamma}{1 + \gamma^2} \right) \log_2 \left(\frac{1}{2} + \frac{\gamma}{1 + \gamma^2} \right) - \left(\frac{1}{2} - \frac{\gamma}{1 + \gamma^2} \right) \log_2 \left(\frac{1}{2} - \frac{\gamma}{1 + \gamma^2} \right) \quad (2.7)$$

con $\gamma = \frac{U}{8V} - \sqrt{\frac{U^2}{8V} + 1}$. Su gráfica se observa en Fig.2.2 donde S_{\uparrow} incrementa monótonamente hasta alcanzar su máximo valor $S_{\uparrow} = 1$.

Para la segunda partición $\mathcal{H}_f \otimes \mathcal{H}_o$ (ver Figura 2.1(a)), la matriz densidad del baño de conducción se obtiene realizando la traza en la base de estados posibles de la impureza $\{ |-\rangle_f, |\uparrow\rangle_f, |\downarrow\rangle_f, |\uparrow\downarrow\rangle_f \}$. La matriz densidad resulta

$$\rho_o = \begin{pmatrix} \frac{|\beta|^2}{2} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{|\alpha|^2}{2} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{|\alpha|^2}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{|\beta|^2}{2} \end{pmatrix} \quad (2.8)$$

con autovalores $\frac{|\beta|^2}{2}$ y $\frac{|\alpha|^2}{2}$ de multiplicidad 2. La entropía de entrelazamiento respectiva es

$$S = - \frac{\gamma^2}{1 + \gamma^2} \log_2 \left(\frac{\gamma^2}{2(1 + \gamma^2)} \right) - \frac{1}{1 + \gamma^2} \log_2 \left(\frac{1}{2(1 + \gamma^2)} \right), \quad (2.9)$$

tomando $V = 1$ para simplificar los cálculos, tenemos $\gamma = \frac{U}{8} - \sqrt{\frac{U^2}{8} + 1}$. En la Fig 2.3 se observa como la entropía disminuye tendiendo a 1 y adquiere su máximo valor 2 cuando la interacción coulombiana es nula considerando que tenemos un espacio de Hilbert de dimensión 4.

Vemos que para caracterizar el rol de las interacciones en el entrelazamiento del problema de Kondo, es conveniente realizar la partición $\mathcal{H}_{\uparrow} \otimes \mathcal{H}_{\downarrow}$, que da un entrelazamiento nulo para el caso no interactuante.

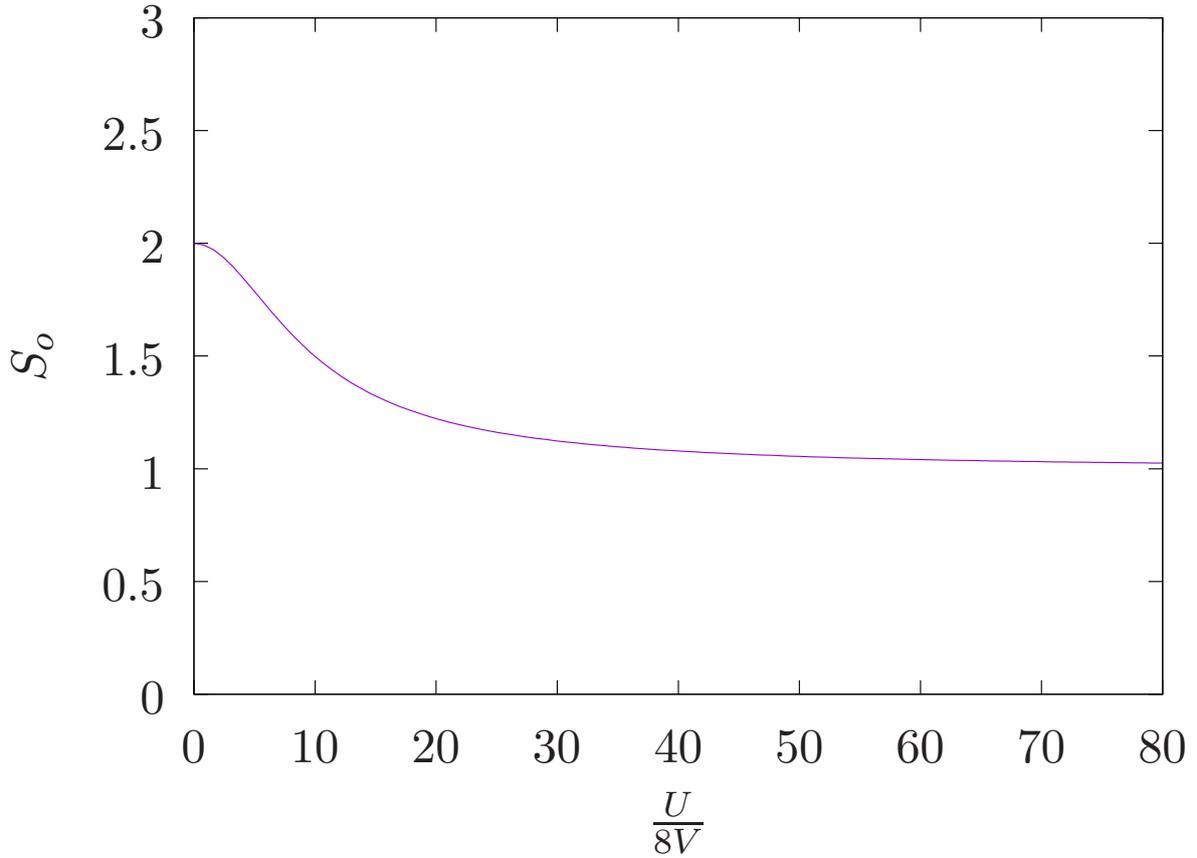


Figura 2.3: Entropía de entrelazamiento en la partición impureza-mar de electrones S_o vs. $\frac{U}{8V}$ y simetría electrón-hueco.

Modelo de Kondo

A continuación, se considera el límite de correlación fuerte $U \rightarrow \infty$ del modelo de Anderson para describir el Modelo de Kondo en el límite de banda angosta. La parte de interacción espín-espín del hamiltoniano 3.10 se describe como

$$\hat{\mathcal{H}}_K = JS \cdot s_o = \frac{J}{2}[(S + s_o)^2 - S^2 - s_o^2] \quad (2.10)$$

En este límite el estado fundamental corresponde al estado singlete $\frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow, \downarrow\rangle - |\downarrow, \uparrow\rangle)$. Aplicando el hamiltoniano 2.10 a este estado se obtiene la energía fundamental $E_{GS} = -\frac{3J}{4}$. El término de interacción J se puede determinar de la diferencia de energía entre los estados de más baja energía y asignando un término de hibridación $V \rightarrow \infty$ para obtener un J constante. Siendo $J = E_{triplete} - E_{singlete} = \frac{8V^2}{U}$ (de acuerdo con el valor encontrado de la transformación de Schrieffer-Wolff [8] que resulta de una perturbación en el término de hibridación entre la impureza y el baño), obteniéndose así una relación entre los términos de interacción de los modelos de Anderson y Kondo.

En este límite, el valor de $\beta \rightarrow 0$ y la matriz densidad se representa por:

$$\rho_{\uparrow} = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & \frac{1}{2} \end{pmatrix} \quad (2.11)$$

lo cual corresponde a un estado máximamente entrelazado, por tanto la entropía del sistema siempre será 1, sin importar el valor de $J > 0$. Como veremos en la sección 2.4 S_{\uparrow} supera 1. Los resultados de $S_{\uparrow} = 1$ de esta sección son únicamente consecuencia de la aproximación de banda angosta.

2.1.2. Caso no-simétrico

El hamiltoniano de Anderson corresponde a 2.2, por tanto, la matriz del hamiltoniano en el subespacio de más baja energía ($N_e = 2$) es la matriz de 3×3

$$\hat{\mathcal{H}}_{asymm} = \begin{pmatrix} \epsilon_f & 2V & 0 \\ 2V & \epsilon_f + \frac{U}{2} & \epsilon_f + \frac{U}{2} \\ 0 & \epsilon_f + \frac{U}{2} & \epsilon_f + \frac{U}{2} \end{pmatrix}, \quad (2.12)$$

en la base $\{|S=0\rangle_a, |S=0\rangle_b, |S=0\rangle_c\}$ con un estado singlete de simple ocupación $|S=0\rangle_a = \frac{|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle}{\sqrt{2}}$ y dos de doble ocupación $|S=0\rangle_b = \frac{|\uparrow\downarrow, -\rangle + |-\rangle, \uparrow\downarrow\rangle}{\sqrt{2}}$ y $|S=0\rangle_c = \frac{|\uparrow\downarrow, -\rangle - |-\rangle, \uparrow\downarrow\rangle}{\sqrt{2}}$. La no-simetría del problema rompe la degeneración y aparece una mezcla con el estado singlete $|S=0\rangle_c$ a diferencia del caso simétrico.

De diagonalizar la matriz 2.12, el estado fundamental corresponde al autovector

$$|\Psi_{GS}\rangle = \alpha \left(\frac{|\uparrow, \downarrow\rangle - |\downarrow, \uparrow\rangle}{\sqrt{2}} \right) + \beta \left(\frac{|\uparrow\downarrow, -\rangle + |-\rangle, \uparrow\downarrow\rangle}{\sqrt{2}} \right) + \gamma \left(\frac{|\uparrow\downarrow, -\rangle - |-\rangle, \uparrow\downarrow\rangle}{\sqrt{2}} \right), \quad (2.13)$$

los valores α, β y γ son los componentes del autovector asociado al autovalor de más baja energía. A diferencia del caso simétrico, no se puede expresar fácilmente estos valores en función de los parámetros del hamiltoniano. Se podría aplicar teoría de perturbaciones para $V \rightarrow 0$ y así determinar expresiones aproximadas que aplican en el límite de Kondo.

La matriz densidad reducida en la partición de espín ρ_{\uparrow} del estado fundamental $|\Psi\rangle_{GS}$ es

$$\rho_{\uparrow} = \text{Tr}_{\downarrow} |\Psi_{GS}\rangle \langle \Psi_{GS}| = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} + \gamma\beta & \alpha\beta \\ \alpha\beta & \frac{1}{2} - \gamma\beta \end{pmatrix} \quad (2.14)$$

16 Entrelazamiento en los modelos de impureza cuántica de Anderson y Kondo

y la entropía de entrelazamiento de espín S_{\uparrow} se puede expresar como

$$S_{\uparrow} = -\frac{1}{2} - \beta\sqrt{\gamma^2 + \alpha^2} \log_2 \left(\frac{1}{2} + \beta\sqrt{\gamma^2 + \alpha^2} \right) - \frac{1}{2} + \beta\sqrt{\gamma^2 + \alpha^2} \log_2 \left(\frac{1}{2} - \beta\sqrt{\gamma^2 + \alpha^2} \right). \quad (2.15)$$

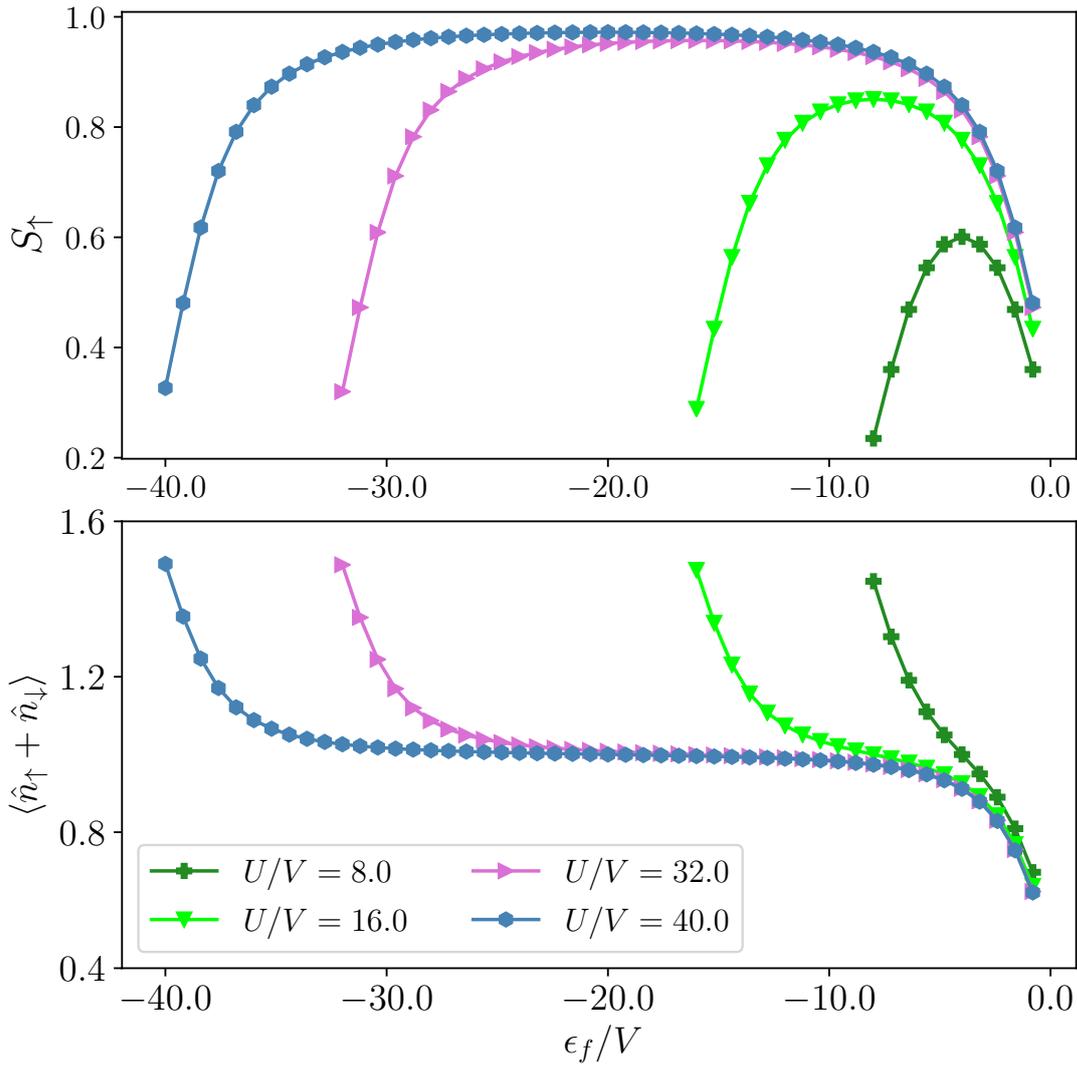


Figura 2.4: S_{\uparrow} (arriba) y ocupación ($n_{\uparrow} + n_{\downarrow}$) en la impureza (abajo) vs. la energía del estado localizado ϵ_f para diferentes valores del parámetro de interacción U con $V = 0,25$ fijo.

A partir de esta expresión, se determinó numéricamente el valor de la entropía de espín S_{\uparrow} en función de los parámetros del hamiltoniano U , ϵ_f y tomando como escala de energía el término de hibridación $V = 0,25$ fijo. En la Fig. (2.4) se fija el término de interacción U y se varía la energía del estado localizado. La entropía S_{\uparrow} es simétrica

bajo la transformación $\epsilon_f \rightarrow -U - \epsilon_f$ y adquiere su máximo valor $S_{\uparrow, max}$ en $\epsilon_f = -U/2$ (simetría electrón-hueco). La región con $S_{\uparrow, max}$ aumenta cuando incrementamos U y $S_{\uparrow, max} \rightarrow 1$ en el límite de interacción fuerte $U \rightarrow \infty$. Analizando a partir de la ocupación en la impureza, esta región corresponde a la zona con $n_f = 1$ (un electrón en la impureza), lo que favorece la formación del estado singlete con un momento magnético local en la impureza.

También, se puede ver que S_{\uparrow} empieza a decaer para $n_f < 1$, esto ocurre porque nos encontramos en una zona donde incrementa la probabilidad de encontrar el estado localizado vacío y no actúa el término de interacción U . Se observa el mismo decaimiento para $n_f > 1$ debido a la simetría electrón-hueco. En la Fig. (2.5) se fija el nivel de la

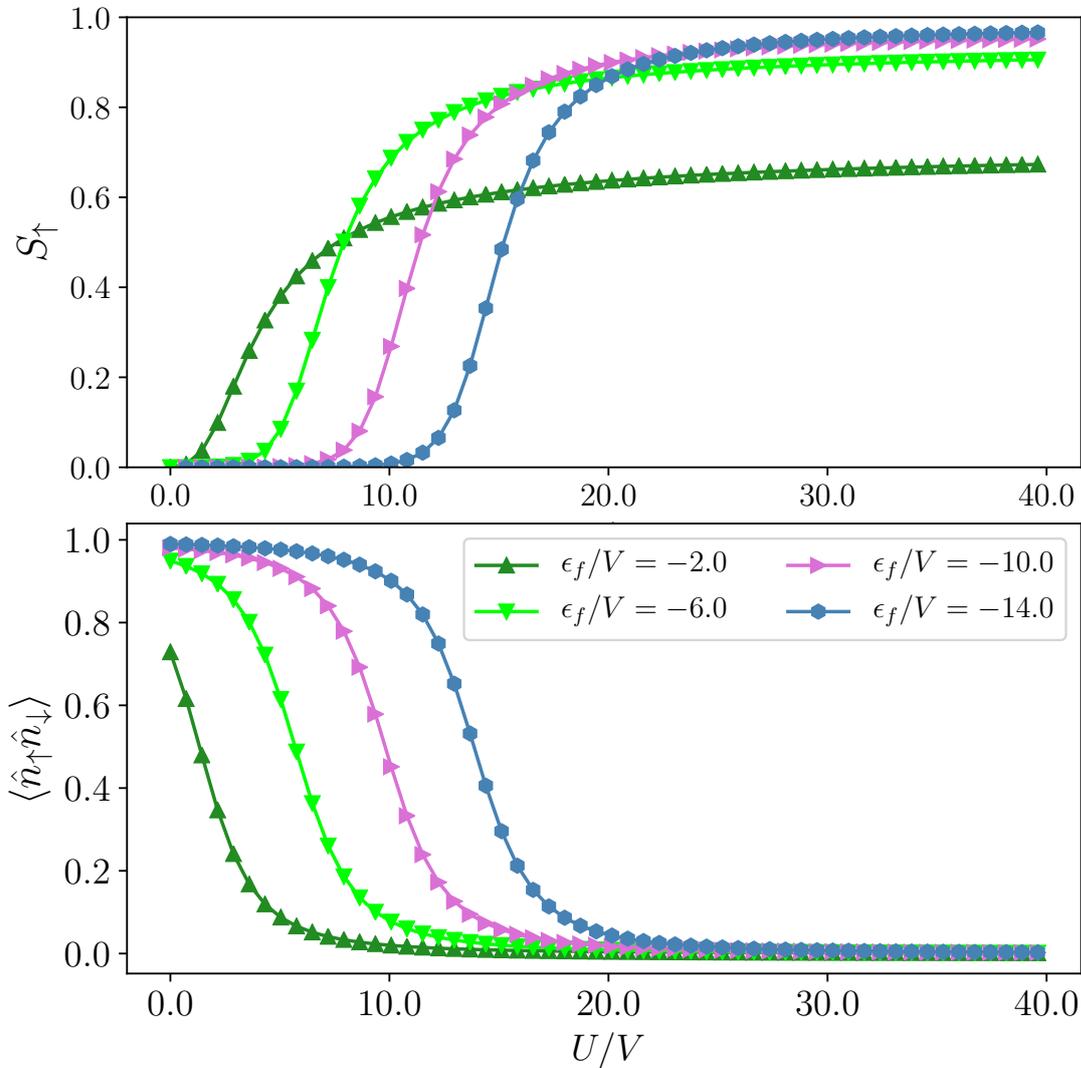


Figura 2.5: Entropía de entrelazamiento S_{\uparrow} (arriba) y doble ocupación $\hat{n}_{\uparrow}\hat{n}_{\downarrow}$ (abajo) en función de U y $V = 0,25$ fijo, variando la energía del estado localizado.

impureza ϵ_f y se varía el término de interacción U . Si ϵ_f se hace más negativo, extiende

18 Entrelazamiento en los modelos de impureza cuántica de Anderson y Kondo

la región donde $S_{\uparrow} = 0$ (sistema descorrelacionado), esta región se amplía debido a un incremento en la probabilidad de tener el nivel de la impureza doblemente ocupado.

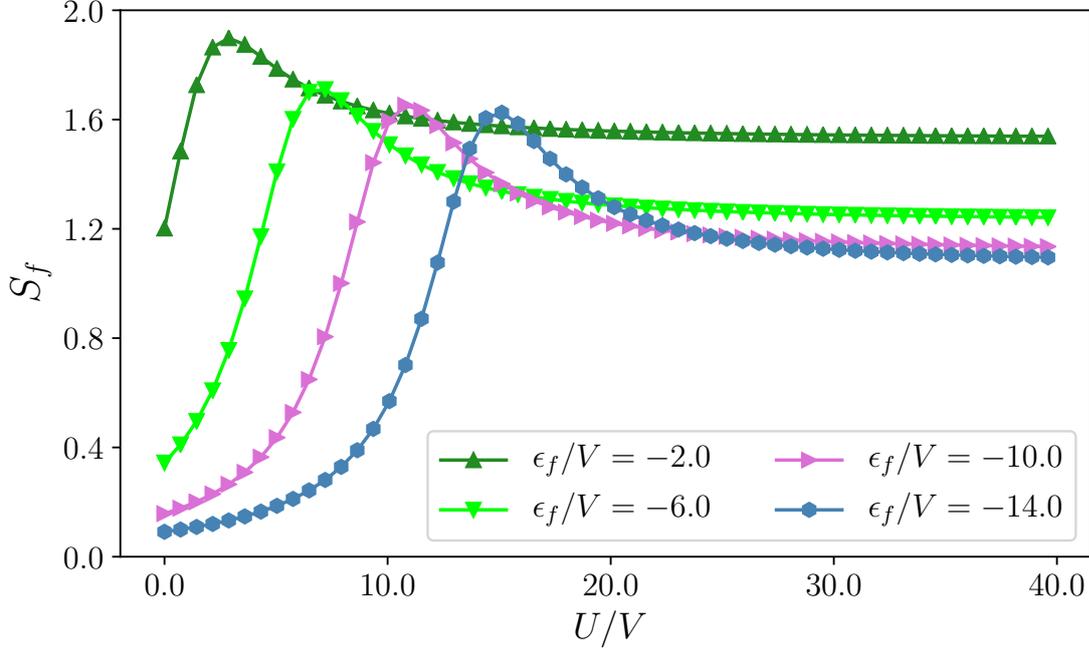


Figura 2.6: Entropía S_f vs. U interacción coulombiana para valores del nivel de la impureza ϵ_f y $V = 0,25$ fijos.

