



UNIVERSIDAD NACIONAL DE SAN ANTONIO  
ABAD DEL CUSCO

---

FACULTAD DE CIENCIAS  
ESCUELA PROFESIONAL DE FÍSICA

Efectos de la aperiodicidad química sobre el  
calor específico en el modelo del collar de  
Kondo a temperatura finita

T E S I S

para optar al título profesional de:

**Físico**

PRESENTADO POR:

**Br. Gustavo Cuba Supanta**

ASESOR:

Mg. Miriam H. Romero Peña (UNSAAC)

CO-ASESOR:

Dr. Carlos V. Landauro Sáenz (UNMSM)



Cusco, febrero de 2020

## Dedicatoria

---

*La culminación de la presente tesis para obtener el Título Profesional de Físico, a sido un objetivo pendiente en esta maravillosa carrera de Ciencias Físicas de largo tramo. Todo esto es dedicado especialmente a mi esposa Milida Zarella e hija Qori Fernanda por brindarme su compañía, apoyo, paciencia y amor. ¡Mil gracias mis amores!.*

*También estoy agradecido a mis estimados padres Benigna y Santiago y mi hermano José Carlos quienes siempre están constantemente pendientes de mí apoyándome.*

# Agradecimientos

---

En primer lugar, quiero agradecer a mi asesora, Mg. Miriam Romero Peña docente del Departamento Académico de Física de la Universidad Nacional de San Antonio Abad del Cusco (DAF-UNSAAC) y a mi co-asesor, Dr. Carlos V. Landauro Sáenz docente del Departamento Académico de Física del Estado Sólido de la Universidad Nacional Mayor de San Marcos (DAFES-UNMSM) por brindarme ambos su amistad, asesoramiento y apoyo, lo cual hizo posible la realización el presente trabajo de tesis. En estas mismas líneas agradezco a mis amigos y colegas Dr. Daniel Reyes, Mg. Heisemberg Tarazona y Mg. Robert Espinoza con los cuales hicimos posible una publicación que es la base de la presente tesis.

Seguidamente deseo agradecer a los docentes del DAF-UNSAAC que hicieron posible mis ganas de estudiar las hermosas Ciencias Físicas en nuestra *alma máter*, estoy agradecido a ellos por sus enseñanzas, valiosos consejos y su amistad brindada. Igualmente, quisiera agradecer a los docentes del Departamento Académico de Matemáticas por las clases a las que asistí como alumno libre en mis años de estudiante de pregrado. También agradezco al personal administrativo y trabajadores tanto de la biblioteca como del comedor universitario por sus servicios. Por último agradezco a mis amigos y compañeros por su confianza y por compartir sus experiencias académicas.

# Resumen

---

En el presente trabajo de tesis se estudia el efecto de la modulación de intercambio aperiódica (aperiodicidad química) en la brecha de espín y el calor específico a temperatura finita empleando el modelo del collar de Kondo para dos y tres dimensiones. En este modelo, se utiliza una representación para los electrones localizados y de conducción en términos de los operadores locales de singletes y tripletes (campo medio de operadores de enlace), además se utiliza un esquema de desacoplamiento de las funciones de Green para encontrar la relación de dispersión para las excitaciones del sistema. Las soluciones obtenidas, para la brecha de espín de Kondo y el calor específico en la fase paramagnética, fueron mediante métodos numéricos.

Los resultados respecto a la influencia de la aperiodicidad química en la brecha de espín muestran puntos críticos cuánticos en dos y tres dimensiones ( $(t/J_L)_c \approx 0.69$  y  $0.38$ ) a temperatura nula, además los exponentes críticos observados fueron  $\nu z \approx 1$  y  $0.5$  para dos y tres dimensiones, respectivamente. Sin embargo, a temperatura finita la brecha de espín en dos dimensiones no presenta ningún punto crítico cuántico, al contrario de tres dimensiones donde si existe un valor crítico que indica una transición de fase. Por otra parte, los resultados del efecto de aperiodicidad química sobre el calor específico en la fase paramagnética a temperaturas de  $k_B T < J_L$  muestran dos casos: el primero es un comportamiento de ley de potencia en la trayectoria del régimen fuera del líquido de Fermi (*Non-Fermi liquid*) y el segundo es una disminución exponencial a bajas temperaturas en el estado del líquido de espín de Kondo (*Kondo spin liquid*). Todos nuestros resultados muestran una concordancia con la teoría de escalamiento (*scaling behavior*) y otros resultados previos.