Realizando la partición $\mathcal{H}_f \otimes \mathcal{H}_o$ impureza-baño de conducción, la matriz de densidad ρ_f trazando sobre los estados $\{|\uparrow\rangle_o, |\downarrow\rangle_o, |\uparrow\downarrow\rangle_o, |-\rangle_o\}$ resulta

$$\rho_f = \begin{pmatrix} \frac{\alpha^2}{2} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{\alpha^2}{2} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{(\beta+\gamma)^2}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{(\beta-\gamma)^2}{2} \end{pmatrix}. \quad (2.16)$$

Asimismo, se presentan figuras midiendo la entropía en esta partición en función de los parámetros del modelo. En la Fig. 2.6 se fijan distintos valores del nivel de la impureza ϵ_f y se varía U . Para valores de ϵ_f cada vez más negativos, la entropía $S_f \rightarrow 0$ cuando la interacción coulombiana es nula $U = 0$, es decir, el estado fundamental tiende al estado de doble ocupación en el nivel de la impureza $|\uparrow, \downarrow\rangle_f$. Además, para $U \rightarrow \infty$ la entropía $S_f \rightarrow 1$, siempre y cuando, $\epsilon_f \ll 0$ sea lo suficientemente negativo, análogo si se considera la partición de espín.

El máximo de las curvas se ubica en la región $\epsilon_f = -U$, este valor converge a $S_{f,max} \rightarrow -\log_2(1/3) \approx 1,58$ cuando $U \rightarrow \infty$. Esto en vista de que el estado vacío $|-\rangle_f$ se vuelve inaccesible y por la presencia de un estado de muy baja energía con tres estados posibles $|\uparrow\rangle_f, |\downarrow\rangle_f$ y $|\uparrow\downarrow\rangle_f$. Considerando la partición de espín, tener la entropía en

su máximo valor, nos aseguraba la existencia de un momento magnético local en la impureza y un estado máximamente entrelazado. Como vimos, esto no ocurre en la partición impureza- baño de conducción.

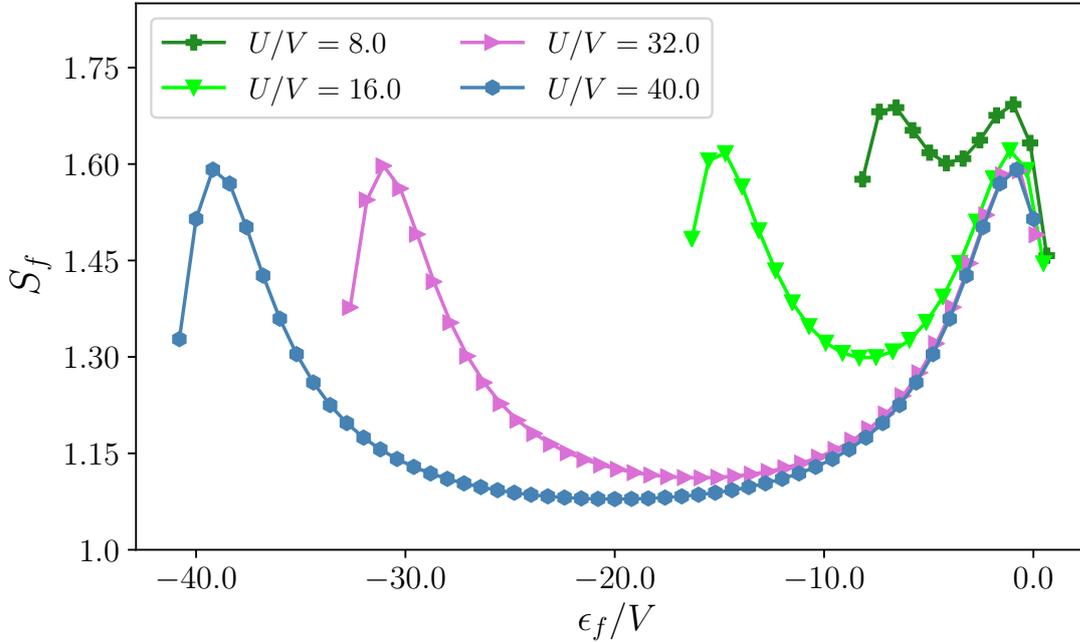


Figura 2.7: Entropía S_f vs. ϵ_f el nivel de la impureza para valores de interacción U y $V = 0,25$ fijos.

En la Fig. 2.7 se fija U y se varía ϵ_f . En esta partición también se presenta una simetría en la entropía de entrelazamiento bajo la transformación $\epsilon_f \rightarrow -\epsilon_f - U$, esto se debe a la presencia de simetría electrón-hueco en el sistema. De igual manera, en el límite de interacción fuerte $U \rightarrow \infty$, tanto en el caso simétrico ($\epsilon_f = -U/2$), como en los dos máximos ($\epsilon_f = 0, \epsilon_f = -U$), la entropía S_f tienden a 1 y $\approx 1,58$ cuando ϵ_f se hace más negativo. Como ya mencionamos, no es conveniente realizar esta partición porque independientemente del valor que tome ϵ_f el entrelazamiento no se anula en el caso no interactuante.

A continuación, trabajando en la partición de espín, se analiza la relación de S_\uparrow con la susceptibilidad χ en la impureza. Se define la susceptibilidad en la impureza a temperatura cero, como

$$\chi = \left. \frac{dm_f}{dh} \right|_{h \rightarrow 0}. \quad (2.17)$$

Esta mide el cambio en la polarización del espín de la impureza en el estado fundamental $m_f = \langle (\hat{n}_\uparrow - \hat{n}_\downarrow) \rangle / 2$ cuando se aplica una separación energética de Zeeman en la impureza igual a $2h = g\mu_B B$. La matriz asociada al hamiltoniano 3.10 aplicando un campo magnético en el nivel de la impureza es

$$\hat{\mathcal{H}}_{campo} = \begin{pmatrix} \epsilon_f & -\frac{\hbar}{2} & 2V & 0 \\ -\frac{\hbar}{2} & \epsilon_f & 0 & 0 \\ 2V & 0 & \epsilon_f + \frac{U}{2} & \epsilon_f + \frac{U}{2} \\ 0 & 0 & \epsilon_f + \frac{U}{2} & \epsilon_f + \frac{U}{2} \end{pmatrix}, \quad (2.18)$$

en la base $\{|S=0\rangle_a, |S=1\rangle_d, |S=0\rangle_b, |S=0\rangle_c\}$ con $|S=1\rangle_d = \frac{|\uparrow,\downarrow\rangle + |\downarrow,\uparrow\rangle}{\sqrt{2}}$. Corresponde a la misma base obtenida sin aplicar campo más un estado triplete de simple ocupación.

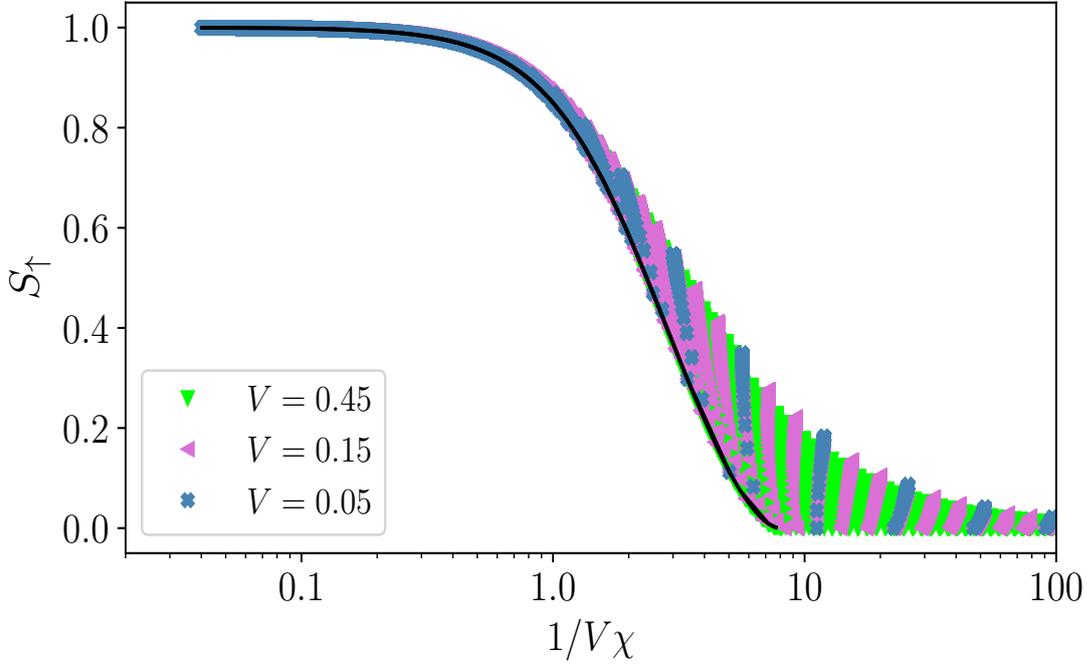


Figura 2.8: La curva de color negro corresponde al caso simétrico ($\epsilon_f = -U/2$), S_\uparrow tiene un comportamiento monótono con $(\chi V)^{-1}$. La parte coloreada corresponde a valores de ϵ_f en $[-10, 0]$ con paso de 0,05 y U en $[0, 20]$ con paso de 1.

Se presentan cálculos numéricos aplicando valores por debajo de una separación energética $\delta\hbar$ lo suficientemente pequeña, tal que la magnetización presente un comportamiento lineal y nos permita obtener la susceptibilidad mediante la pendiente de la curva. En la Fig. (2.8) se fija V y se calcula la susceptibilidad χ para cada valor de ϵ_f en $[-10, 0]$ con paso de 0,05 y U en $[0, 20]$ con paso de 1. Para el caso simétrico $\epsilon_f = -U/2$ se tiene una curva universal monótona en función de $(\chi V)^{-1}$, independiente de la elección de ϵ_f y V . Además, se percibe que a partir de $(\chi V)^{-1} \leq 1$ el caso no-simétrico y simétrico empiezan a colapsar en una sola curva.

Debido al solapamiento de los datos no se puede apreciar con claridad aquellos, correspondientes a $V = 0,05$, $V = 0,15$ y $V = 0,45$, que caen en la curva universal. Por

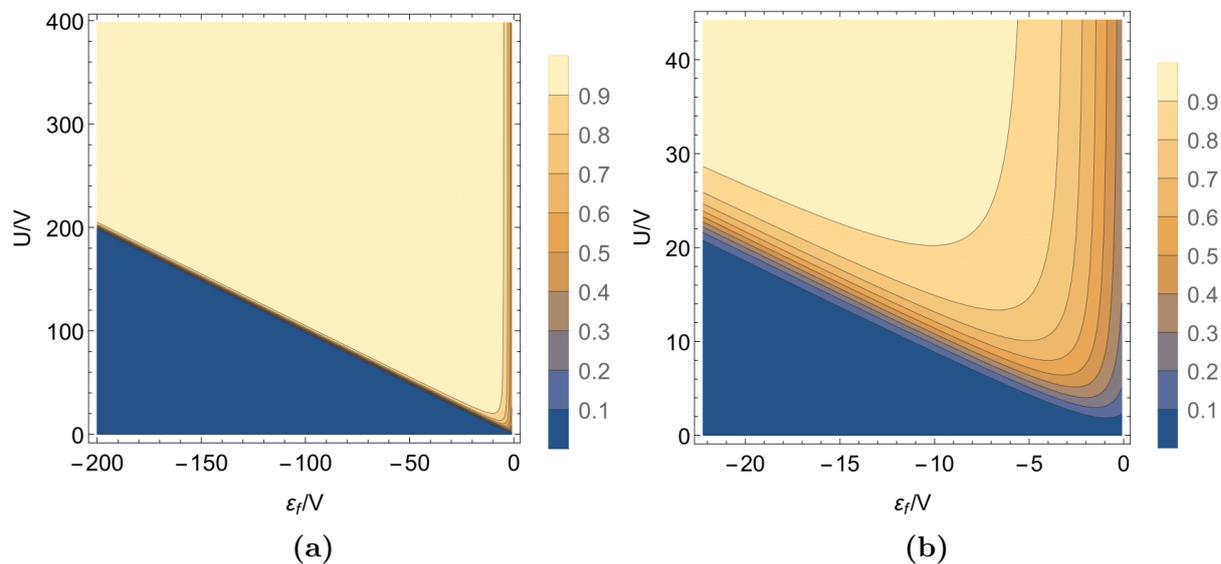


Figura 2.9: Mapa de la entropía de entrelazamiento de espín S_f para valores de interacción U en $[0, 20]$ y ϵ_f en $[-10, 0]$ con (a) $V = 0,05$ y (b) $V = 0,45$

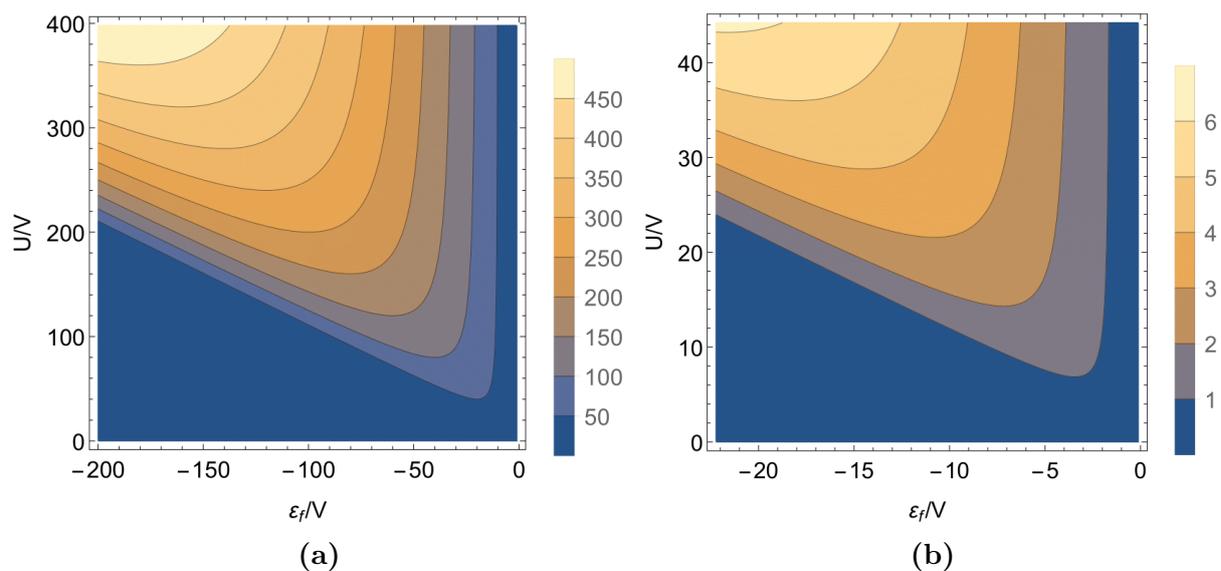


Figura 2.10: Mapa de Susceptibilidad χ en la impureza para valores de interacción U entre 0, 20 y ϵ_f entre $-10, 0$ con (a) $V = 0,05$ y (b) $V = 0,45$

22 Entrelazamiento en los modelos de impureza cuántica de Anderson y Kondo

tanto, se presentan mapas para χ y S_\uparrow en función de los parámetros U y ϵ_f para una mejor visualización.

En las Fig. 2.9a y 2.9b se exhibe un incremento en la zona con $S_\uparrow \rightarrow 1$ y a la vez, en la zona con valores de susceptibilidad grandes Fig. 2.10a y Fig. 2.10b al disminuir el valor de hibridación V .

2.2. Función de onda variacional de Varma-Yafet:

A continuación, se considera la función de onda variacional de Varma-Yafet [10] :

$$|\Psi_{GS}\rangle = a_0 |\Psi_0\rangle + \sum_k a_k (c_{f\uparrow}^\dagger c_{k\uparrow} + c_{f\downarrow}^\dagger c_{k\downarrow}) |\Psi_0\rangle. \quad (2.19)$$

Donde $|\Psi_{GS}\rangle$ es una combinación lineal de estados singlete. El primer término corresponde a la esfera de Fermi llena $|\Psi_0\rangle = \prod_k^{k_f} c_{k\uparrow}^\dagger c_{k\downarrow}^\dagger |0\rangle$ y el segundo son estados con un hueco en la energía $\epsilon_{k,\sigma}$ de la banda de conducción y un electrón en el nivel de la impureza con espín σ . Se espera que $|\Psi_{GS}\rangle$ resulte una buena aproximación para $U \rightarrow \infty$ dado que $n_{f\uparrow} n_{f\downarrow} |\Psi_{GS}\rangle = 0$.

Aplicando el hamiltoniano de la Ec.(1.4) a la función de onda variacional, su energía se puede expresar como

$$E = \frac{\langle \Psi_{GS} | H | \Psi_{GS} \rangle}{\langle \Psi_{GS} | \Psi_{GS} \rangle} = E_0 + \epsilon_f + \epsilon, \quad (2.20)$$

donde, E_0 corresponde a la energía no perturbada de $|\Psi_0\rangle$, ϵ_f la energía del nivel de la impureza y ϵ la energía que gana el sistema al formar el singlete entre la impureza y el baño de conducción. Se define la energía del singlete de Kondo positiva $\epsilon_k = E_0 - \epsilon_f - \langle \Psi_{GS} | H | \Psi_{GS} \rangle / \langle \Psi_{GS} | \Psi_{GS} \rangle$.

De la condición de normalización de $|\Psi_{GS}\rangle$, los coeficientes deben cumplir con la igualdad $1 = a_0^2 + 2 \sum_k a_k^2$. Para determinar las ecuaciones variacionales que rigen los coeficientes a_k y a_0 , los cuales nos permiten construir $|\Psi_{GS}\rangle$, se minimiza la función

$$\langle \Psi_{GS} | H | \Psi_{GS} \rangle - \lambda (\langle \Psi_{GS} | \Psi_{GS} \rangle - 1), \quad (2.21)$$

con λ como multiplicador de Lagrange que nos asegura la normalización de $|\Psi_{GS}\rangle$. De la minimización de esta expresión en función de los coeficientes se encuentra que $\lambda = \epsilon_K$ con valor

$$\epsilon_K = +2 \sum_k (\epsilon_k a_k^2 + 2V_k a_k a_0) - \epsilon_f a_0^2. \quad (2.22)$$

Las ecuaciones variacionales para los coeficientes son:

$$\epsilon_K a_0 = \epsilon_f a_0 - 2 \sum_k V_k a_k \quad (2.23a)$$

$$\epsilon_K a_k = \epsilon_k a_k - V_k a_0 \quad (2.23b)$$

Despejando a_k de la Ec.(2.23b) y obteniendo a_0 de la relación de normalización, obtenemos expresiones para los coeficientes

$$a_k = \frac{V_k a_0}{\epsilon_k - \epsilon_K} \quad (2.24a)$$

$$a_0 = \sqrt{\frac{1}{1 + \sum_k \frac{2V_k^2}{(\epsilon_k - \epsilon_K)^2}}}. \quad (2.24b)$$

Remplazando la Ec.(2.24a) en Ec.(2.23a) obtenemos la expresión que nos permite determinar ϵ_K a partir de los parámetros del hamiltoniano y de los niveles de energía de los electrones de conducción.

$$\epsilon_K = \epsilon_f - 2 \sum_k \frac{V_k^2}{\epsilon_k - \epsilon_K}. \quad (2.25)$$

Para determinar el término de hibridación V_{kf} y los respectivos niveles energéticos de los electrones de conducción ϵ_k , es útil reformular el mar de electrones como de una cadena lineal finita de orbitales tipo s (ver Apéndice A).