# Índice general

---

Índice de figuras	IX
Índice de tablas	XI
<b>I Aspectos generales</b>	<b>1</b>
<b>II Marco teórico</b>	<b>9</b>
<b>1. Introducción</b>	<b>11</b>
1.1. Transiciones de fase ordinarias . . . . .	11
1.2. Transiciones de fase continuas . . . . .	13
1.2.1. Efectos cuánticos próximos al punto crítico cuántico . . . . .	16
1.2.2. Teoría de escalamiento en las transiciones de fases cuánticas . . . . .	17
1.3. Materiales de fermiones pesados . . . . .	18
1.3.1. Física de los fermiones pesados . . . . .	21
1.3.2. Comportamiento de los fermiones pesados en cuasicristales . . . . .	25
<b>2. Conceptos sobre las redes de Kondo</b>	<b>29</b>
2.1. Efectos de interacción . . . . .	29
2.1.1. Efecto Kondo . . . . .	29
2.1.2. Interacción RKKY . . . . .	31
2.1.3. Competición entre el efecto Kondo y la interacción RKKY . . . . .	32
2.2. Redes de Kondo . . . . .	33
2.2.1. Modelo de Anderson . . . . .	33
2.2.2. Modelo de la red de Kondo . . . . .	34
2.2.3. Modelo del collar de Kondo (KNM) . . . . .	36
<b>3. Hamiltoniano efectivo aperiódico del KNM</b>	<b>41</b>
3.1. Secuencia de Fibonacci . . . . .	42
3.2. Aproximación de campo medio en operadores de enlace . . . . .	43
3.3. Energía libre de la fase paramagnética . . . . .	46
3.4. Ecuaciones auto-consistentes del modelo del collar de Kondo . . . . .	47
3.5. Soluciones empleando el método de Broyden . . . . .	48

<b>III</b>	<b>Resultados y discusión</b>	<b>51</b>
<b>4.</b>	<b>Efectos de la modulación de intercambio aperiódico del KNM</b>	<b>53</b>
4.1.	Influencia de la aperiodicidad química sobre la brecha de espín . . . . .	53
4.1.1.	Influencia a temperatura nula . . . . .	55
4.1.2.	Influencia a temperatura finita . . . . .	57
4.2.	Influencia de la aperiodicidad química sobre el calor específico . . . . .	59
4.2.1.	Influencia del acoplamiento Kondo en 2D y 3D . . . . .	60
4.2.2.	Regímenes cerca de la temperatura nula . . . . .	60
4.2.2.1.	Caso: <i>Non-Fermi liquid</i> . . . . .	61
4.2.2.2.	Caso: <i>Kondo spin liquid</i> . . . . .	62
<b>5.</b>	<b>Conclusiones y perspectivas</b>	<b>65</b>
5.1.	Conclusiones . . . . .	65
5.2.	Perspectivas . . . . .	66
<b>A.</b>	<b>Complementos de los métodos analíticos</b>	<b>67</b>
A.1.	Representación de operadores de Sachdev . . . . .	67
A.2.	Esquema de las Funciones de Green . . . . .	71
<b>B.</b>	<b>Complementos de los métodos numéricos</b>	<b>75</b>
B.1.	Programa principal para determinar el calor específico en 2D . . . . .	76
B.2.	<i>Script</i> para compilar el resto de programas . . . . .	77
B.3.	<i>Script</i> para calcular el calor específico en función de $t/J_L$ , $\xi$ y $F_n/F_{n-1}$ . . . . .	77
<b>C.</b>	<b>Publicación relacionada con la tesis</b>	<b>79</b>
	<b>Bibliografía</b>	<b>81</b>