Posteriormente, para determinar la entropía de entrelazamiento en la partición de espín S_\uparrow , se encontró una expresión para la matriz de densidad reducida de $|\Psi_{GS}\rangle$ en función de los coeficientes a_i , los cuales, se pueden obtener mediante cálculos numéricos.

$$\rho_\uparrow = \begin{pmatrix} \sum_{i=0}^N a_i^2 & \dots & (-1)^{j+1} a_0 a_j & \dots & \dots \\ & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots \\ & & a_j^2 & (-1)^{k+j} a_j a_k & \vdots \\ & & & \ddots & \vdots \\ & & & & a_N^2 \end{pmatrix}. \quad (2.26)$$

24 Entrelazamiento en los modelos de impureza cuántica de Anderson y Kondo

Sin embargo, realizando un cambio de base específico a los operadores solo es necesario diagonalizar una matriz de 2×2 , concidiendo los autovalores con los obtenidos mediante la matriz 2.26. El cambio de base es:

$$c_0 = \frac{1}{\sqrt{A}} \sum_k a_k c_k \quad (2.27)$$

siendo A una constante de normalización, este nuevo operador cumple con la propiedad $\{c_0, c_0^\dagger\} = 1$. Entonces la función de onda variacional se puede expresar como:

$$|\Psi_{GS}\rangle = a_0 |\Psi_0\rangle + b_0 (c_{f\uparrow}^\dagger c_{0\uparrow} + c_{f\downarrow}^\dagger c_{0\downarrow}) |\Psi_0\rangle \quad (2.28)$$

con $A = \sum_k a_k^2$ y $b_0 = \sqrt{A}$. La matriz de densidad reducida tiene la forma

$$\rho_\uparrow = \begin{pmatrix} a_0^2 + b_0^2 & a_0 b_0 \\ a_0 b_0 & b_0^2 \end{pmatrix} \quad (2.29)$$

Tenemos que $b_0^2 = \sum_k a_k^2$ se puede obtener reemplazando la sumatoria por una integral en ϵ_k ,

$$b_0^2 = \frac{a_0^2}{\pi} \int_{-D}^0 \frac{\Gamma(\omega)}{(\omega - \epsilon_K)^2} d\omega \quad (2.30)$$

donde $\Gamma(\omega) = \pi \sum_k \delta(\omega - \epsilon_k) V_k^2$ y D es el semiancho de la banda de conducción. En el régimen de Kondo ($\epsilon_K \ll D$, $|\epsilon_f|; -\epsilon_f \gg \Gamma$) la integral 2.30 está dominada por energías cerca del nivel de Fermi ($\omega \sim 0$), lo cual permite aproximar $\Gamma(\omega) \sim \Gamma(0) = \Gamma = \pi V^2 \rho(0)$ con $\rho(0)$ la densidad de estados en el nivel de Fermi. Tenemos,

$$b_0^2 \sim \frac{a_0^2 \Gamma}{\pi \epsilon_K} \quad (2.31)$$

expresado en función de la relación ϵ_K/Γ . De manera similar resolvemos para ϵ_K de la Ec.(2.25), donde se satisface aproximadamente

$$\epsilon_K = D e^{-\epsilon_f \pi / 2\Gamma} \quad (2.32)$$

Utilizando la condición de traza unitaria de la matriz densidad, 2.29 $a_0^2 + 2b_0^2 = 1$, se puede expresar b_0^2 unívocamente en función de ϵ_K/Γ .

$$b_0^2 = \frac{1}{1 + \frac{\epsilon_K \pi}{\Gamma}} \quad (2.33)$$

Reemplazando (2.33) en (2.29), la matriz densidad queda completamente expresada en

función de la relación ϵ_K/Γ , así como todos sus autovalores que luego se requieren para calcular la entropía de entrelazamiento de espín S_\uparrow . Primeramente, se obtuvo numéricamente S_\uparrow en función de los parámetros ϵ_K y ϵ_f de remplazar 2.31 y 2.32 en la matriz densidad 2.29.

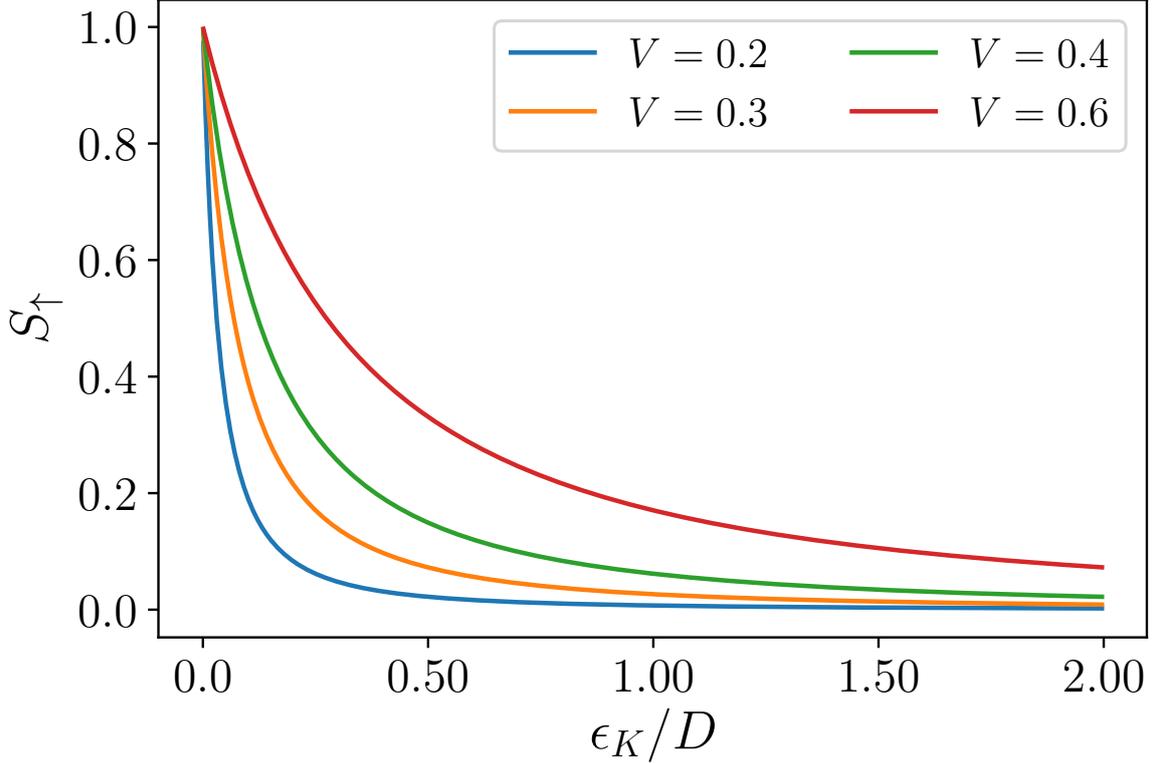


Figura 2.11: Entropía de entrelazamiento S_\uparrow para la función de onda variacional de Varma-Yafet vs. ϵ_K (energía que gana el sistema para formar el singlete) fijando diferentes valores del término de hibridación V y $D = 1$ el semiancho de banda.

En la Fig. (2.11) se presenta la entropía de entrelazamiento S_\uparrow en función de la energía que gana el sistema para formar el singlete ϵ_K para diferentes valores del término de hibridación V . Todas las curvas tienen máximo entrelazamiento $S_\uparrow = 1$, independientemente del término de hibridación V , cuando $\epsilon_K = 0$. En estas condiciones $b_0^2 = 1$ (ver Eq. 2.33), entonces, se prohíbe el estado vacío en la impureza y tenemos la formación del estado singlete entre la impureza y el baño. Por el contrario, al incrementar ϵ_K el entrelazamiento $S_\uparrow \rightarrow 0$ y se presenta mayor peso en el estado vacío de la impureza, siendo así, la probabilidad de formar el singlete entre impureza-baño disminuye.

En la Fig.(2.12) se fijan diferentes términos de hibridación V y se varía la energía del estado localizado ϵ_f . Las curvas tienden rápidamente a un estado máximamente entrelazado $S_\uparrow \rightarrow 1$, siempre y cuando $V \ll -\epsilon_f$

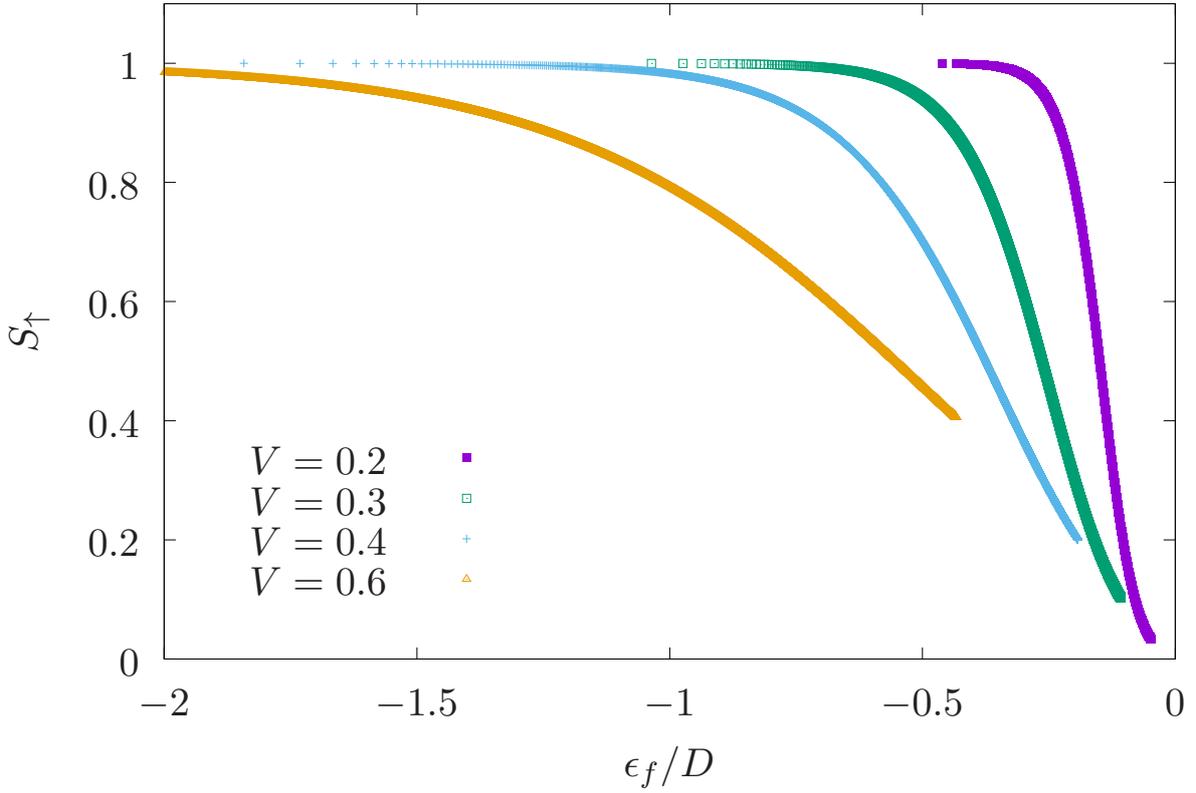


Figura 2.12: Entropía de entrelazamiento S_{\uparrow} para la función de onda variacional de Varma-Yafet vs. ϵ_f (energía del estado localizado) fijando el término de hibridación V . $D = 1$ es el semiancho de banda.

Considerando la energía $\Gamma = \pi V^2 \rho(\epsilon_F)$, que además caracteriza la vida media de un estado de la impureza (\hbar/Γ) en el caso no interactuante ($U = 0$). La entropía se puede describir como:

$$S_{\uparrow} = - \left(\frac{1}{2} + \lambda \right) \log \left(\frac{1}{2} + \lambda \right) - \left(\frac{1}{2} - \lambda \right) \log \left(\frac{1}{2} - \lambda \right) \quad (2.34)$$

con

$$\lambda = \frac{\sqrt{\pi} \sqrt{z(z\pi - 4)}}{2(z\pi + 2)},$$

los autovalores de la matriz densidad 2.29 escrita en función de $z = \frac{\epsilon_K}{\Gamma}$. En la Fig. 2.13 se observa el comportamiento de la entropía en función de ϵ_K/Γ . Esta función es “universal”, ya que sistemas con diferentes valores de ϵ_f , V y densidad de estados en el nivel de Fermi tienen una entropía que solo depende de los parámetros a través de ϵ_K/Γ . Algo similar ocurre en el problema de Kondo con otras cantidades físicas como la susceptibilidad magnética y el calor específico que dan lugar a curvas universales cuando la escala de energía utilizada es ϵ_K (de manera más general, la temperatura de Kondo T_K). En el problema de Kondo \hbar/ϵ_K cuantifica la vida media de un estado en la impureza en el caso interactuante, por lo que la entropía de entrelazamiento solo depen-

dería de la renormalización de dicho tiempo al encender las interacciones. El cociente ϵ_K/Γ está también asociado a la renormalización de la masa de las cuasipartículas en el problema de Kondo que es a su vez una medida muy utilizada, y que se puede obtener experimentalmente, de las correlaciones electrónicas [11].

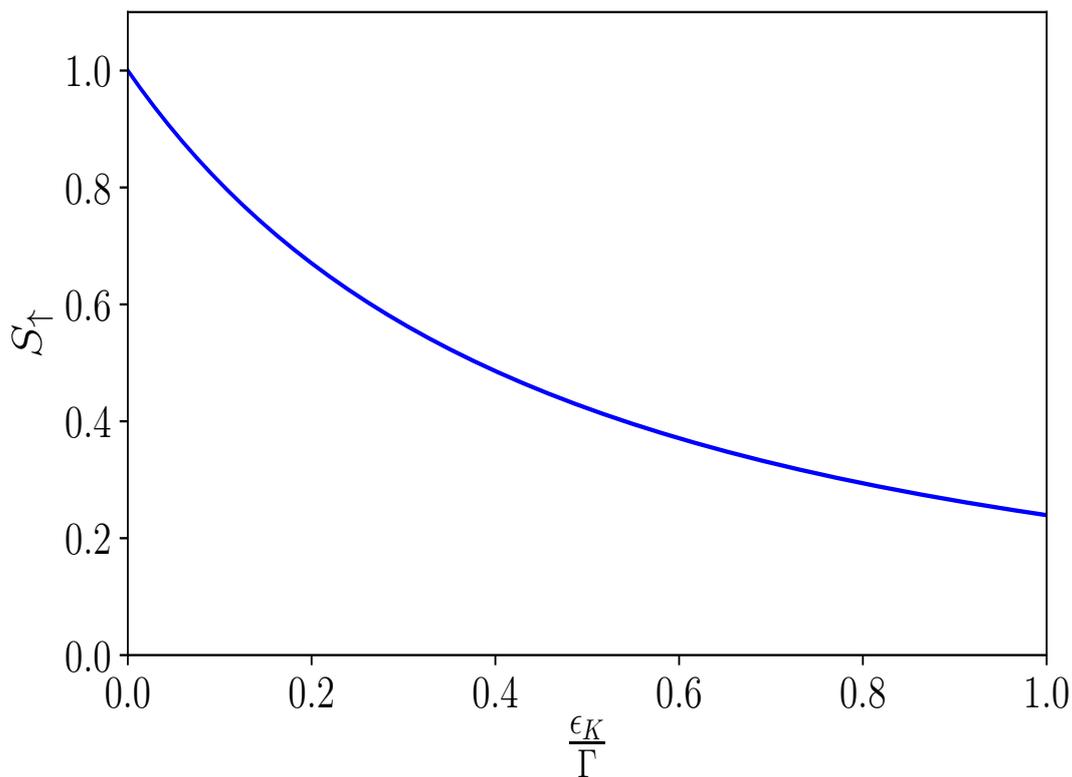


Figura 2.13: Entropía de entrelazamiento S_{\uparrow} para la función de onda variacional de Varma-Yafet en función de $\frac{\epsilon}{\Gamma}$. Donde Γ es el ancho medio de resonancia.

2.2.1. Modelo de Kondo

Considerando la función de onda variacional, de Varma-Yafet en el límite de Kondo $\epsilon_f \rightarrow -\infty$. Por tanto, $b_0 = \frac{1}{\sqrt{2}}$ y $a_0 = 0$ para la función de onda variacional 2.28), i.e., la probabilidad de que este vacío el estado localizado es nula. La matriz densidad tiene la misma forma que en el límite molecular 2.11. Por tanto, la entropía del sistema siempre es 1.

2.3. Expansión variacional de N-grande para sistemas de impurezas magnéticas diluidas en un metal.

En esta sección se introduce un nuevo método variacional [12] que nos permite obtener una aproximación de la energía del estado fundamental de los sistemas que hemos venido estudiando, mediante una expansión en $1/N$, con $N = 2j + 1$ como la degeneración de los posibles grados de libertad m del momento angular total j . El hamiltoniano de Anderson degenerado se puede escribir como:

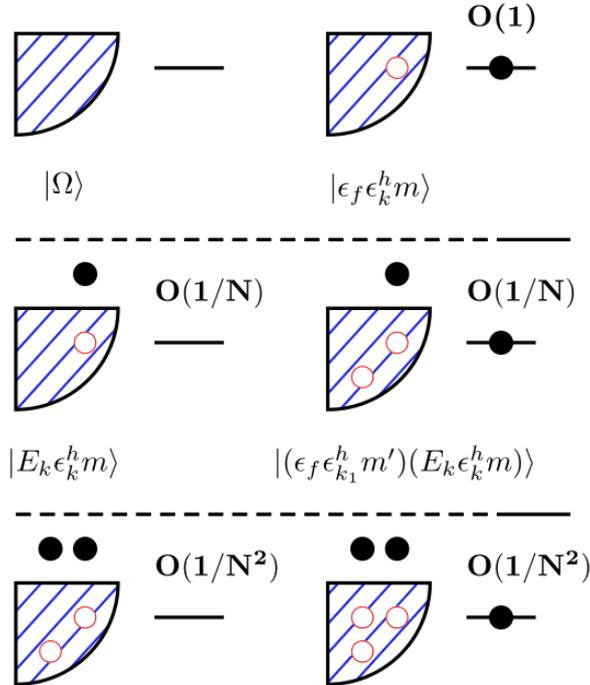


Figura 2.14: Esquema de los estados de la base usada en el cálculo variacional de la energía del estado fundamental (ϵ_{GS}) [11]. Cada fila corresponde al orden en $1/N$ de la contribución en ϵ_{GS} . Los círculos de color negro representan a los electrones, los blancos a los huecos en la banda de conducción y ϵ_f el estado localizado (línea horizontal).

$$\hat{H} = \sum_{k,m} \epsilon_{km} \hat{c}_{km}^\dagger \hat{c}_{km} + \sum_{k,m} V_k (\hat{c}_{km}^\dagger \hat{f}_m + h.c.) + U \sum_{m>m'} \hat{n}_m \hat{n}_{m'} + \sum_{\sigma} \epsilon_{f\sigma} \hat{f}_m^\dagger \hat{f}_m, \quad (2.35)$$

m es el número cuántico magnético que varía entre $\{-j, -j + 1, \dots, j - 1, j\}$, $\epsilon_{km}(\epsilon_{f\sigma})$ las energías de los electrones de conducción (impureza) con operadores de creación $\hat{c}_{km}^\dagger(\hat{f}_m^\dagger)$ y operadores número $\hat{n}_{km}(\hat{n}_m)$.

En el límite de interacción fuerte $U \rightarrow \infty$ el hamiltoniano 2.35 se puede expresar sin el

término de interacción coulombiana,

$$\hat{H} = \sum_{k,m} \epsilon_{km} \hat{c}_{km}^\dagger \hat{c}_{km} + \sum_{k,m} V_k (\hat{c}_{km}^\dagger |0\rangle \langle m| + h.c.) + \sum_{\sigma} \epsilon_{f\sigma} |m\rangle \langle m|, \quad (2.36)$$

así las únicas posibles configuraciones en la impureza son el vacío $|-\rangle_f$ y el ocupado por un solo electrón con proyección del momento angular m .

A continuación, mediante teoría de perturbaciones detallamos algunos cálculos necesarios para poder entender el motivo por el cual se consideró $1/N$ como parámetro de expansión, lo cual no es obvio porque N no aparece explícitamente en el hamiltoniano 2.36.

Se sabe a ciencia cierta que el estado fundamental exacto para el hamiltoniano de Anderson es un singlete [13], por tanto, se puede tomar la esfera de Fermi llena $|\Omega\rangle$ (estado singlete con el estado localizado vacío, ver Fig. 2.14) como punto de arranque del cálculo variacional. El siguiente estado singlete es producto de aplicar el término de hibridación en $|\Omega\rangle$, resultando en estados de la forma $|\epsilon_f \epsilon_k^h m\rangle$ (estado localizado ocupado por un electrón y un hueco en la esfera de Fermi). La combinación lineal de estos estados corresponde a la función variacional de Varma Yafet 2.19 para $N = 2$.

Luego, calculando la contribución para cada uno de estos estados a segundo orden en la energía del estado fundamental ϵ_{GS} del hamiltoniano de Anderson degenerado en el límite de $U \rightarrow \infty$, podemos determinar el orden en $1/N$ al que corresponde cada contribución.

La corrección a segundo orden en la energía por el estado $|\Omega\rangle$ se calcula vía

$$\Delta E_0 = \sum_N \frac{\langle \Omega | \hat{H}_{mix} | M \rangle \langle M | \hat{H}_{mix} | \Omega \rangle}{-E_M},$$

donde H_{mix} es el término de hibridación y M todos los estados del sistema distintos de $|\Omega\rangle$. Las únicas contribuciones vienen de los estados electrón-hueco $|\epsilon_f \epsilon_k^h m\rangle$ (Fig. 2.14).

$$\Delta E_0 = \sum_{km} |V_k|^2 \frac{\langle \Omega | (|0\rangle \langle m| \hat{c}_{km}^\dagger) |\epsilon_f \epsilon_k m\rangle \langle \epsilon_f \epsilon_k m| (|m\rangle \langle 0| \hat{c}_{km}) | \Omega \rangle}{-(\epsilon_f - \epsilon_k)}$$

$$\Delta E_0 = \sum_k \frac{N |V_k|^2}{\epsilon_k - \epsilon_f} = -\frac{\Gamma N}{\pi} \ln \frac{D}{|\epsilon_f|}$$

Suponiendo la banda de conducción con un semiancho $D \gg |\epsilon_f|$ y una hibridación

30 Entrelazamiento en los modelos de impureza cuántica de Anderson y Kondo

constante. La corrección resulta proporcional a $N\Gamma$. Del mismo modo, la contribución de los estados $|\epsilon_f \epsilon_k m\rangle$ es

$$\Delta E_m = -\frac{\Gamma}{\pi} \ln \frac{D}{|\epsilon_f|},$$

para este caso los estados M que presentan una contribución son de la forma $|E_K \epsilon_k m\rangle$ (ver Fig. 2.14).

En el límite de $N \rightarrow \infty$, se fija ΓN para evitar la divergencia de la contribución del estado $|\Omega\rangle$ en la energía, por tanto, la contribución del estado $|E_K \epsilon_k m\rangle$ se vuelve despreciable. La función de onda exacta del estado fundamental a orden $O(1)$ (2.37) en la expansión $1/N$ se escribe como

$$|\Psi_{GS}^{(1)}\rangle = A \left[|\Omega\rangle + \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{k_1 m}^{occ} \alpha_{k_1} |\epsilon_f \epsilon_{k_1}^h m\rangle \right]. \quad (2.37)$$

Este estado coincide con la función de onda variacional de Varma Yafet para degeneración $N = 2$.

Los estados de mayor orden construidos a partir de la aplicación del término de hibridación en $|\Omega\rangle$ además del primero son de mayor orden en $1/N$. Estos estados se muestran de manera esquemática en (ver Fig. 2.14), y también se indica el orden en $1/N$ al cual contribuyen en la energía del estado fundamental. Por ejemplo, los estados que deben ser incluidos para el orden $O(1/N)$ son $|E_K \epsilon_k^h m\rangle$ y $|\epsilon_f \epsilon_{k_1}^h m'\rangle (E_k \epsilon_k^h m)\rangle$, corresponden a la segunda fila de la Fig. 2.14.

2.3.1. Entropía de entrelazamiento de la función variacional del estado fundamental $|\Psi_{GS}^{(1)}\rangle$

Aplicando el cambio de base $\hat{c}_{om} = \frac{1}{b_0} \sum_{k_1} \alpha_{k_1} \hat{c}_{k_1 m}$ y $b_0^2 = \sum_{k_1} \alpha_{k_1}^2$ como factor de normalización. La función de onda (2.37) se puede escribir como

$$|\Psi_{GS}^{(1)}\rangle = a_0 \left(|\Omega\rangle + \frac{b_0}{\sqrt{N}} \sum_m \hat{c}_{f m}^\dagger \hat{c}_{om} |\Omega\rangle \right), \quad (2.38)$$

Para la partición del espacio total de Hilbert $\mathcal{H} = \mathcal{H}_{m=1} \otimes \mathcal{H}_{m \neq 1}$. La matriz densidad reducida $\rho_{m=1} = \text{Tr}_{m \neq 1} \rho$ se calcula trazando sobre los estados con momento angular iónico $m = 1$. La base de estados con $m = 1$ es $\{ |\tilde{1}\rangle, |\tilde{0}\rangle \}$ con $|\tilde{1}\rangle = \hat{c}_{f, m=1}^\dagger |0\rangle_1$ y $|\tilde{0}\rangle = \hat{c}_{o, m=1}^\dagger |0\rangle_1$ donde $|0\rangle_1$ es el estado vacío de la impureza o baño con proyección $m = 1$. La matriz de densidad tiene la forma

$$\rho_{m=1} = a_0^2 \begin{pmatrix} 1 + \frac{b_0^2}{N} & \frac{b_0\sqrt{N-1}}{\sqrt{N}} \\ \frac{b_0\sqrt{N-1}}{\sqrt{N}} & \frac{b_0^2(N-1)}{N} \end{pmatrix}, \quad (2.39)$$

para $N \rightarrow \infty$, tenemos $S_{m=1} = 0$, por tanto, la contribución de un único momento angular m es despreciable para el límite de N grande.

Considerando la partición $\mathcal{H} = \mathcal{H}_{m \leq 0} \otimes \mathcal{H}_{m > 0}$ y reescribiendo la función de onda (2.37) nos queda

$$\begin{aligned} |\Psi_{GS}^{(1)}\rangle = & a_0 |\Omega_{m \leq 0}\rangle \otimes |\Omega_{m > 0}\rangle + \frac{a_0 b_0}{\sqrt{N}} \left(|\Omega_{m \leq 0}\rangle \otimes \sum_{m > 0} \hat{c}_{fm}^\dagger \hat{c}_{om} |\Omega_{m > 0}\rangle + \right. \\ & \left. \left(\sum_{m \leq 0} \hat{c}_{fm}^\dagger \hat{c}_{om} |\Omega_{m \leq 0}\rangle \right) \otimes |\Omega_{m > 0}\rangle \right) \end{aligned} \quad (2.40)$$

Donde, la esfera de Fermi llena se puede escribir como el producto tensorial de la parte de la esfera con momento angular estrictamente negativo (incluyendo al cero) y positivo, $|\Omega\rangle = |\Omega_{m \leq 0}\rangle \otimes |\Omega_{m > 0}\rangle$ con $|\Omega_{m \leq 0}\rangle = \prod_{\epsilon_k \leq \epsilon_F} \prod_{m \leq 0} \hat{c}_{km}^\dagger |0\rangle$ y $|\Omega_{m > 0}\rangle = \prod_{\epsilon_k \leq \epsilon_F} \prod_{m > 0} \hat{c}_{km}^\dagger |0\rangle$.

Aplicamos el cambio de base con $\omega = \sqrt{\frac{2}{N}}$ como factor de normalización, $|\delta_{m \leq 0}\rangle = \omega \sum_{m \leq 0} \hat{c}_{fm}^\dagger \hat{c}_{om} |\Omega_{m \leq 0}\rangle$ y $|\delta_{m > 0}\rangle = \omega \sum_{m > 0} \hat{c}_{fm}^\dagger \hat{c}_{om} |\Omega_{m > 0}\rangle$. La función (2.40) se puede escribir como

$$|\Psi_{GS}^{(1)}\rangle = a_0 |\Omega_{m \leq 0}\rangle |\Omega_{m > 0}\rangle + \frac{a_0 b_0}{\sqrt{2}} \left(|\Omega_{m \leq 0}\rangle \otimes |\delta_{m > 0}\rangle + |\delta_{m \leq 0}\rangle \otimes |\Omega_{m > 0}\rangle \right). \quad (2.41)$$

La paridad de N es irrelevante en el límite de N grande debido a la contribución nula de un estado con un único momento angular m' en la entropía de entrelazamiento. Por tanto la supresión de los estados con $m = 0$ se justifica. Para calcular la matriz densidad reducida $\rho_{m > 0}$, usamos los estados $|\Omega_{m < 0}\rangle$ y $|\delta_{m < 0}\rangle$ como base ortonormal.

$$\rho_{m > 0} = \text{Tr}_{m < 0} |\Psi_{GS}^{(1)}\rangle \langle \Psi_{GS}^{(1)}| = a_0^2 \begin{pmatrix} 1 + \frac{b_0^2}{2} & \frac{b_0}{\sqrt{2}} \\ \frac{b_0}{\sqrt{2}} & \frac{b_0^2}{2} \end{pmatrix}, \quad (2.42)$$

coincide con el caso de degeneración $N = 2$. Como podemos notar, pese a considerar la

32 Entrelazamiento en los modelos de impureza cuántica de Anderson y Kondo

solución exacta del estado fundamental a orden $O(1)$, la entropía de entrelazamiento aún nos sigue dando $S_{m>0} \leq 1$.

Se realizó el mismo cálculo variacional de la energía del singlete 2.38, como en la sección de Varma-Yafet. Las ecuaciones variacionales que permiten obtener los coeficientes a_0 , b_k y la energía de Kondo ϵ_K son:

$$b_k = \frac{\sqrt{N}V_k}{-\epsilon_K + \epsilon_k} \quad (2.43)$$

$$\epsilon_f - \epsilon_K = \frac{N}{\pi} \int_{-D}^0 d\omega \frac{\Gamma(\omega)}{-\epsilon_K + \omega}, \quad (2.44)$$

Como se puede ver, la única diferencia con los cálculos a partir de la función variacional de Varma-Yafet es el término de degeneración del momento angular N . Definiendo $Z = \pi\epsilon_K/N\Gamma$, tenemos $b_0^2 = N\Gamma \int_{-D}^0 \frac{d\omega}{(-\epsilon_K + \omega)^2} \sim \frac{N\Gamma}{\pi\epsilon_K} \sim \frac{1}{Z}$ y de la relación de normalización de la función de onda se tiene $a_0^2 = (1 + b_0^2)^{-1}$, los cuales nos permitirán escribir la matriz densidad $\rho_{m>0}$ unívocamente en función de Z . Para $Z \ll 1$ la función de S_\uparrow se puede escribir en función de Z^4 como:

$$S_\uparrow \sim 1 - \frac{Z^4}{\ln(4)}. \quad (2.45)$$

2.3.2. Función variacional del estado fundamental a orden $O(1/N)$

La función variacional del estado fundamental a orden $O(1/N)$ se puede representar tomando los estados de la primera y segunda fila (ver Fig. 2.14) como,

$$\begin{aligned} |\Psi_o^{(1/N)}\rangle = A \left(& |\Omega\rangle + \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{k_1 m}^{occ} \left(\alpha_{k_1} |\epsilon_f \epsilon_{k_1} m\rangle + \sum_{k_2}^{unocc} \left(\beta_{k_1 k_2} |E_{k_2} \epsilon_{k_1} m\rangle \right. \right. \right. \\ & \left. \left. \left. \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{k_3 m'}^{occ} \gamma_{k_1 k_2 k_3} |(\epsilon_f \epsilon_{k_3} m)(E_{k_2} \epsilon_{k_1} m')\rangle \right) \right) \right). \end{aligned} \quad (2.46)$$

Donde, las sumatorias son únicamente para los estados con $\epsilon_{k_1}, \epsilon_{k_3}$ ocupados y ϵ_{k_2} desocupados del baño de conducción. Los nuevos estados que se incorporaron son, $|E_{k_2} \epsilon_{k_1}^h m\rangle = \hat{c}_{k_2 m}^\dagger \hat{c}_{k_1 m} |\Omega\rangle$ (estado electrón-hueco) y $|(\epsilon_f \epsilon_{k_3}^h m)(E_{k_2} \epsilon_{k_1}^h m')\rangle$ (estado con dos huecos en el baño de conducción, un electrón en el nivel de la impureza y el otro en la región con energía positiva del baño de conducción) con $E_{k_2} > \epsilon_F$. Los parámetros variacionales $\alpha_{k_2}, \beta_{k_1 k_2}$ y $\gamma_{k_1 k_2 k_3}$ permiten construir completamente el estado fundamental. Estos están determinados por la minimización de la función

$$\langle \Psi_o^{(1/N)} | \hat{H} | \Psi_o^{(1/N)} \rangle - E^0 \left(\langle \Psi_o^{(1/N)} | \Psi_o^{(1/N)} \rangle - 1 \right), \quad (2.47)$$

donde E^0 es un multiplicador de Lagrange que permite asegurar la normalización. Minimizando con respecto a A encontramos que E^0 es la energía del estado fundamental,

$$E^0 = \frac{\langle \Psi_o^{(1/N)} | \hat{H} | \Psi_o^{(1/N)} \rangle}{\langle \Psi_o^{(1/N)} | \Psi_o^{(1/N)} \rangle}. \quad (2.48)$$

Para simplificar el problema, tomamos el parámetro $\gamma_{k_1 k_2 k_3} = 0$, el nivel de Fermi $\epsilon_F = 0$ y el término de hibridación $V_k = V$ independiente de k . Por tanto, al evaluar (2.48) usando (2.46) y (2.47) encontramos la energía del estado fundamental considerando el primer término de orden $O(1/N)$,

$$E^0 = \sum_{k_1}^{occ} \alpha_{k_1}^2 (\epsilon_f - \epsilon_{k_1}) + \sum_{k_1}^{occ} \sum_{k_2}^{unocc} \beta_{k_1 k_2}^2 (E_{k_2} - \epsilon_{k_1}) + 2V\sqrt{N} \sum_{k_1}^{occ} \alpha_{k_1} + V \sum_{k_1}^{occ} \sum_{k_2}^{unocc} \alpha_{k_1} \beta_{k_1 k_2}. \quad (2.49)$$

Por último, minimizando 2.47 con respecto a α_{k_1} y $\beta_{k_1 k_2}$ obtenemos sus ecuaciones variacionales,

$$(\epsilon_f - \epsilon_{k_1} - \lambda) \alpha_{k_1} + \sqrt{N} V + V \sum_{k_2}^{unocc} \beta_{k_1 k_2} = 0 \quad (2.50a)$$

$$(E_{k_2} - \epsilon_{k_1} - \lambda) \beta_{k_1 k_2} + V \alpha_{k_1} = 0. \quad (2.50b)$$

Despejando los parámetros del sistema de ecuaciones anterior, se pueden determinar numéricamente los parámetros α_{k_1} y $\beta_{k_1 k_2}$ a partir de las siguientes expresiones.

$$\alpha_{k_1} = \frac{\sqrt{N} V}{\epsilon_K + \epsilon_{k_1} - \epsilon_f - \frac{V^2}{4} \sum_{k_2}^{unocc} \frac{1}{\epsilon_{k_1} + \epsilon_K - E_{k_2}}} \quad (2.51)$$

$$\beta_{k_1 k_2} = \frac{V \alpha_{k_1}}{2(\epsilon_{k_1} + \epsilon_K - E_{k_2})} \quad (2.52)$$

2.3.3. Entropía de entrelazamiento de la función variacional del estado fundamental $|\Psi_{GS}^{(1/N)}\rangle$

Determinamos una expresión analítica para la entropía de entrelazamiento descartando los estados que acompañan al parámetro $\gamma_{k_1 k_2 k_3}$, dado que nos impedían realizar un cambio de base apropiado que nos facilitara los cálculos.

34 Entrelazamiento en los modelos de impureza cuántica de Anderson y Kondo

Reescribiendo la función variacional 2.46 y despreciando el parámetro γ

$$\begin{aligned}
 |\Psi_{GS}^{(1/N)}\rangle = & A \left(|\Omega_{m \leq 0}\rangle \otimes |\Omega_{m > 0}\rangle + \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{k_1}^{occ} \alpha_{k_1} \left(|\Omega_{m \leq 0}\rangle \otimes \left(\sum_{m > 0} \hat{c}_{fm}^\dagger \hat{c}_{km} |\Omega_{m > 0}\rangle \right) + \right. \\
 & \left. \left(\sum_{m \leq 0} \hat{c}_{fm}^\dagger \hat{c}_{km} |\Omega_{m \leq 0}\rangle \right) \otimes |\Omega_{m > 0}\rangle \right) + \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{k_1}^{occ} \sum_{k_2}^{unocc} \beta_{k_1 k_2} \left(|\Omega_{m \leq 0}\rangle \otimes \right. \\
 & \left. \left(\sum_{m > 0} \hat{c}_{k_2 m}^\dagger \hat{c}_{k_1 m} |\Omega_{m > 0}\rangle \right) + \left(\sum_{m \leq 0} \hat{c}_{k_2 m}^\dagger \hat{c}_{k_1 m} |\Omega_{m \leq 0}\rangle \right) \otimes |\Omega_{m > 0}\rangle \right). \tag{2.53}
 \end{aligned}$$

A continuación, se define un cambio de base con $\xi = \frac{A}{\sqrt{2}} \sqrt{\sum_{k_1} \alpha_{k_1}^2 + \sum_{k_1 k_2} \beta_{k_1 k_2}^2}$ y $1 = A^2 + 2\xi^2$ condiciones necesarias de normalización.

$$|\varphi_{m < 0}\rangle = \frac{A}{\sqrt{N}\xi} \left(\sum_{k_1} \alpha_{k_1} \sum_{m < 0} \hat{c}_{fm}^\dagger \hat{c}_{k_1 m} |\Omega_{m < 0}\rangle + \sum_{k_1 k_2} \beta_{k_1 k_2} \sum_{m < 0} \hat{c}_{k_2 m}^\dagger \hat{c}_{k_1 m} |\Omega_{m < 0}\rangle \right) \tag{2.54}$$

$$|\varphi_{m > 0}\rangle = \frac{A}{\sqrt{N}\xi} \left(\sum_{k_1} \alpha_{k_1} \sum_{m > 0} \hat{c}_{fm}^\dagger \hat{c}_{k_1 m} |\Omega_{m > 0}\rangle + \sum_{k_1 k_2} \beta_{k_1 k_2} \sum_{m > 0} \hat{c}_{k_2 m}^\dagger \hat{c}_{k_1 m} |\Omega_{m > 0}\rangle \right) \tag{2.55}$$

La nueva base permite reescribir $|\Psi_{GS}^{(1/N)}\rangle$

$$|\Psi_{GS}^{(1/N)}\rangle = A |\Omega_{m > 0}\rangle \otimes |\Omega_{m < 0}\rangle + \xi \left(|\Omega_{m > 0}\rangle \otimes |\varphi_{m < 0}\rangle + |\varphi_{m > 0}\rangle \otimes |\Omega_{m < 0}\rangle \right) \tag{2.56}$$

Esto permite escribir la matriz densidad $\rho_{m < 0}$ en una base más reducida $\{|\Omega_{m < 0}\rangle, |\Psi_{m < 0}\rangle\}$,

$$\rho_{m > 0} = \begin{pmatrix} 1 - \xi^2 & \xi \sqrt{1 - 2\xi^2} \\ \xi \sqrt{1 - 2\xi^2} & \xi^2 \end{pmatrix} \tag{2.57}$$

Cuando $\xi \rightarrow \frac{1}{\sqrt{2}}$, ocasiona que $A \rightarrow 0$ y la matriz densidad $\rho_{m > 0}$ se vuelve una matriz diagonal con términos igual a $1/2$, por tanto, resulta en un estado máximamente entrelazado $S_{m > 0} \rightarrow 1$. Esto también se puede ver a partir de 2.56, donde, $A \rightarrow 0$ implica mayor peso en el estado entrelazado que involucra los estados del cambio de base $|\varphi\rangle$

Como veremos en el siguiente capítulo, los datos numéricos presentan valores de entrelazamiento, usando la partición de espín, mayores que 1. Los cálculos realizados en

esta sección ($\gamma = 0$) y las anteriores no nos permiten explicar los resultados numéricos para el entrelazamiento. Pero, incluyendo los términos con $\gamma \neq 0$, se calcularon valores mayores que 1 en el entrelazamiento considerando un sistema finito. Entonces, las correlaciones que faltaban para explicar los resultados numéricos de S_{\uparrow} corresponden a considerar una función variacional del estado fundamental a partir del orden $O(1/N)$ en adelante.

Hasta el momento, solo se realizaron cálculos para determinar el estado fundamental del modelo de Anderson y Kondo realizando aproximaciones de banda angosta en la banda de conducción. También se empleó un método perturbativo en $1/N$ para el modelo de Anderson, obteniendo funciones variacionales para el estado fundamental, que hasta un cierto orden en $1/N$ nos permitía mediante un cambio de base adecuado, obtener una expresión analítica para S_{\uparrow} . En el modelo de Kondo no se pueden realizar cálculos perturbativos en J , debido a la presencia de una singularidad en su temperatura de Kondo $T_K \propto e^{-1/J\rho}$ [14] y esto dificulta la medición de las propiedades termodinámicas y de transporte porque presentan una dependencia con la temperatura de la forma $\ln(T/T_K)$ [15].

Para determinar el estado fundamental mediante métodos perturbativos en el modelo de Kondo, conviene hacerlo para $1/J$, lo que nos permitirá determinar analíticamente una función de la entropía de entrelazamiento S_{\uparrow} en función del parámetro de interacción de acoplamiento J del modelo. En el siguiente y último capítulo se muestra detalle de los cálculos realizados.

2.4. Entrelazamiento en el modelo de Kondo a partir de teoría de perturbaciones para J grande

En esta sección, se obtiene una expresión para la entropía de entrelazamiento en la partición de espín, aplicando teoría de perturbaciones para J grande. De esta manera, se puede determinar la función de onda para el estado fundamental del hamiltoniano de Kondo.

Primeramente, modelamos el baño de conducción como una cadena tight-binding de L sitios, en el límite de J grande la impureza y el primer sitio de la cadena forman un estado singlete desacoplado de la cadena. El estado fundamental del sistema es un producto directo del estado singlete $|S\rangle$ y del mar de Fermi lleno para el resto de la cadena $|\Omega\rangle$. En este caso, el entrelazamiento de espín está dado por el estado singlete, siendo $S_{\uparrow}(J \rightarrow \infty) = 1$.

Para obtener el estado fundamental mediante teoría de perturbaciones dado un t/J

36 Entrelazamiento en los modelos de impureza cuántica de Anderson y Kondo

finito, es conveniente escribir el hamiltoniano como $H = H_K + H_e + H'$, donde

$$H_K = \mathcal{J} \mathbf{S}_f \cdot \mathbf{S}_1, \quad (2.58)$$

$$H_e = -t \sum_{i=2}^L \sum_{\sigma=\{\uparrow,\downarrow\}} \left(c_{i,\sigma}^\dagger c_{i+1,\sigma} + \text{H.c.} \right), \quad (2.59)$$

y considerar

$$H' = -t \sum_{\sigma=\{\uparrow,\downarrow\}} \left(c_{1,\sigma}^\dagger c_{2,\sigma} + \text{H.c.} \right) \quad (2.60)$$

como una perturbación.

Realizando la transformación al espacio k , la perturbación Eq.(2.60) se puede reescribir como

$$H' = \frac{-2t}{\sqrt{2L}} \sum_{\sigma=\{\uparrow,\downarrow\}} \sum_k \sin(ka) \left(c_{1,\sigma}^\dagger c_{k,\sigma} + \text{H.c.} \right), \quad (2.61)$$

con $k = \frac{n\pi}{aL}$ para $n = \{1, 2, \dots, L-1\}$. A primer orden en t/J la función de onda del estado fundamental es

$$\begin{aligned} |\Psi_{\text{GS}}\rangle^{(1)} &= |\Psi_{\text{GS}}\rangle^{(0)} - \frac{t}{\sqrt{L}} \sum_k^{\text{unocc}} \frac{\sin(ka)}{-\frac{3}{4}\mathcal{J} - E_k} \left(c_{f\uparrow}^\dagger c_{k\downarrow}^\dagger - c_{f\downarrow}^\dagger c_{k\uparrow}^\dagger \right) |\Omega\rangle \\ &+ \frac{t}{\sqrt{L}} \sum_k^{\text{occ}} \frac{\sin(ka)}{-\frac{3}{4}\mathcal{J} + E_k} \left(c_{f\uparrow}^\dagger c_{1\uparrow}^\dagger c_{1\downarrow}^\dagger c_{k\uparrow} + c_{f\downarrow}^\dagger c_{1\uparrow}^\dagger c_{1\downarrow}^\dagger c_{k\downarrow} \right) |\Omega\rangle, \end{aligned} \quad (2.62)$$

Es conveniente realizar el siguiente cambio de base

$$\tilde{c}_{\alpha,\sigma} = \frac{1}{\lambda_\alpha} \frac{2}{\sqrt{L}} \sum_k^{\text{occ}} \frac{\sin(ka)}{1 - \frac{4E_k}{3\mathcal{J}}} c_{k,\sigma} \quad (2.63)$$

y

$$\tilde{c}_{\beta,\sigma}^\dagger = \frac{1}{\lambda_\beta} \frac{2}{\sqrt{L}} \sum_k^{\text{unocc}} \frac{\sin(ka)}{1 + \frac{4E_k}{3\mathcal{J}}} c_{k,\sigma}^\dagger \quad (2.64)$$

con λ_α y λ_β constantes de normalización. Para el caso de banda semi-llena (simetría electrón- hueco) $\lambda_\alpha, \lambda_\beta \rightarrow 1$ para el orden más bajo en t/J .