# Índice de figuras

---

1.1.	Diagrama representativo de los estado de la materia. . . . .	11
1.2.	Esquema de una transición de fase ordinaria. . . . .	12
1.3.	Transición estructural y magnética de primer orden. . . . .	13
1.4.	Transición superconductor de segundo orden. . . . .	14
1.5.	Esquema del diagrama de fase próximo al QCP. . . . .	16
1.6.	Diagrama de Kmetko-Smith de momentos localizados. . . . .	19
1.7.	Diagrama de fases temperatura-campo magnético del $YbRh_2Si_2$ . . . . .	22
1.8.	Diagrama de fases superconductoras del $CePd_2Si_2$ y $BaFe_2(As_{1-x}P_x)_2$ . . . . .	23
1.9.	Diagramas de fases T-H del cuasicristal $Au - Al - Yb$ . . . . .	26
2.1.	Diagrama de Doniach de regímenes antiferromagnético y líquido de Fermi. . . . .	33
2.2.	Diagrama esquemático del KLM. . . . .	35
2.3.	Diagrama esquemático del KNM. . . . .	37
2.4.	Diagrama de fase del KNM desde el grupo de renormalización. . . . .	37
2.5.	Diagrama de fase del KNM con datos experimentales. . . . .	38
3.1.	Estructura periódica, aperiódica y desordenada. . . . .	41
3.2.	Diagrama esquemático del KNM aperiodico. . . . .	43
3.3.	Esquema del método de Broyden. . . . .	47
3.4.	Solución de la brecha de espín en 2D a temperatura nula. . . . .	49
3.5.	Solución de la brecha de espín en 2D a temperatura finita. . . . .	50
4.1.	Reproducción de resultados para 2D mediante el método de Broyden. . . . .	54
4.2.	Brecha de espín a temperatura nula como función de $t/J_L$ en 2D para diferentes valores de $\xi$ y $F_n/F_{n-1}$ . . . . .	56
4.3.	Brecha de espín a temperatura nula como función de $t/J_L$ en 3D para diferentes valores de $\xi$ y $F_n/F_{n-1}$ . . . . .	57
4.4.	Brecha de espín a temperatura finita como función de $t/J_L$ en 2D para diferentes valores de $\xi$ y $F_n/F_{n-1}$ . . . . .	58
4.5.	Brecha de espín a temperaturas finitas como función de $t/J_L$ en 3D para diferentes valores de $\xi$ y $F_n/F_{n-1}$ . . . . .	59
4.6.	Variación de $\gamma$ en función de $T^*$ para $\xi = 1.0$ y diferentes acoples Kondo en 2D y 3D. . . . .	61
4.7.	Variación del $C$ en la trayectoria NFL como función de la temperatura en 2D y 3D. . . . .	62

## ÍNDICE DE FIGURAS

---

4.8. Variación del $C$ en el estado KSL como función de la temperatura en 2D y 3D. . . . .	63
B.1. Diagrama de flujo para determinar el calor específico. . . . .	75

# Índice de tablas

---

3.1. La cadena de Fibonacci. . . . .	42
A.1. Estados singlete y triplete para un par de espines- $\frac{1}{2}$ situados en un sitio- $i$ de una red. . . . .	68

Parte I

# Aspectos generales

# Planteamiento, formulación y justificación del problema

---

## Planteamiento del problema de investigación

El presente proyecto de tesis está direccionado a realizar un estudio de la modulación del acoplamiento de intercambio aperiódica sobre el calor específico en sistemas de fermiones pesados en dos y tres dimensiones. Este tipo de estudio es tecnológicamente atractivo debido a que sistemas de fermiones pesados tipo Cuasicristales poseen propiedades potenciales para la industria, e incorporar esta característica aperiódica en modelos de espín  $\frac{1}{2}$  es un reto actual para los investigadores en el área de la Materia Condensada y Física del Estado Sólido.

Por lo tanto, modelar la aperiodicidad en el acoplamiento de intercambio magnético sobre las propiedades físicas, como la brecha de espín y el calor específico, es uno de los problemas de investigación que se desarrolla en el presente proyecto. Dicho proyecto se realiza mediante un estudio analítico y numérico de las ecuaciones fundamentales de este sistema de espines cuánticos.

## Antecedentes

En el que hacer cotidiano ligeramente nos damos cuenta de lo esencial que son las transiciones de fase y de la influencia que generan las bajas temperaturas en la materia<sup>1</sup>, pues regiones cerca del cero absoluto resultaron ocultar fenómenos cuánticos inesperados como superconductividad, superfluidez, magnetismo, entre otros (21, 70). Un caso particular son las transiciones de fase ordinarias, que juegan un rol importante en la vida diaria, estos eventos son por ejemplo la solidificación del agua, la fusión del hielo, la ebullición del agua, e incluso los cambios de fase que presentan los materiales cuando hierven o se evaporan. Además, un tanto complicados como una transición de un metal al estado superconductor al bajar la temperatura o el comportamiento del Helio líquido cerca del cero absoluto fueron fenómenos cruciales para la clasificación de transiciones de fase de diferente orden o especie.

---

<sup>1</sup>Una fase de la materia es una región estable donde todas sus propiedades físicas se mantienen uniformes. Además, en el límite de la escala de temperatura absoluta su energía libre adquiere un valor mínimo, donde los átomos tienen un movimiento vibracional mínimo.

---

En relación al He líquido; importantes avances experimentales tuvieron lugar en 1908, año en el cual Heike Kamerlingh Onnes descubrió la superconductividad al licuar por primera vez el He con lo cual fue galardonado con el premio nobel en Física en el año de 1913<sup>1</sup>. Lo trascendental de este acontecimiento experimental fue lograr la primera clasificación de las transiciones de fase (70). En 1932, se obtuvo un descubrimiento definitivo de una inusual transición de fase del He líquido por parte de W. H. Keesom, este descubrimiento ayudó a plantear la interrogante de cuántos tipos de transición existen y cómo se podrían clasificar. Posteriormente en 1933 Paul Ehrenfest presentó el primer esquema completo para clasificar las transiciones de fase de la materia (53). Según el esquema de Ehrenfest la transición del He fue clasificada como una transición de fase de segundo orden y las transiciones ordinarias de la materia como transiciones de fase de primer orden.

Posteriormente se descubrieron otras transiciones de fases importantes en aleaciones a bajas temperaturas, estas fases de la materia exhiben propiedades y simetrías con potenciales aplicaciones tecnológicas en beneficio de la humanidad. Las transiciones de fase cuántica (QPT, del inglés *quantum phase transition*) son transiciones entre diferentes estados cuánticos de la materia, generalmente cerca al cero absoluto; incluso a temperatura cero cualquier sistema cuántico posee fluctuaciones cuánticas que conducen a un estado diferente de la materia. De manera contraria a las transiciones de fase clásicas, las QPTs pueden ser accesadas mediante la variación de un parámetro de orden físico, tal como campo magnético, presión, o sustitución química (concentración de dopantes).

Sin embargo, en estos años, un tipo de transición de fase cuántica a temperatura nula ha venido atrayendo la atención de los investigadores<sup>2</sup>, en el cual el punto de transición que separa las fases es denominado punto crítico cuántico (QCP, del inglés *quantum critical point*), donde el orden es destruido debido a las fluctuaciones cuánticas (gobernadas por el principio de incertidumbre de Heisenberg). En realidad, estas QPTs son las transiciones presentes en fermiones pesados (141), superconductores de alta temperatura crítica (111), condensados de Bosé-Einstein de gases licuados (6) y condensados de Bosé-Einstein de excitaciones elementales (87).