Por tanto, la función de onda Eq. (2.62) se escribe

$$|\Psi_{\text{GS}}\rangle^{(1)} = A \left(|\Psi_{\text{GS}}\rangle^{(0)} - \frac{2t}{3J} \left[(c_{f\uparrow}^\dagger \tilde{c}_{\beta\downarrow}^\dagger - c_{f\downarrow}^\dagger \tilde{c}_{\beta\uparrow}^\dagger) + (c_{f\uparrow}^\dagger c_{1\uparrow}^\dagger c_{1\downarrow}^\dagger \tilde{c}_{\alpha\uparrow} + c_{f\downarrow}^\dagger c_{1\uparrow}^\dagger c_{1\downarrow}^\dagger \tilde{c}_{\alpha\downarrow}) \right] |\Omega\rangle \right), \quad (2.65)$$

con $A = \frac{1}{\sqrt{1+(\frac{4t}{3J})^2}}$ por condición de normalización. La matriz de densidad resulta

$$\rho_\uparrow = \frac{1}{1 + \left(\frac{4t\lambda}{3J}\right)^2} \begin{pmatrix} \frac{1}{2} + \frac{4}{9} \frac{t^2}{J^2} \lambda^2 & \frac{\sqrt{2}}{3} \frac{t}{J} \lambda & 0 & 0 \\ \frac{\sqrt{2}}{3} \frac{t}{J} \lambda & \frac{4}{9} \frac{t^2}{J^2} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{2} + \frac{4}{9} \frac{t^2}{J^2} \lambda^2 & \frac{\sqrt{2}}{3} \frac{t}{J} \lambda \\ 0 & 0 & \frac{\sqrt{2}}{3} \frac{t}{J} \lambda & \frac{4}{9} \frac{t^2}{J^2} \end{pmatrix}, \quad (2.66)$$

el cual tiene autovalores doblemente degenerados: $\left\{ 2 \left(\frac{2}{3} \frac{t}{J}\right)^4, \frac{1}{2} - 2 \left(\frac{2}{3} \frac{t}{J}\right)^4 \right\}$, al orden más bajo no-trivial en t/J . Dado que empezamos con una corrección a primer orden en la función de onda, esto indica que necesitamos considerar un mayor orden de correcciones en la función de onda para obtener las expresiones exactas para los autovalores de cuarto orden. Sin embargo, la siguiente expresión deducida de estos autovalores

$$S_\uparrow = 1 + c_0 \log_2(J/t) / \left(\frac{J}{t}\right)^4, \quad (2.67)$$

describe adecuadamente la entropía de entrelazamiento en el régimen de J grande. Más adelante, utilizaremos esta función para ajustar los datos numéricos en el régimen de J/D grande obtenidos por el grupo de renormalización de matriz densidad DMRG.

Capítulo 3

Cálculos numéricos de DMRG para los modelos de la impureza de Anderson y Kondo

“A method is more important than a discovery, since the right method will lead to new and even more important discoveries”
— Lev Landau

En este capítulo, comparamos los resultados analíticos aproximados obtenidos en el capítulo anterior con los resultados numéricos del Grupo de Renormalización de Matriz Densidad (DMRG) [16]. Se calcula la entropía de entrelazamiento de espín S_{\uparrow} en los modelos de Anderson y Kondo. En el primero, se utilizó el DMRG implementando el algoritmo de sistema finito para calcular S_{\uparrow} en función del término de interacción U y fijando simetría electrón-hueco, este algoritmo permite cálculos más precisos en la entropía de entrelazamiento. Se realizó un análisis del error asociado a estos cálculos y se determinó la presencia de universalidad de S_{\uparrow} en función de la renormalización de la masa de las cuasipartículas. Por último, para el modelo de Kondo, se utilizó el algoritmo de DMRG para sistema infinito y finito para calcular la entropía de espín S_{\uparrow} en función del término de acoplamiento de interacción J .

3.1. Grupo de renormalización de la matriz densidad DMRG

El método DMRG fue desarrollado por S.White [16] con la idea de solucionar las limitaciones numéricas que aparecían aplicando el método de renormalización RG a sistemas

fuertemente correlacionados en 1D. Se ha convertido en uno de los métodos más eficientes, basándose de la diagonalización exacta, para calcular de manera precisa el estado fundamental y sus propiedades físicas. Por ejemplo, una cadena de espín 1/2 de tamaño N , posee 2^N grados de libertad, en consecuencia, su espacio de Hilbert crece exponencialmente con el tamaño y resulta desfavorable para el proceso de diagonalizar, siendo esta la parte del algoritmo que consume más tiempo. Por este motivo, se introduce el concepto de renormalización, que nos permite reducir los grados de libertad efectivos y considerar solo los más importantes para el estado fundamental. De esta manera, el concepto de renormalización convierte un problema de complejidad exponencial en uno de complejidad lineal con el tamaño del sistema.

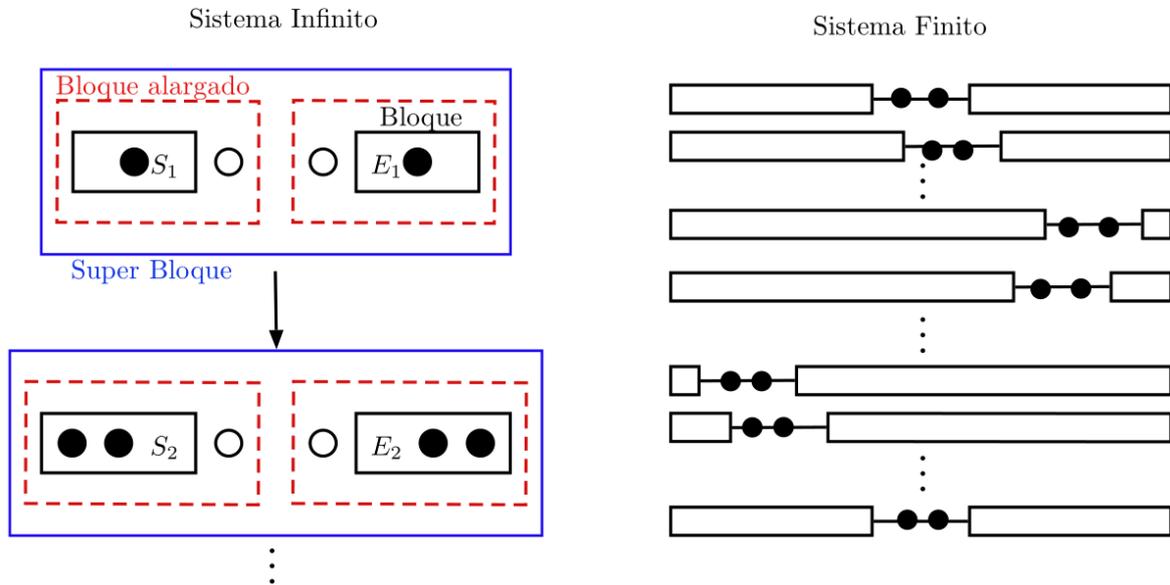


Figura 3.1: Esquema de los algoritmos de DMRG. A la derecha se tiene el algoritmo de sistema infinito. En la primera iteración se crece el bloque S_1 y E_1 , se forma el superbloque, se determina el estado fundamental y se renormalizan los operadores de cada nuevo Bloque considerando los m autoestados de más baja energía. En la izquierda se presenta el algoritmo de sistema finito, se realizan barridos tanto a la derecha como izquierda partiendo del estado final del algoritmo de sistema infinito.

El método de RG [17] parte de una pequeña parte de un sistema cuántico (*bloque* B , tamaño L que vive en un espacio de Hilbert m -dimensional) que se pueda resolver de manera exacta, en cada iteración se agrega un bloque y uno obtiene un sistema compuesto de 2 bloques (tamaño $2L$) a partir de un hamiltoniano que describe la interacción entre dos bloques idénticos. Entonces, uno proyecta la representación del nuevo sistema (dimensión m^2) al subespacio generado por los m -autoestados de más baja energía, en consecuencia, cada operador se debe proyectar a la nueva base m -dimensional y se obtiene una nueva representación truncada. Se repite hasta llegar al tamaño deseado del sistema. DMRG sigue la misma idea, pero, empieza con dos bloques S_1 (sistema) y E_1 (entorno) Fig. 3.1 y se agregan dos sitios intermedios en

cada iteración. Se añade un sitio a cada bloque y se construye un *bloque alargado*, luego, agregando el hamiltoniano de interacción entre bloques se forma un *superbloque* con su respectivo hamiltoniano total que describe el sistema global. Finalmente, esta matriz global es la que se debe diagonalizar para encontrar el estado fundamental. El bloque E, actúa como el entorno, que permite llegar al límite termodinámico del sistema.

El único precio de usar DMRG, implica un incremento en la demora del crecimiento del sistema con el número de iteraciones del algoritmo. Existen dos algoritmos DMRG de sistema infinito y finito Fig. 3.1 [18]. El primero coincide con lo explicado anteriormente, se crece el sistema hasta el tamaño deseado y finaliza el algoritmo. Entre tanto el algoritmo de sistema-finito realiza barridos manteniendo fijo el tamaño del sistema. Toma como punto de partida el último *superbloque* seleccionado de longitud L_{max} , obtenido de aplicar el algoritmo de sistema infinito. Los barridos se refieren a aplicar los pasos del DMRG de sistema-infinito, donde, un solo bloque incrementa su tamaño y el otro lo reduce, estos a la vez permiten mayor precisión en los resultados. Es importante recalcar que valores grandes de m nos permiten obtener resultados exactos, pero eso compromete a un incremento del costo computacional [19].

A continuación, se implementó el DMRG (proporcionado por Daniel García) para trabajar con modelos de impureza magnética de Anderson y Kondo. Para el modelo de Anderson se mapearon los modelos a una cadena de tight-binding lineal, con la impureza en un extremo. Se modeló el baño electrónico considerando una cadena semi-llena de tamaño L , con hamiltoniano A.1, con un término de *hopping* a primeros vecinos $t = 0,5$, por tanto, un semi-ancho de banda de conducción $D = 1$. Se obtuvo la energía y la entropía de entrelazamiento del estado fundamental para la partición $\mathcal{H} = \mathcal{H}_\uparrow \otimes \mathcal{H}_\downarrow$ usando dos configuraciones que nos permitieron obtener mayor precisión en el cálculo de correspondientes propiedades físicas del estado fundamental.

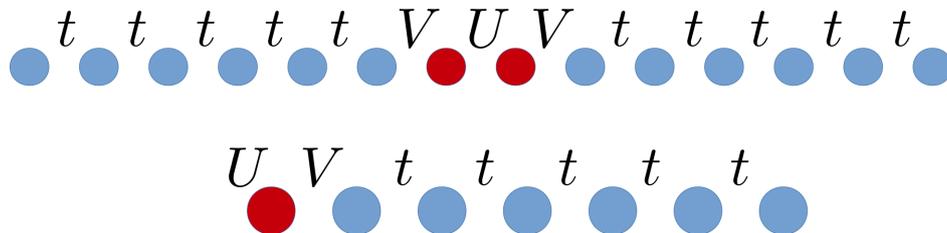


Figura 3.2: Esquema de las configuraciones utilizadas para determinar la energía del estado fundamental por medio de una cadena normal (esquema inferior) y la entropía de entrelazamiento considerando la cadena desdoblada con los estados espín- \downarrow a la izquierda y los estados espín- \uparrow a la derecha (esquema superior). Los círculos de color rojo y celeste representan a la impureza y los niveles del baño de conducción.

La configuración de “cadena uniforme” mantiene la longitud de la cadena de tight-

binding Fig. 3.2 (inferior), el color rojo y azul corresponden a la impureza y el baño, respectivamente, U es la energía de repulsión coulombiana entre los electrones espín- \uparrow y espín- \downarrow en la impureza y V el término de hibridación entre la impureza y el primer sitio de la cadena del baño de conducción. Esta forma permite determinar de una manera más precisa la energía del estado fundamental. Para determinar la entropía de entrelazamiento se empleó la configuración de “cadena separada por espín” Fig. 3.2 (superior). Es una cadena desdoblada, la zona izquierda admite electrones con espín \downarrow y el lado derecho con espín \uparrow . Igualmente, los sitios de la impureza interactúan a través del potencial de interacción U sin considerar un término de hopping entre ellos que asegura una separación de espín, i.e., las partículas del lado izquierdo no van a pasar al lado derecho. Todo esto fue implementado para el modelo de Anderson utilizando el algoritmo de sistema finito de DMRG

Para el modelo de Kondo a un principio se tenía un código para el algoritmo de sistema infinito, esto nos permitió llegar a tamaños mucho más pequeños del sistema. En el transcurso de la Maestría, se elaboró un algoritmo para sistema-finito con ayuda de Daniel J. García. Similarmente, se implementó una cadena de tight-binding reemplazando el término de hibridación V por el término de acoplamiento espín-espín J y se elimina la interacción coulombiana U , porque este modelo prohíbe la doble ocupación en el nivel de la impureza.

3.2. Cálculos de DMRG para el modelo de Anderson con U finito

Utilizamos el DMRG implementado para el modelo de Anderson con simetría electrón-hueco $\epsilon_f = -U/2$ y el nivel de fermi $\epsilon_F = 0$. En las Figuras. 3.4 y 3.3 presentamos la entropía de entrelazamiento de espín S_\uparrow calculada a partir de la configuración de “cadena desdoblada” de tamaño $L = 2N_{\text{sitios}}$ que se obtiene de la cadena *tight-binding* de N_{sitios} . Un valor de $L/2$ par o impar significa tener un número impar y par de electrones N_e en el baño de conducción respectivamente.

Para un número impar de electrones de conducción Fig. 3.3 se observa un aumento monótonico de la entropía mientras se incrementa el término de interacción U o el tamaño del sistema. Se encontró que para tamaños del sistema y valores de U suficientemente grandes la entropía supera el valor de 1 y esto no coincide con los resultados analíticos obtenidos en base a aproximar el estado fundamental. Tener un espectro de energías en la banda de conducción y un número de electrones de conducción N_e impar (ver Fig. 3.5) favorece a inducir un estado singlete entre el estado del baño de conducción con energía cero en el nivel de Fermi (que tiene una ocupación 1) y la impureza.

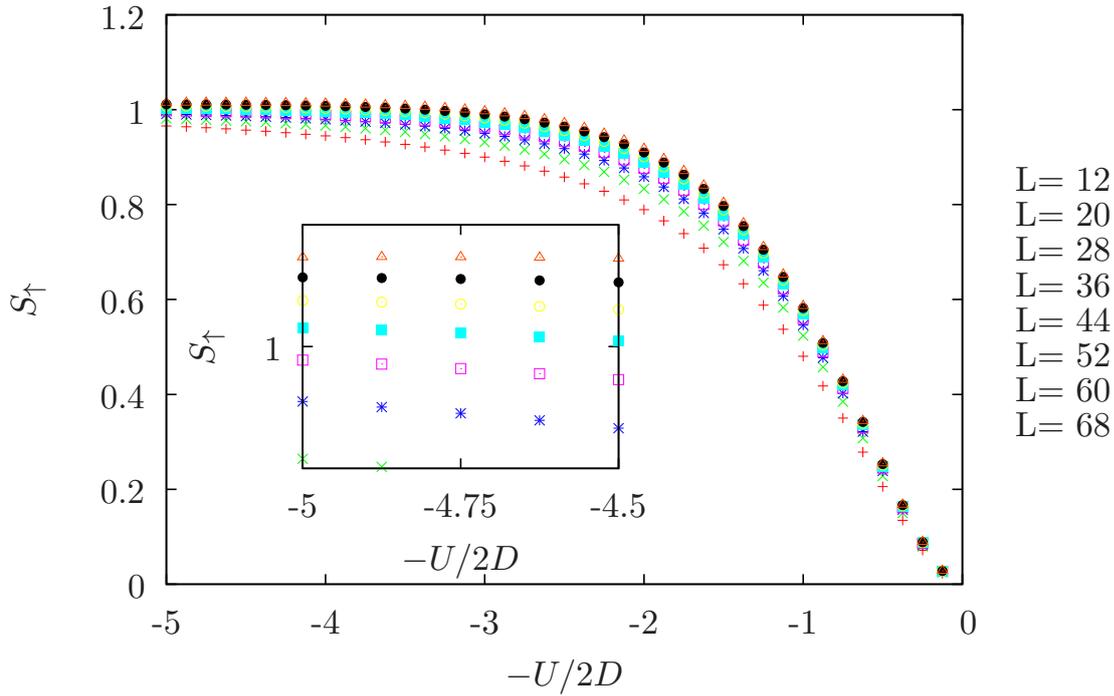


Figura 3.3: Entropía de entrelazamiento S_{\uparrow} calculada por DMRG en función de $\frac{-U}{2D}$ para diferentes tamaños de la cadena desdoblada con un número de sitios par, siendo $D = 1$ el semiancho de banda. Se trabajó con un parámetro $m = 512$.

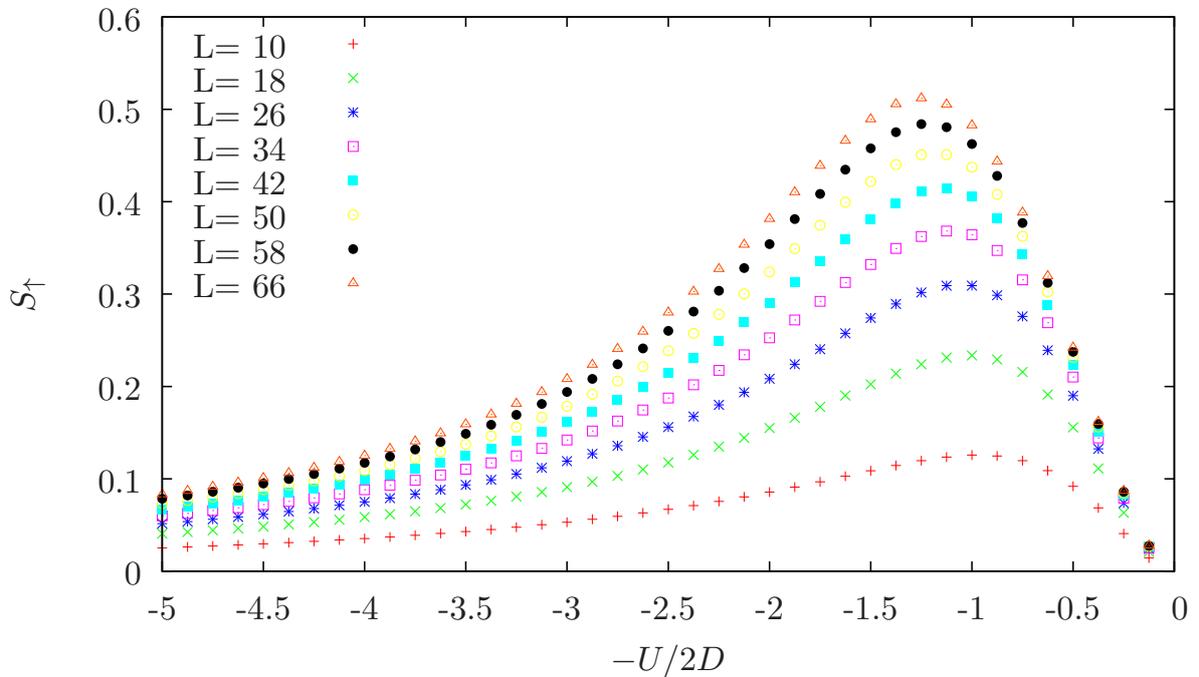


Figura 3.4: Entropía de entrelazamiento S_{\uparrow} calculada por DMRG en función de $\frac{-U}{2D}$ para diferentes tamaños de la cadena desdoblada con un número de sitios impar, siendo $D = 1$ el semiancho de banda. Se trabajó con un parámetro $m = 512$.

Para un número par de electrones de conducción Fig. 3.4, no se observa la formación del singlete “molecular” para valores de interacción U grandes. En este caso, la cadena

de conducción tiene todos los niveles doblemente ocupados hasta el nivel de Fermi Fig.3.5 y para valores de U grande no es energéticamente favorable formar un singlete con la impureza ya que esto requiere al menos una excitación electrón-hueco en la cadena, un costo de energía Δ que se vuelve un impedimento para la formación del singlete. En este caso el valor de la entropía adquiere un máximo que incrementa a medida que trabajamos con sistemas de tamaño más grande, entonces $\Delta \propto 1/L$ se hace lo suficientemente pequeño para permitir una excitación electrón-hueco y así la formación del siglete. El máximo de la curva tiene valores de $S_{\uparrow} \rightarrow 1$ para $L \rightarrow \infty$. Falta aclarar que solo para los sistemas con $L/2$ impar se añadió una pequeña perturbación (campo magnético en la dirección \hat{z}), en el nivel de la impureza, dando lugar a una ruptura de la degeneración del estado fundamental que de otro modo genera problemas numéricos.

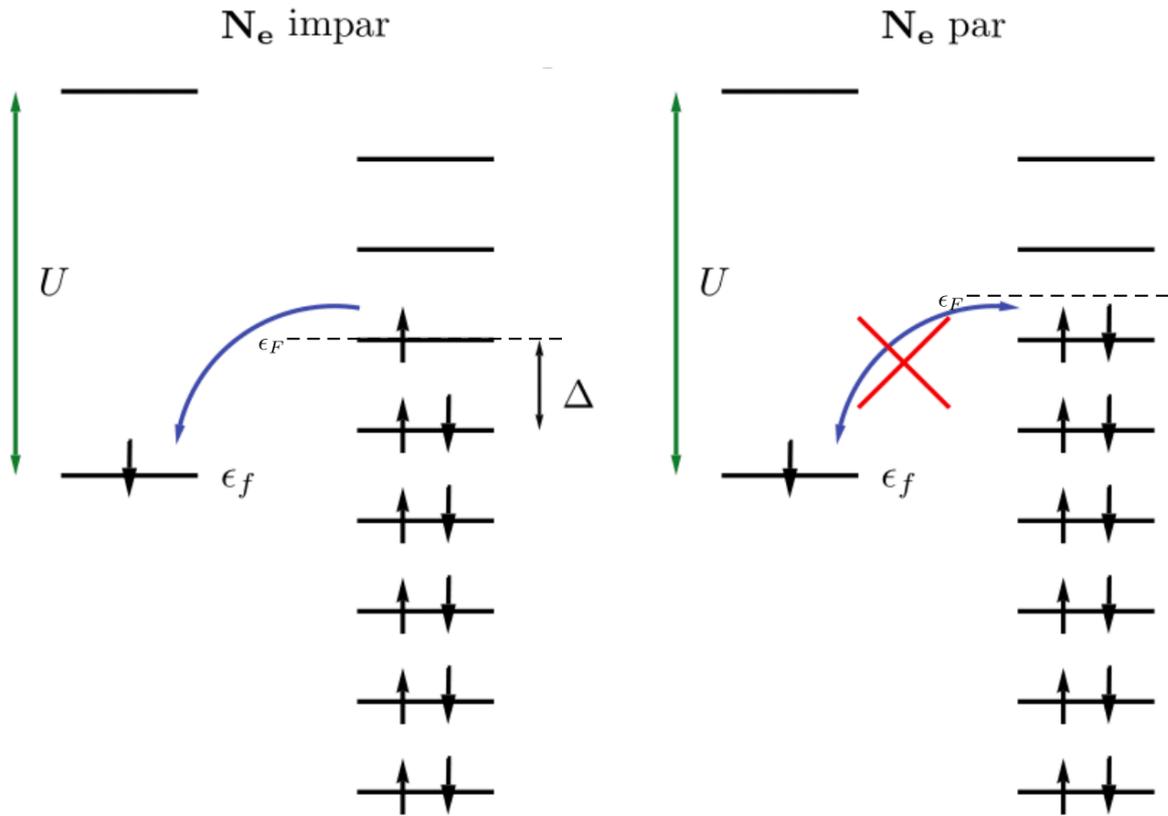


Figura 3.5: Esquema de un sistema finito con una impureza de Anderson. (Izquierda) número par de electrones en el baño y un estado en el nivel de Fermi. (Derecha) número impar de electrones con un nivel de Fermi a mitad de la banda.

En el límite termodinámico $L \rightarrow \infty$ los resultados no deben depender de la paridad de la cadena. Al aumentar U con el resto de los parámetros fijos, la energía característica ϵ_K en el problema de Kondo se reduce exponencialmente, lo que hace necesario aumentar el tamaño del sistema de manera tal que $\epsilon > D/L$ para poder describir la física adecuadamente. Si esto no es así, se observan marcados efectos de tamaño y de paridad

de sitios del baño. Esto dificulta llegar a límite de Kondo (U grande).

En los siguientes cálculos numéricos consideramos tamaños de L mucho más grandes con un número N_e impar de electrones de conducción. En la Fig. 3.6, los puntos representan los datos de la entropía de entrelazamiento calculados (se trabajó hasta $L = 8192$ con $m = 256$) en función del inverso de U . Se comprobó para todos los valores de U , presentados en la figura, que la entropía estaba convergida al límite termodinámico. Esto es, que los valores de L y m eran suficientemente grandes de manera tal que el error, debido al tamaño finito y al descarte de estados en el proceso de renormalización, sea menor al tamaño de cada punto en la gráfica. Se puede apreciar que, para valores de U grandes, la entropía supera 1 adquiriendo el valor de $\sim 1,5$ si se extrapola linealmente en $1/U$ para $U \rightarrow \infty$. El ajuste lineal es fenomenológico y tiene como ecuación la recta $-1,98/U + 1,54$. También, se puede ver que para valores de $U \leq 1$ los datos se pueden describir con el modelo de la molécula [Ec. (2.7)] utilizando una interacción efectiva $U/5,15$. La entropía molecular tiende, sin embargo, a un valor $S_{\uparrow} = 1$ para $U \rightarrow \infty$.

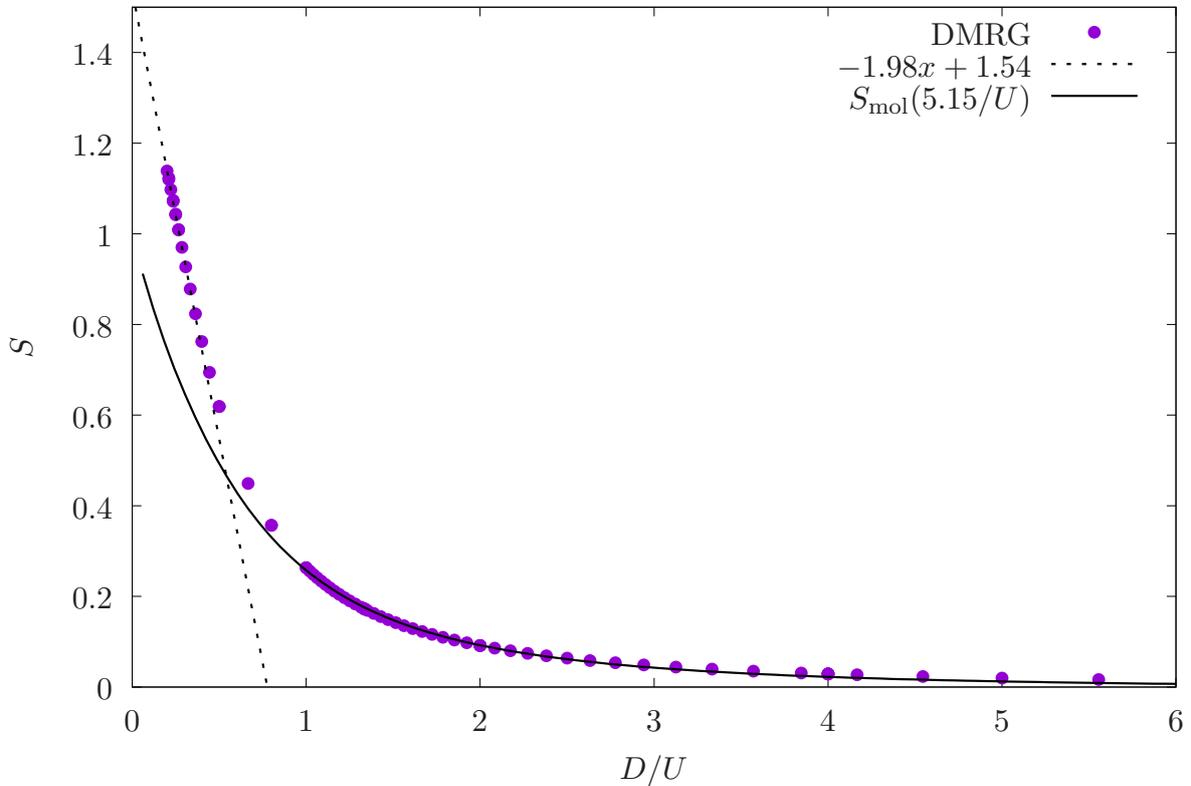


Figura 3.6: Entropía de entrelazamiento S_{\uparrow} calculada por DMRG en función de $\frac{D}{U}$ con $D = 1$ el semiancho de banda. La recta punteada corresponde a la extrapolación lineal de los datos para tamaños grandes (se trabajó hasta $L = 8192$). La curva corresponde al ajuste de los datos con la función 2.7 obtenida del modelo de Anderson a en el límite de banda angosta (la molécula) con $S_{\uparrow} = 1$ para $U \rightarrow \infty$.

3.2.1. Análisis de error asociado a la entropía obtenida mediante el cálculo de DMRG

En los cálculos del grupo de renormalización de la matriz densidad DMRG, se encuentran dos parámetros relevantes a considerar: el tamaño final L del sistema y el máximo número de m estados con los que nos quedamos en cada iteración. Es importante hacer un análisis previo para determinar los valores de m y L a partir de los cuales aseguramos precisión en los cálculos de la entropía de entrelazamiento.

En la Fig. 3.7, se trabajó con un sistema de tamaño finito $L = 512$ e interacción coulombiana $U = 4D$; se calculó la diferencia de entropía $\delta S_\uparrow = |S_\uparrow(m = 600) - S_\uparrow(m)|$ para diferentes valores de m . La disminución de esta diferencia corresponde a la convergencia de la entropía (figura superior derecha) al incrementar el valor de m . En la misma gráfica se incluye la polarización $\delta n = |n_\uparrow - n_\downarrow|$ en el estado localizado, cuya diferencia debería dar cero para la solución exacta.

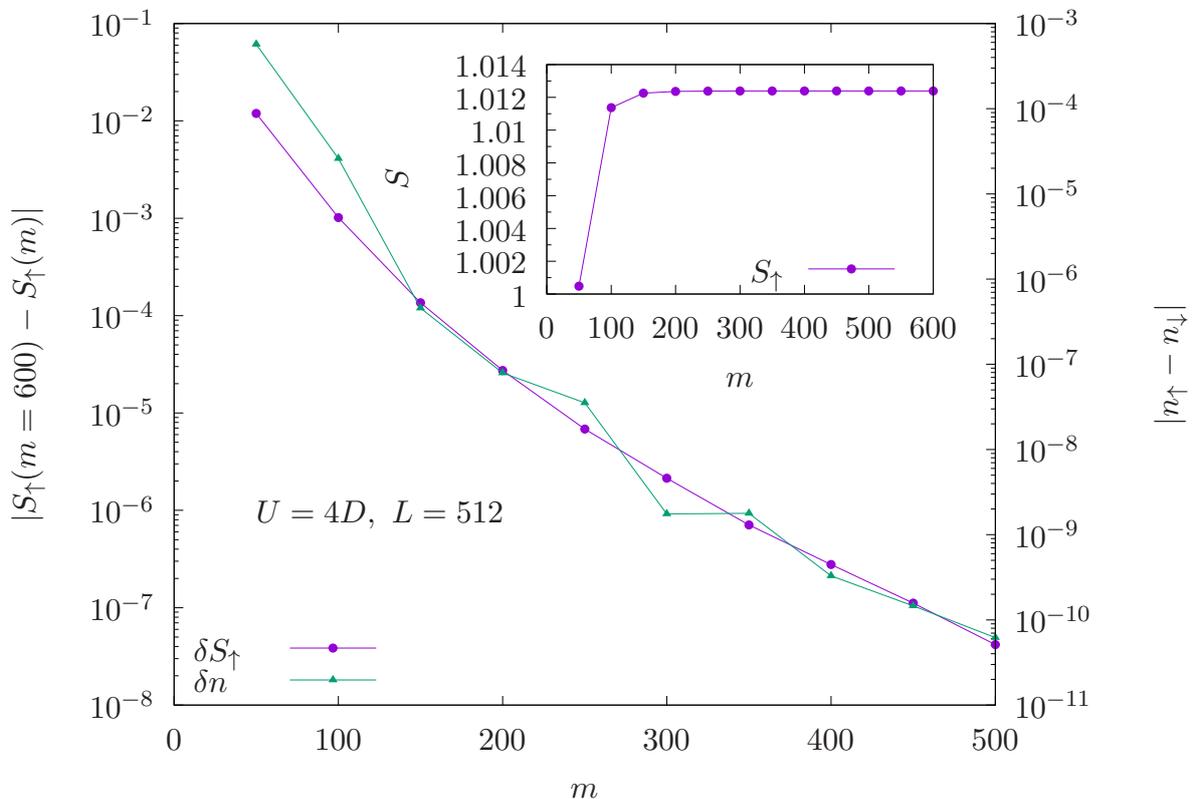


Figura 3.7: Polarización del estado localizado $|n_\uparrow - n_\downarrow|$ y diferencia de entropías de entrelazamiento $|S_\uparrow(m = 600) - S_\uparrow(m)|$ en función de m para un valor fijo de $U = 4$ y tamaño $L = 512$. La figura pequeña muestra la convergencia de la entropía al incrementar m .

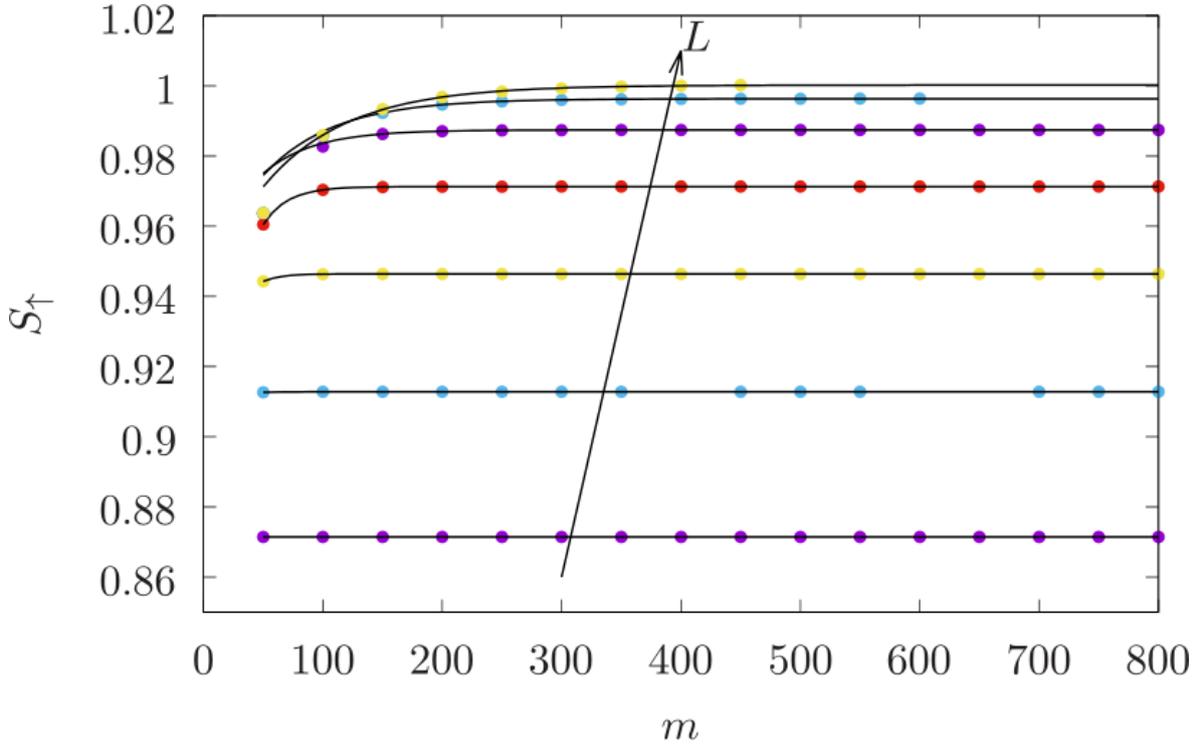


Figura 3.8: Entralazamiento de espín S_\uparrow en el modelo de Anderson con degeneración $N = 2$ en función del número de estados m que retenemos en cada iteración para el proceso de renormalización. Los parámetros de los cálculos son $U = 3D, \Gamma = 0,32D$, donde D es el ancho de la banda de conducción.

Estos resultados confirman el valor mayor a 1 obtenido en la entropía. Vemos que parte del error que tenemos en el cálculo de la entropía podría estar asociado a la existencia de una pequeña polarización en la impureza que se puede contrarrestar si trabajamos con valores más grandes de m . Al mismo tiempo, incrementar m implica diagonalizar una matriz cada vez más grande lo que incrementa como m^3 los tiempos de cálculo.

A continuación se presenta el proceso para obtener los valores de S_\uparrow convergidos en el límite termodinámico. En la Fig. 3.8 se muestran cálculos de la entropía de entrelazamiento de espín S_\uparrow para el modelo de Anderson en función de m para diferentes valores de L . Los puntos corresponden a los datos numéricos, se puede notar que al incrementar el tamaño L aparece una dependencia cada vez más notoria de S_\uparrow con m . Las líneas son el ajuste usando una función de la forma $S_\uparrow(m) = S_\uparrow^{m \rightarrow \infty} - c_1 e^{-m/c_2}$, con $S_\uparrow^{m \rightarrow \infty}$, c_1 y c_2 parámetros del ajuste. En la Fig. 3.9 podemos ver como S_\uparrow converge a $S_\uparrow^{m \rightarrow \infty}$ al incrementar m . Una vez obtenidos estos valores m -extrapolados de $S_\uparrow^{m \rightarrow \infty}$ para cada sistema de tamaño L son a continuación extrapolados en el límite $L \rightarrow \infty$ suponiendo correcciones polinomiales finitas en $1/L$ Fig. 3.10. Estas correcciones de extrapolación ascendieron hasta un 2%.

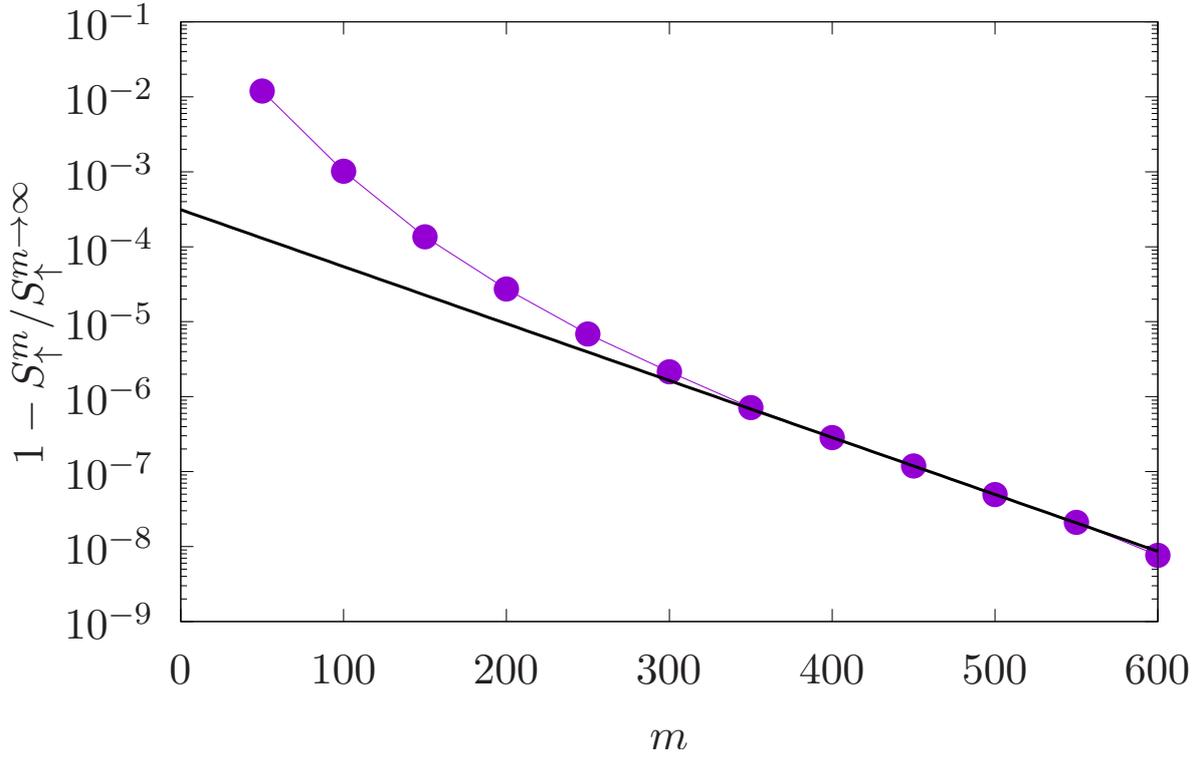


Figura 3.9: Diferencia entre el valor de la entropía para un dado m y el valor obtenido mediante extrapolación en $m \rightarrow \infty$. Los parámetros de los cálculos son $N = 2$, $U = 4D$, $\Gamma = 0,405D$, y $L = 512$.

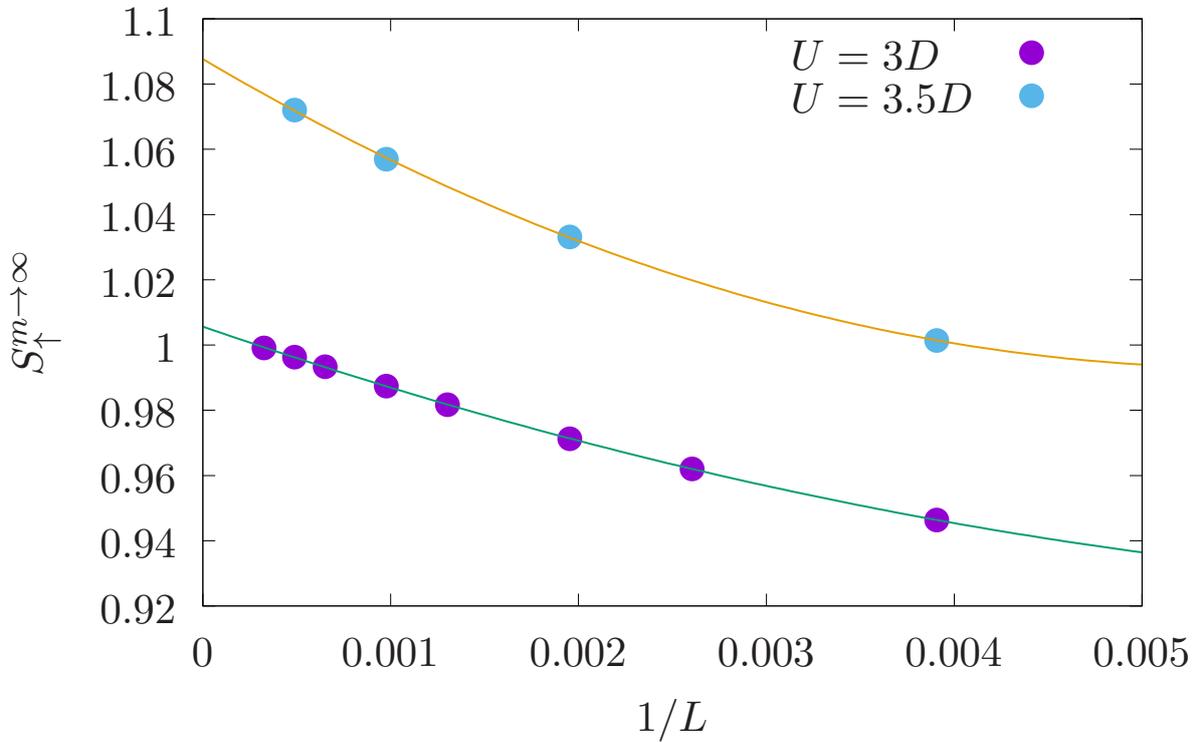


Figura 3.10: Los puntos corresponden a los valores de la entropía de entrelazamiento de espín $S_{\uparrow}^{m \rightarrow \infty}$, obtenida mediante extrapolación en $m \rightarrow \infty$ en función del inverso del tamaño del sistema $1/L$. Las curvas sólidas representan el ajuste de los datos mediante la función $S(1/L) = S(0) + a/L + b/L^2$. Los parámetros del modelo de Anderson para estos datos son $N = 2$, $\Gamma = 0,32D$, y $L = 512$.