En este sentido, en el presente trabajo de tesis se emplea un modelo de Kondo para los compuestos de fermiones pesados; en dichos sistemas se observan propiedades emergentes asociadas a una ruptura espontánea de simetría surgiendo un fenómeno crítico al variar la intensidad de sus respectivos parámetros de interacción. Además, las correlaciones electrónicas en estos sistemas ejercen gran influencia en las propiedades físicas en la proximidad de una QPT (23). Sin embargo, para abordar el estudio en una QPT de fermiones pesados se asume que los exponentes críticos alrededor de la transición de fase dependen de la dimensión del sistema (bi- y tri-dimensional); además, se requiere emplear una aproximación a la representación de operadores de espín (113), la cual es

---

<sup>1</sup>Esto se consiguió enfriando la fase gaseosa del He mediante Hidrógeno líquido y comprimiendo por debajo de  $10^2 atm$  de presión.

<sup>2</sup>Estas transiciones a temperatura nula denominaremos de aquí en adelante como QPT (112), y de hecho en este caso la estática y dinámica del sistema están fuertemente correlacionadas (23, 47).

---

ampliamente utilizada en problemas con sistemas de espín- $\frac{1}{2}$  (para más detalles véase el apéndice A), que ayuda a relacionar los grados de libertad de los espines con la red cristalina del sistema en estudio.

En tal contexto, estudios previos de las propiedades físicas de sistemas de espines cuánticos sobre estructuras espaciales moduladas han estado atrayendo un amplio interés debido a la gran sensibilidad a los detalles estructurales en tales sistemas (54, 55, 105, 148). Por ejemplo, en sistemas cuasicristalinos reales (124, 145) con aperiodicidad estructural (55, 148) y química (49, 50, 104), las propiedades físicas difieren fuertemente de sus fases cristalinas correspondientes (56, 57). En este escenario, se ha observado recientemente un comportamiento tipo fermión pesado con criticalidad cuántica en el compuesto del cuasicristal icosaédrico  $Yb_{15}Al_{34}Au_{51}$  y su aproximante cristalino  $Yb_{14}Al_{35}Au_{51}$  (33, 78, 123, 145), donde las mediciones de la susceptibilidad magnética ( $\chi$ ) y el calor específico ( $C$ ) divergen según la temperatura se acerca al cero absoluto.

Sin embargo, algunos investigadores han afirmado que este comportamiento fuera del régimen del líquido de Fermi (NFL, del inglés *non-Fermi liquid*) se debe a una correlación fuerte de la fluctuación de valencia crítica del  $Yb$  y de la zona de Brillouin pequeña que refleja la celda unitaria grande (142, 144, 146). Este comportamiento singular se ha estudiado utilizando el modelo de impurezas de Anderson para un solo momento local acoplado a los electrones de conducción en una geometría aproximante (8). El resultado principal de este estudio reporta que el comportamiento NFL de  $\chi$  y  $C$  se debe a una distribución amplia de la ley de potencia de la temperatura de Kondo que apantalla una fracción enorme de los momentos magnéticos hasta temperaturas muy bajas.

En estos sistemas de fermiones pesados se identifican dos tipos de electrones; los electrones de conducción, que corresponden a los orbitales  $s$ ,  $p$  y  $d$  que se mueven a través de la red cristalina y los electrones localizados, que corresponden a los orbitales  $f$ . La interacción entre estos electrones produce una competencia entre los dos efectos. El primero, el efecto Kondo, que tiende a apantallar el momento magnético localizado de electrones del orbital  $f$  y genera un estado fundamental no magnético. La segunda, llamada interacción Ruderman-Kittel-Kasuya-Yosida (RKKY), que es un intercambio indirecto entre los iones magnéticos, mediado por los electrones de conducción y favorece el orden magnético de largo alcance. Estos efectos están contenidos en el modelo de collar Kondo (KNM, del inglés *kondo necklace model*) (35), que descuida las fluctuaciones de carga y considera solo las fluctuaciones de espín. Además, trabajos previos sobre el KNM en una red de cadena de una dimensión mostró que el KNM puro a temperatura cero (59) y temperatura finita (119) no presenta ningún orden magnético de largo alcance.