3.2.2. Cálculos de DMRG para determinar la universalidad de la Entropía en función de la renormalización de la masa de las cuasipartículas en el problema de Kondo

Se analizó la validez de la universalidad entre la entropía de entrelazamiento de espín S_\uparrow y la renormalización de la masa de las cuasipartículas $Z = \pi\epsilon_K/N\Gamma$ en el problema de Kondo (obtenido en la sección [Función de onda variacional de Varma-Yafet](#): y en [Expansión variacional de N-grande para sistemas de impurezas magnéticas diluidas en un metal](#)). Realizamos los cálculos numéricos tomando una degeneración $N = 2$. El término de hibridación en el nivel de Fermi ($\epsilon_F = 0$) es $\Gamma = \pi\rho(0)V^2 = 2V^2/D$. En nuestro caso, el término de hopping es $t = 0,5$ por tanto, $\Gamma = 2V^2$. A continuación, se presentan los valores de la entropía de espín S_\uparrow previamente convergidos al límite termodinámico en función de los parámetros del modelo.

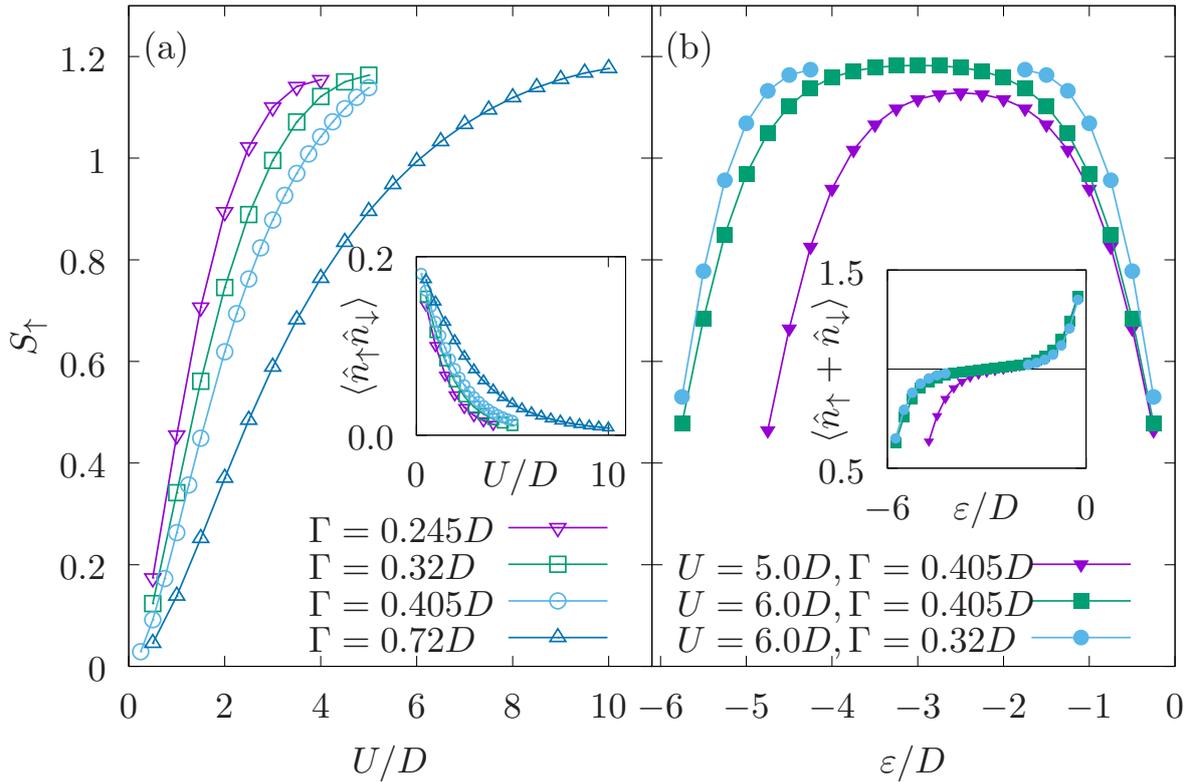


Figura 3.11: Entropía de entrelazamiento de espín S_\uparrow vs. ϵ_f y U para Γ fijo. (a) S_\uparrow vs. el término de interacción U bajo una disposición con simetría electrón-hueco $\epsilon_f = -U/2$. El recuadro muestra la probabilidad de doble ocupación en el nivel de la impureza. (b) S_\uparrow vs. ϵ_f para valores de interacción U fijo como se indica en la figura. La entropía es simétrica bajo la transformación $\epsilon_f \rightarrow -U - \epsilon_f$ debido a la simetría electrón-hueco del baño de conducción. El recuadro muestra la ocupación en el nivel de la impureza.

En la Fig. 3.11, S_\uparrow decrece monótonamente cuando el sistema se encuentra, dado los parámetros del modelo, en un estado fundamental menos correlacionado, i.e. disminuyendo la interacción coulombiana U , incrementado el acoplamiento impureza-baño de

conducción Γ o alejando el nivel de la impureza ϵ_f del régimen con simetría electrón-hueco $\epsilon_f = -U/2$. En la Fig. 3.11 (a) el sistema se encuentra en el régimen de simetría electrón-hueco y la ocupación media en el nivel de la impureza es $n_f = 1$. Incrementar la relación U/V conduce a una reducción de la doble ocupación media en el nivel de la impureza, lo cual es señal de un incremento en las correlaciones entre las proyecciones de los espines opuestos de los electrones en la impureza.

En la Fig. 3.11(b) se fijan la interacción U , la hibridación Γ y se varía el nivel de la impureza ϵ_f . Los valores más grandes de S_\uparrow se obtienen en condiciones de simetría electrón-hueco, esta región se extiende cuando incrementamos U/Γ . Tener una ocupación $n_f < 1$ implica, mayor probabilidad de encontrar el nivel de la impureza vacío y la interacción es menos efectiva creando correlaciones entre las proyecciones de espín opuestas entre los electrones, similarmente para $n_f > 1$.

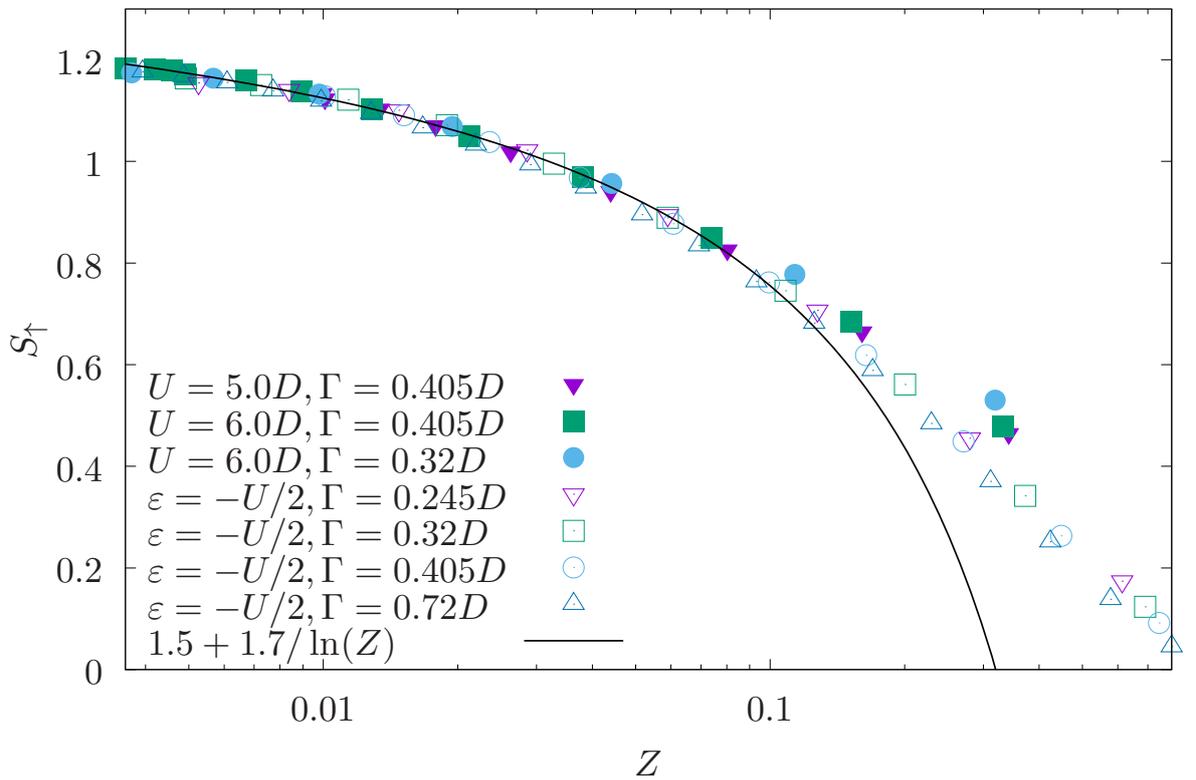


Figura 3.12: Entropía de entrelazamiento de espín S_\uparrow vs. Z para una variedad de parámetros del modelo. En el régimen de Z chico, los datos caen dentro de la curva universal. La línea sólida es un ajuste considerando una aproximación logarítmica en el límite de $Z \rightarrow 0$.

Para determinar la masa renormalizada de las cuasi-partículas $Z = \epsilon_K/\Gamma$, calculamos la energía de Kondo ϵ_K que, dentro del régimen de Kondo, cumple la relación $\epsilon_K \approx 1/\chi$. Entonces la masa de las cuasi-partículas se puede estimar como $Z \approx (\Gamma\chi)^{-1}$. La susceptibilidad de espín en el nivel de la impureza a temperatura cero se calcula mediante 2.17, el cual mide el cambio de la polarización de la impureza en el estado

fundamental $m_f = \langle (\hat{n}_\uparrow - \hat{n}_\downarrow) \rangle / 2$ considerando una separación energética de Zeeman $2h = g\mu_B B$. En los cálculos numéricos presentados a continuación, se aplicó un splitting δh lo suficientemente pequeño de manera que la respuesta de m_f sea lineal.

La Fig. 3.12 presenta la entropía de entrelazamiento de espín S_\uparrow como una función de la renormalización de la masa de las cuasi-partículas Z . Para valores de $Z \lesssim 0,3$ los datos de la Fig. 3.11 caen dentro de la curva universal como se esperaba en el análisis de N -grande. Este comportamiento monótono universal indica que el entrelazamiento de espín se determina unívocamente por la renormalización de la masa de las cuasipartículas Z . La línea es un ajuste usando una función del tipo $1/\ln(Z)$ en lugar de la dependencia esperada de Z^4 en el límite de $Z \rightarrow 0$ para N grande, porque la aproximación al valor $S_\uparrow^{Z \rightarrow 0} = 1$ es más lenta para $N = 2$.

La renormalización de la masa de las cuasipartículas se puede obtener de mediciones de espectroscopía de transporte de la resonancia de Kondo [20] [21]. Además, esta juega un rol importante al momento de caracterizar correlaciones electrónicas fuertes en materiales con fermiones pesados.

3.3. Cálculos de DMRG para el modelo de Kondo

Como en el modelo anterior los cálculos por DMRG se realizan usando las configuraciones de cadena uniforme y desdoblada para calcular la energía y la entropía del estado fundamental respectivamente. En este caso el término de interacción de acoplamiento espín-espín J se considera solo entre la impureza y el primer sitio de la cadena. Los resultados de la primera subsección se adquieren empleando el algoritmo de DMRG para sistema infinito, como se mencionó, la ausencia de barridos no permite una alta precisión en los resultados. En la última subsección si se elaboró un algoritmo para sistema finito con ayuda de Daniel J. García.

Algoritmo de sistema infinito de DMRG

Se evidencia el mismo comportamiento en la entropía dado el número de electrones de conducción N_e . En la Fig. 3.13 con N_e impar, la entropía incrementa con el tamaño del sistema para valores pequeños de J y para valores grandes $S_\uparrow \rightarrow 1$ reduciéndose a la formación del singlete. La entropía resulta siempre mayor a la unidad debido al espectro de energía de los electrones de conducción que presenta, dando lugar a la existencia de un estado en la energía de fermi $\epsilon_F = 0$ el cual puede acoplarse al estado de la impureza y formar el singlete. En la Fig. 3.14 para N_e par, no se tienen correlaciones $S_\uparrow = 0$ cuando el término de interacción $J \rightarrow 0$ independientemente del tamaño del sistema. También se puede notar que la entropía aumenta más rápidamente con J

al incrementar el tamaño L , lo que se espera porque $\Delta \propto \frac{1}{L}$; el gap del espectro de energía de los electrones de conducción; disminuye. En ambos casos, la entropía de entrelazamiento S_{\uparrow} supera 1.

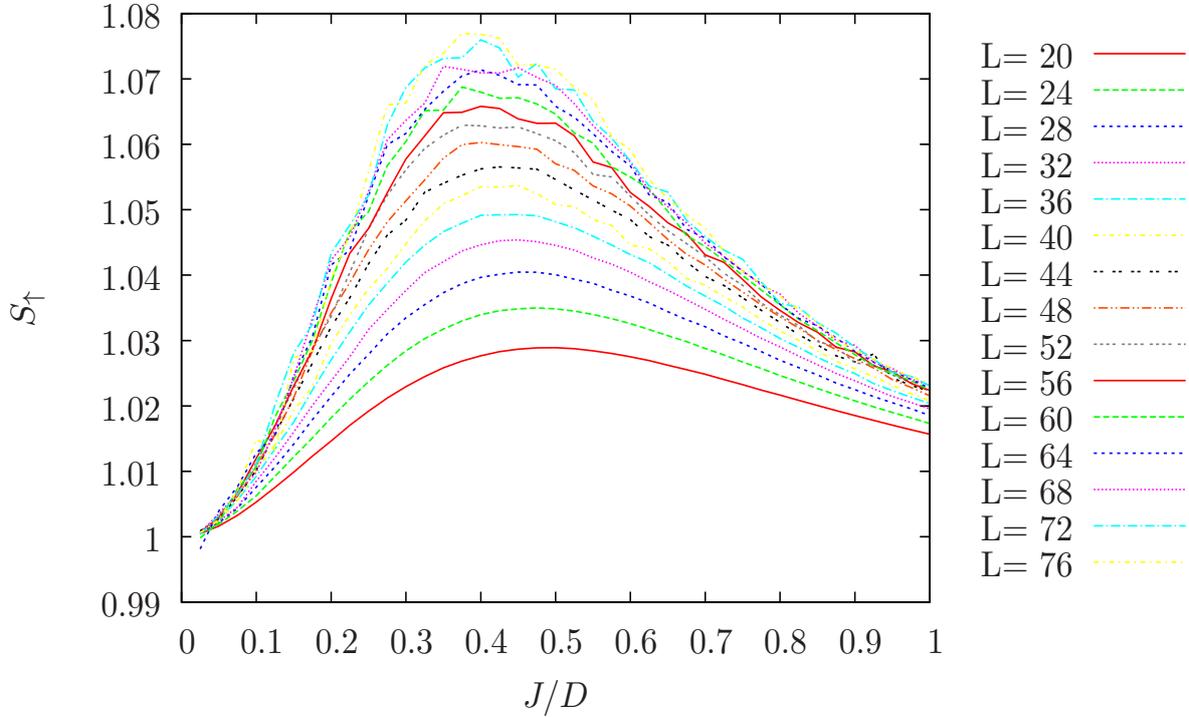


Figura 3.13: Entropía de entrelazamiento S_{\uparrow} calculada por DMRG en función de $\frac{J}{D}$ para diferentes tamaños de la cadena desdoblada con un número de sitios impar.

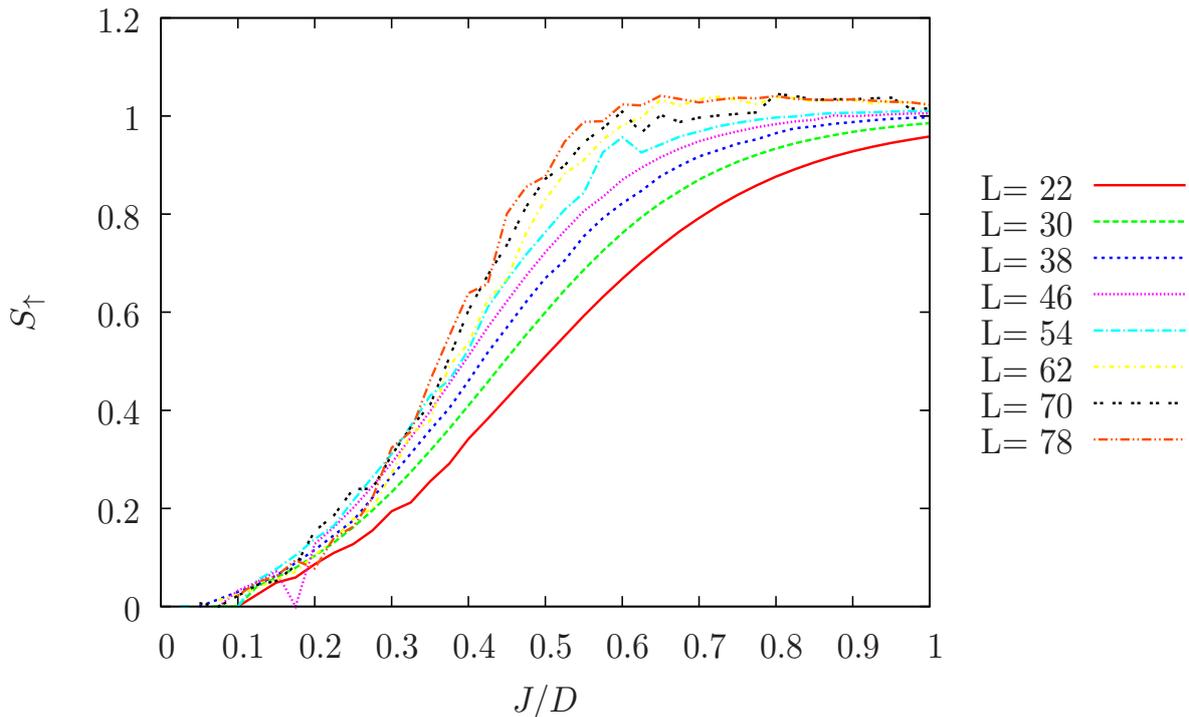


Figura 3.14: Entropía de entrelazamiento S_{\uparrow} calculada por DMRG en función de $\frac{J}{D}$ para diferentes tamaños de la cadena desdoblada con un número de sitios par.

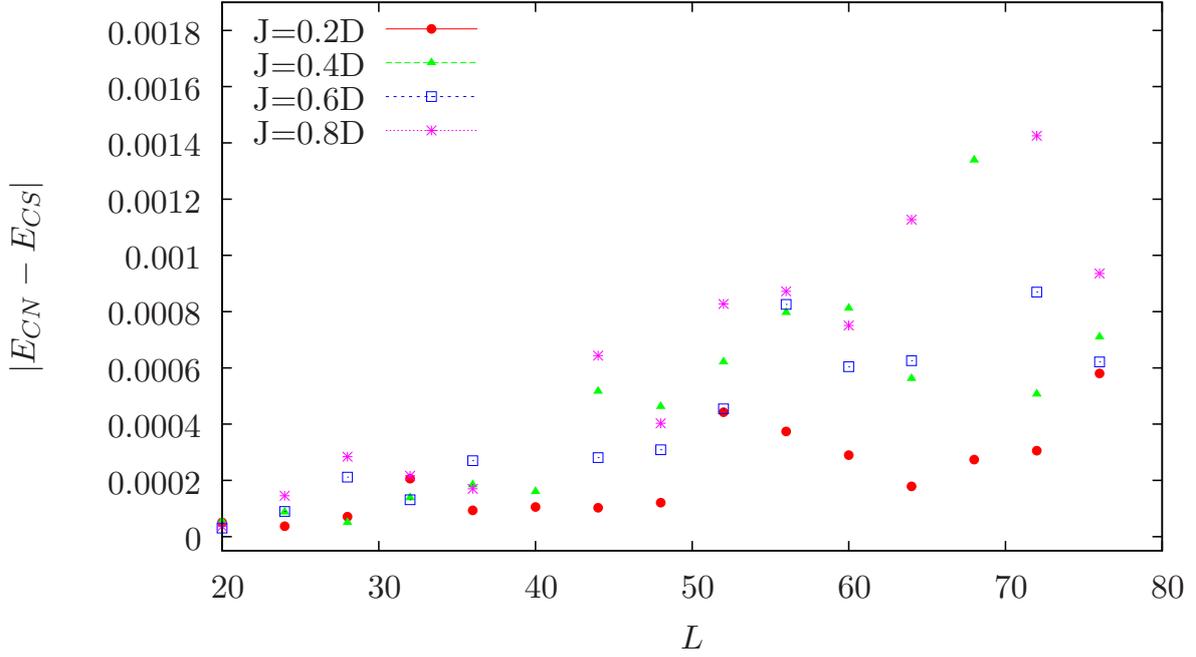


Figura 3.15: Error asociado a al energía obtenida mediante la configuración de cadena separada por espín en función del número de sitios.

A continuación, se compara la energía del estado fundamental obtenida en la configuración de la cadena desdoblada E_{CS} con la obtenida al usar la cadena uniforme E_{CN} cuyo valor tomamos como referencia, debido a la precisión que nos brinda para calcular valores de la energía del estado fundamental. En la Fig. 3.18 se presenta el valor absoluto de la diferencia de energía $\delta E = |E_{CN} - E_{CS}|$ en función de la cantidad de sitios en el sistema para diferentes valores del término de interacción J . Se observa que las energías coinciden, i.e. , el δE es bastante pequeño hasta un tamaño de $L = 40$ a partir del cual incrementa tanto para L y J grandes. El ruido que aparece en la entropía se puede asociar a este incremento. Efectivamente, el algoritmo de sistema infinito no nos permite llegar a tamaños más grandes del sistema y al mismo tiempo tener mayor precisión en los resultados.

Algoritmo de sistema finito de DMRG

Los cálculos en adelante se realizaron usando el algoritmo de sistema finito. En la Fig. 3.16 se presentan los cálculos de S_{\uparrow} en función del término de acoplamiento de intercambio J para diferentes tamaños L de la cadena. Obtenemos una entropía siempre mayor o igual a 1, debido al espectro de energías del baño de conducción que favorece a la formación del singlete. La única diferencia importante a considerar es, mayor precisión en los cálculos de la entropía S_{\uparrow} usando el algoritmo finito de DMRG y el ruido presente en la Fig. 3.13 no se observa, al menos hasta el tamaño $L = 64$.

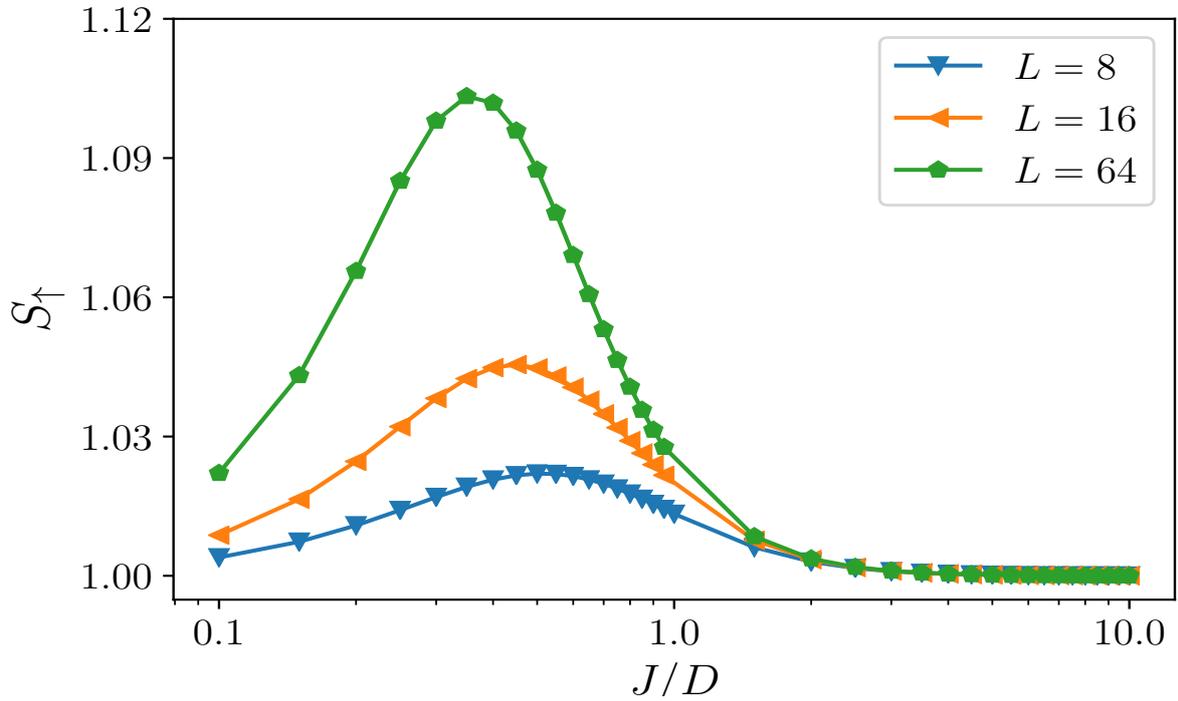


Figura 3.16: Entropía de entrelazamiento de espín S_{\uparrow} vs. el término de acoplamiento de intercambio J/D en el modelo de Kondo, para diferentes tamaños L de la cadena y con D como el ancho de la banda de conducción. El número de estados que se retiene para el proceso de renormalización es $m = 512$.

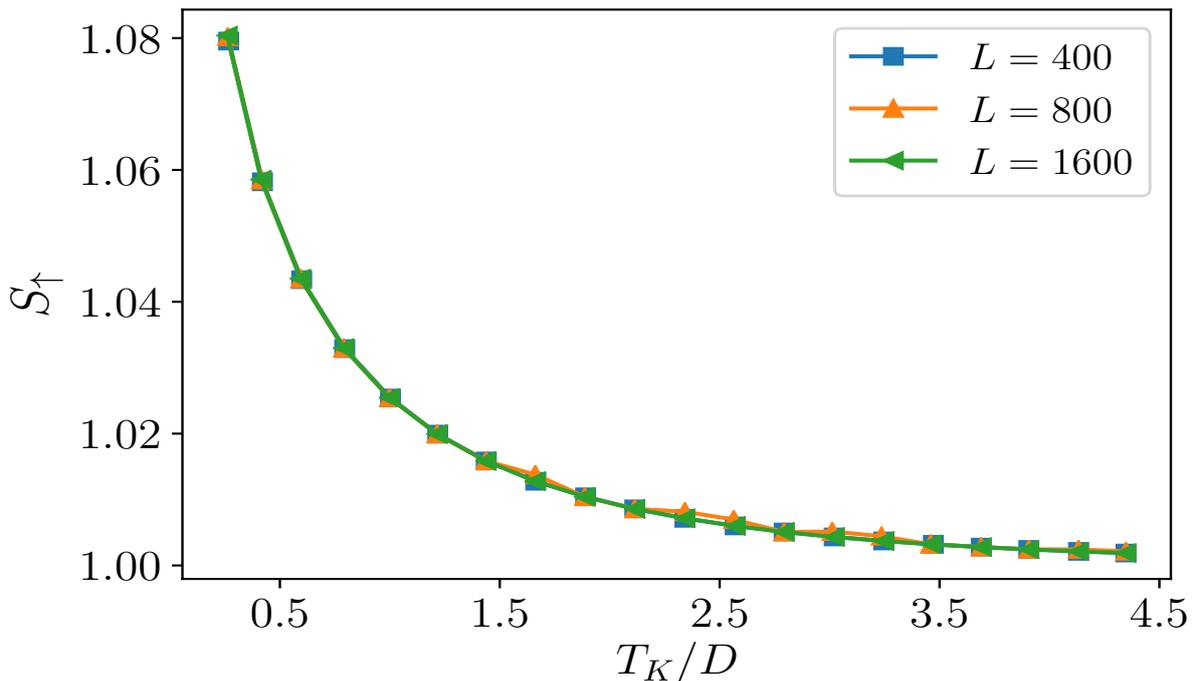


Figura 3.17: Entropía de entrelazamiento de espín S_{\uparrow} vs. la temperatura de Kondo T_K para diferentes tamaños de la cadena L .

Con el modelo de Kondo implementado en DMRG, se determinó la temperatura de Kondo T_K , mediante cálculos de la susceptibilidad aplicando una separación energética de Zeeman en la impureza a temperatura cero. En la Fig. 3.17 se presenta S_\uparrow vs. T_K para diferentes tamaños de la cadena L . Se observa una correspondencia directa entre T_K y S_\uparrow con un poco de ruido para $L = 800$ debido a errores del cálculo numérico. Además, se presenta un ligero cambio de S_\uparrow con L cuando T_K tiene valores chicos, tiene sentido porque aún se encuentra en la zona de J , donde S_\uparrow es sensible frente a cambios del tamaño de la cadena L . Por último, utilizamos la expresión 2.67, obtenida mediante teoría de perturbaciones en D/J , para ajustar los datos de entropía S_\uparrow en la región de J grande. Esta función de ajuste nos asegura $S_\uparrow(J \rightarrow \infty) = 1$ con una corrección positiva $\propto \frac{D^4}{J^4} \log(J/D)$. En el zoom podemos ver como la función ajusta bastante bien los valores de S_\uparrow cuando J es grande. Además, se observa un incremento monótono de la entropía cuando J decrece.

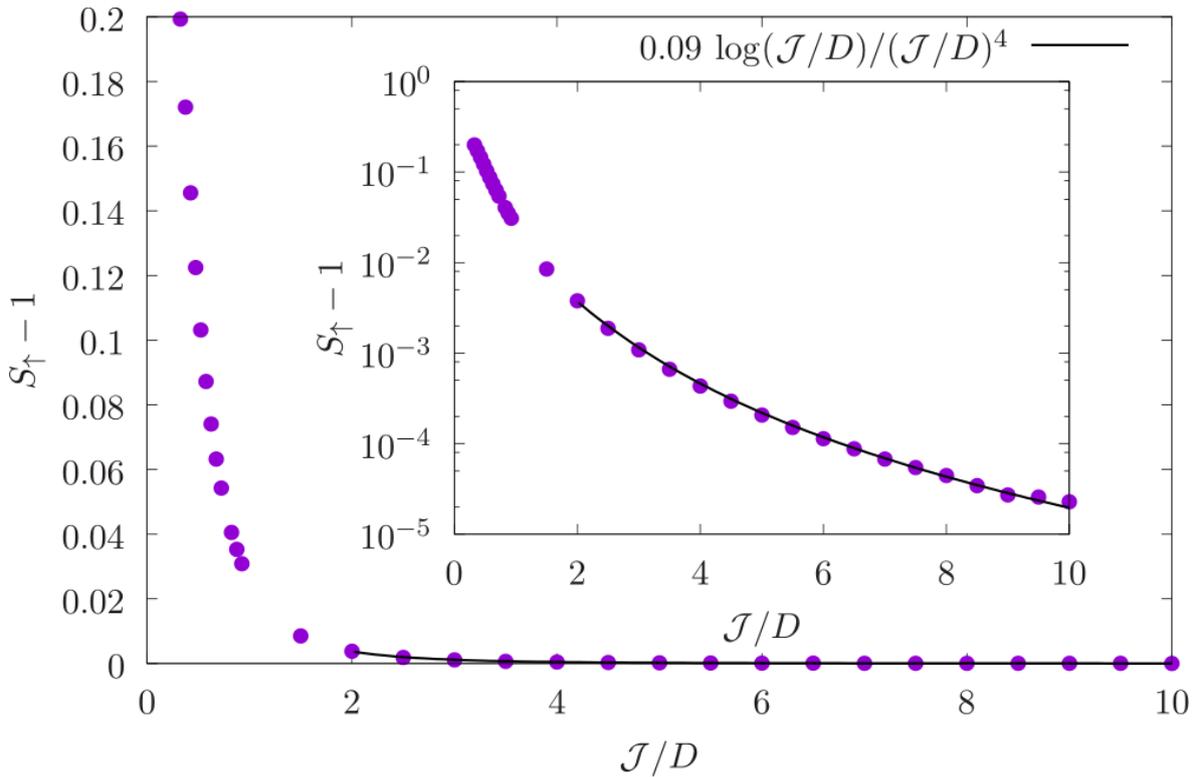


Figura 3.18: Entropía de entrelazamiento de espín S_\uparrow como función del término de acoplamiento de intercambio J en el modelo de Kondo calculados usando DMRG. La línea sólida es un ajuste con la forma funcional esperada por teoría de perturbaciones en D/J .

Capítulo 4

Conclusiones

“Imagination is more important than knowledge. Knowledge is limited. Imagination encircles the world”

— Albert Einstein

En la primera parte de esta tesis, determinamos expresiones analíticas aproximadas para la entropía de entrelazamiento vía la medida de *Von-Neumann* para el estado fundamental en función de las interacciones de los modelos de Anderson y Kondo, los cuales utilizamos para describir sistemas que presentan efecto de Kondo. Para la aproximación de banda angosta con simetría electrón-hueco y con degeneración de momento angular, encontramos expresiones para la entropía de entrelazamiento entre proyecciones de espín $S_{\uparrow} \leq 1$, la cual no supera el valor de 1 en el modelo de Anderson. Mientras, para el modelo de Kondo, se encontró valores de entropía siempre igual a 1, sin importar los valores del término de interacción. Posteriormente, usamos una base de estados; cada una con su respectiva contribución en la energía del estado fundamental al orden en $1/N$; para determinar el estado fundamental del hamiltoniano de Anderson en el límite de interacción fuerte. Mediante un cambio de base apropiado se obtuvieron expresiones para el entrelazamiento de espín al orden más bajo y incluyendo un término del siguiente orden en $1/N$, estos seguían dando valores de entrelazamiento $S_{\uparrow} \leq 1$. Para un sistema pequeño, se determinaron numéricamente valores de entrelazamiento $S_{\uparrow} > 1$ a partir de considerar la base completa de estados a segundo orden en $1/N$.

Adicionalmente, se encontró que S_{\uparrow} es una función universal de $Z = \pi\epsilon_K/N\Gamma$ a través de cálculos variacionales del estado fundamental al orden más bajo en $1/N$. Esta cantidad Z aparece en teorías de líquido de Fermi local asociada a la renormalización de la masa de las cuasipartículas en el problema de Kondo. Por último, para el modelo de Kondo se obtuvo una expresión para la entropía de entrelazamiento a través de teoría

de perturbaciones en $1/J$.

En la última sección se determinó la entropía de entrelazamiento de espín mediante el método del Grupo de Renormalización de Matriz Densidad (DMRG). Tanto para el modelo de Anderson y Kondo se encontró la presencia de efectos de tamaño finito y paridad del número de electrones del baño, lo que hace necesario aumentar el tamaño del sistema de manera tal que la energía característica ϵ_K sea lo suficientemente grande con respecto a la separación de niveles energéticos del baño de conducción y así poder describir la física adecuadamente. Además, se encontró que la entropía de entrelazamiento supera el valor de 1 para cada uno de los modelos estudiados. Se pudo verificar numéricamente que el entrelazamiento cuántico entre proyecciones de espín es una función universal de la renormalización de la masa de las cuasipartículas Z , así proveyendo una nueva interpretación para Z y la posibilidad de obtener experimentalmente la entropía de entrelazamiento de espín.

Apéndice A

Representación de cadena lineal

“De vez en cuando conviene sacar a pasear el instinto”
— Mafalda

El hamiltoniano para la cadena finita se expresa como:

$$\hat{\mathcal{H}} = -t \sum_{j=0}^N (c_j^\dagger c_{j+1} + c_{j+1}^\dagger c_j) \quad (\text{A.1})$$

donde N denota el número de sitios y t el término de hopping entre primeros vecinos.

Para poder usar condiciones periódicas tomamos el sitio 0 con amplitud cero, de esta manera podemos extender la suma hasta N . Hacemos la transformación al espacio k de modo que el operador adquiere la forma:

$$c_j = \frac{-i}{\sqrt{2(N+1)}} \sum_{k=1}^N (e^{ikj} - e^{-ikj}) c_k \quad (\text{A.2})$$

De la Ec. (A.2) se puede ver que $c_0 = 0$ y por condiciones periódicas se debe cumplir $c_{N+1} = 0$, de manera que $k = \frac{n\pi}{N+1}$ para $n = 1, 2, \dots, N$.

Reemplazando la Ec. (A.2) en la Ec. (??) tenemos:

$$\hat{\mathcal{H}} = -2t \sum_{k=1}^N \cos(k) c_k^\dagger c_k \quad (\text{A.3})$$

Entonces el valor de la energía para los electrones de conducción es de la forma $\epsilon_k = -2t \cos(k)$. El estado de la impureza hibridiza con el primer sitio de la cadena y de la

siguiente expresión se puede obtener el valor de V_{kf} .

$$V c_f^\dagger c_1 = c_f^\dagger \sum_k \frac{2iV \sin(k)}{\sqrt{2(N+1)}} c_k \quad (\text{A.4})$$

de donde

$$V_{kf} = \sum_k \frac{2iV \sin(k)}{\sqrt{2(N+1)}} \quad (\text{A.5})$$

El valor de V se obtiene de la normalización $\{ c_1, c_1^\dagger \} = 1$

$$V = \sqrt{\sum_k |V_{kf}^2|}. \quad (\text{A.6})$$

Bibliografía

- [1] Kotliar, G., Vollhardt, D. Strongly correlated materials: Insights from dynamical mean-field theory. *Physics today*, **57** (3), 53–60, 2004. [1](#)
- [2] Kouwenhoven, L., Glazman, L. Revival of the kondo effect. *Physics world*, **14** (1), 33, 2001. [1](#)
- [3] Horodecki, R., Horodecki, P., Horodecki, M., Horodecki, K. Quantum entanglement. *Reviews of modern physics*, **81** (2), 865, 2009. [2](#)
- [4] Bennett, C. H., Brassard, G., Crépeau, C., Jozsa, R., Peres, A., Wootters, W. K. Teleporting an unknown quantum state via dual classical and einstein-podolsky-rosen channels. *Physical review letters*, **70** (13), 1895, 1993. [4](#)
- [5] Gisin, N., Thew, R. Quantum communication. *Nature photonics*, **1** (3), 165, 2007. [4](#)
- [6] Vedral, V., Plenio, M. B., Rippin, M. A., Knight, P. L. Quantifying entanglement. *Physical Review Letters*, **78** (12), 2275, 1997. [4](#)
- [7] Kondo, J. Resistance minimum in dilute magnetic alloys. *Progress of theoretical physics*, **32** (1), 37–49, 1964. [7](#)
- [8] Schrieffer, J. R., Wolff, P. A. Relation between the anderson and kondo hamiltonians. *Physical Review*, **149** (2), 491, 1966. [7](#), [14](#)
- [9] Alascio, B., Allub, R., Aligia, A. Localised description of valence fluctuations. *Journal of Physics C: Solid State Physics*, **13** (15), 2869, 1980. [9](#)
- [10] Varma, C., Yafet, Y. Magnetic susceptibility of mixed-valence rare-earth compounds. *Physical Review B*, **13** (7), 2950, 1976. [9](#), [22](#)
- [11] Hewson, A. C. The Kondo problem to heavy fermions, tomo 2. Cambridge university press, 1997. [27](#), [28](#)
- [12] Bickers, N. Review of techniques in the large-n expansion for dilute magnetic alloys. *Reviews of modern physics*, **59** (4), 845, 1987. [28](#)

-
- [13] Tsvetick, A., Wiegmann, P. Exact results in the theory of magnetic alloys. *Advances in Physics*, **32** (4), 453–713, 1983. [29](#)
- [14] Jones, B., Varma, C., Wilkins, J. Low-temperature properties of the two-impurity kondo hamiltonian. *Physical review letters*, **61** (1), 125, 1988. [35](#)
- [15] Bickers, N., Cox, D., Wilkins, J. Thermodynamic, transport, and excitation properties of ce impurities in a model metal: Kondo resonance and universality in the mixed-valent regime. *Physical review letters*, **54** (3), 230, 1985. [35](#)
- [16] White, S. R. Density matrix formulation for quantum renormalization groups. *Physical review letters*, **69** (19), 2863, 1992. [39](#)
- [17] Bulla, R., Costi, T. A., Pruschke, T. Numerical renormalization group method for quantum impurity systems. *Reviews of Modern Physics*, **80** (2), 395, 2008. [40](#)
- [18] Schollwöck, U. The density-matrix renormalization group. *Reviews of modern physics*, **77** (1), 259, 2005. [41](#)
- [19] Legeza, Ö., Fátth, G. Accuracy of the density-matrix renormalization-group method. *Physical Review B*, **53** (21), 14349, 1996. [41](#)
- [20] Madhavan, V., Chen, W., Jamneala, T., Crommie, M., Wingreen, N. S. Tunneling into a single magnetic atom: spectroscopic evidence of the kondo resonance. *Science*, **280** (5363), 567–569, 1998. [51](#)
- [21] Li, J., Schneider, W.-D., Berndt, R., Delley, B. Kondo scattering observed at a single magnetic impurity. *Physical Review Letters*, **80** (13), 2893, 1998. [51](#)

Publicaciones

Parte de esta tesis fueron publicadas en el siguiente artículo:

Pari, Nayra A. Álvarez, D. J. García, and Pablo S. Cornaglia. “Quasiparticle mass enhancement as a measure of entanglement in the Kondo problem.” arXiv preprint arXiv:1910.03352 (2019).

Agradecimientos

A mi director Pablo S. Cornaglia por aceptarme como alumna, por brindarme su apoyo incondicional, su gran paciencia y generosidad para transmitir su conocimiento. También, por toda la ayuda en la búsqueda de un doctorado y varias actividades académicas. Un agradecimiento muy especial al Dr. Daniel García por proveer el código numérico de DMRG y asistencia para su utilización y para realizar las adaptaciones del mismo necesarias para el cálculo de la entropía de entrelazamiento en el modelo de Kondo. Espero seguir trabajando con ellos a futuro.

Al Instituto Balseiro por la beca que me permitió finalizar mis estudios de Licenciatura y Maestría, a todos mis compañeros con los que compartí más de 3 años en Bariloche, en especial a mis amigos cubanos que fueron mi familia, sobre todo a Ernesto, Omelio, Eduardo Ernesto, Hernán, Jose, Felix y Samuel. A mi familia en Bolivia, Pedro, Eva y Wara que siempre estuvieron pendientes por mi salud física y mental.

Un profundo agradecimiento a Karen, por su apoyo para participar en eventos académicos, sus buenos consejos y las buenas charlas que alegraron estos últimos meses de la Maestría. Gracias por todo Karen!

A Ignacio, por su compañía, amor y comprensión. Aún no sé que me depara el futuro pero, siempre estarás en mi corazón.