Por otro lado, los estudios llevados a cabo en dimensiones mayores (dos y tres dimensiones) mostraron que el modelo presenta un punto crítico cuántico (QCP), donde la fase con brecha (denominada *gapped*) no magnética llega a cero y al mismo tiem-

---

po aparece una fase sin brecha (denominada *gapless*) magnética (14, 102, 157). El KNM también se empleó para estudiar sistemas de fermiones pesados bajo un campo magnético (139), considerando entrelazamiento magnético y térmico (115), *crossover* dimensional (99, 100), anisotropía (71, 101, 107, 114) y también para estudiar el papel de una modulación de intercambio aperiódico (aperiodicidad química) en materiales de fermiones pesados (104).

Vale la pena comentar, que el comportamiento crítico cuántico termodinámico y las propiedades físicas del KNM se han estudiado utilizando la aproximación de campo medio del operador de enlace ampliamente, donde se encontraron relaciones analíticas para la brecha de espín (*spin-gap*), la línea Néel crítica y el calor específico cerca del QCP (75, 102). Sin embargo, con base en estos trabajos previos, se introduce en la modulación aperiódica química una secuencia de Fibonacci en el acoplamiento Kondo antiferromagnético (AF con  $J < 0$ ) a la temperatura finita para estudiar sus efectos sobre el calor específico. Este estudio se realiza a lo largo de la llamada trayectoria del NFL y en la región del estado del líquido de espín de Kondo (KSL, del inglés *Kondo spin liquid*), donde el límite de acoplamiento fuerte es adecuado. Además, se comparan nuestros resultados numéricos en dos y tres dimensiones con expresiones analíticas que se encontraron considerando un acoplamiento Kondo independiente por sitio (102).

Con estos antecedentes, en el presente trabajo de tesis se realiza un análisis de la brecha de espín ( $\Delta/J_L$ ) y el calor específico ( $C$ ) en el modelo de collar de Kondo en dos y tres dimensiones, considerando una modulación de intercambio aperiódica a través de una representación para los electrones localizados y de conducción en términos de los operadores singlete y triplete. Además, este análisis de la energía libre ( $F$ ) y del  $C$  pertenece a la fase paramagnética que considera dos casos particulares; la trayectoria del NFL (es decir, por encima QCP) y del estado del KSL.

## Formulación del problema

Es adecuado mencionar que este tipo de estudio contribuye con la investigación sobre el comportamiento de fermiones pesados empleando el modelo del collar de Kondo, pero la inclusión de la aperiodicidad química (modulación de intercambio aperiódica) en este modelo para determinar el calor específico establece múltiples interrogantes como:

1. ¿Cuál es la influencia de la aperiodicidad química sobre el calor específico?
2. ¿Cómo varía el calor específico en dos y tres dimensiones en la fase paramagnética?
3. ¿Cómo es el comportamiento del calor específico en el régimen NFL y KSL?

## Objetivos

### Objetivo general

Determinar los efectos de la aperiodicidad química sobre el calor específico empleando el modelo del collar de Kondo a temperatura finita.

---

## Objetivos específicos

1. Determinar la aperiodicidad química mediante la introducción de secuencias de Fibonacci y resolver las ecuaciones auto-consistentes en función de la temperatura para el calor específico.
2. Resolver numéricamente la expresión del calor específico en la fase paramagnética en dos y tres dimensiones.
3. Resolver numéricamente la expresión del calor específico en la fase paramagnética para diferentes regímenes (NFL y KSL).

## Hipótesis

Una vez implementada la aperiodicidad química en el modelo del collar de Kondo para determinar el calor específico, esperamos que: “El efecto aperiódico modifique el comportamiento del calor específico en función de la temperatura con relación a diferentes aproximantes de la secuencia aperiódica de Fibonacci”. Adicionalmente, es de esperarse que:

1. El efecto aperiódico sobre la brecha de espín cambie variando parámetros de la aperiodicidad y la dimensión del sistema.
2. El efecto aperiódico sobre el calor específico cambie variando parámetros de la aperiodicidad y la dimensión del sistema.
3. Los resultados mostrarán expresiones que correspondan a la ley de escalamiento en los dos regímenes NFL y KSL.

## Metodología

La metodología usada para desarrollar el mencionado proyecto se basa principalmente en métodos analíticos y numéricos. Estos métodos ayudan a determinar las soluciones de ciertas ecuaciones auto-consistentes que dependen de la temperatura, tanto en dos y tres dimensiones. Sin embargo, el método numérico de Broyden es implementado para el presente proyecto. Además, este método para obtener las soluciones de las ecuaciones auto-consistentes para el calor específico serán implementadas mediante programas realizados con el lenguaje Fortran y códigos `bash` (*scripts*), totalmente de uso libre.

## Impacto de la investigación

El conocimiento de la estructura y propiedades de sistemas complejos como son los fermiones pesados en Cuasicristales y sus aproximantes cristalinos que se desean investigar en el presente proyecto mediante métodos analíticos y numéricos es de relevancia para la comunidad científica desde el punto de vista fundamental y también como materiales candidatos para aplicaciones en la industria. Además, la contribución

---

de este proyecto posee el impacto importante en la capacitación y experiencia sobre los métodos numéricos para el estudio de materiales en el área de Física del Estado Sólido.

### **Tipo de investigación**

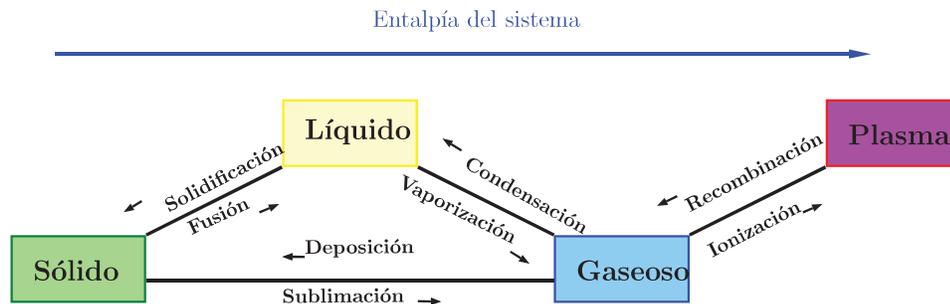
Este proyecto se enmarca dentro de proyectos de investigación de naturaleza teórica aplicada buscando la incorporación de la aperiodicidad química (más no estructural) en sistemas de espines cuánticos.

**Parte II**

**Marco teórico**

### 1.1. Transiciones de fase ordinarias

En un comienzo la descripción de las transiciones de fase se referían a cambios de fase entre estados de la materia sólido, líquido y gaseoso, y en ocasiones extremas y raras el estado de plasma (véase la figura 1.1). Por un lado, la fase de un sistema termodinámico  $(N,V,E)$  y los estados de la materia presentan propiedades físicas uniformes y homogéneas en equilibrio térmico, pero después de un cambio de fase debido a que el sistema se somete a un proceso bajo condiciones externas (temperatura, presión o campo magnético) estas propiedades a menudo cambian de manera discontinua. Por ejemplo, un líquido puede convertirse en gas al calentarlo hasta el punto de ebullición, esto conlleva a un cambio abrupto en la energía y el volumen. Además, la medición de las condiciones externas en las que ocurre el cambio se denomina transición de fase.



**Figura 1.1:** Diagrama representativo de los estado de la materia y sus respectivos procesos de las transiciones de fases básicas.

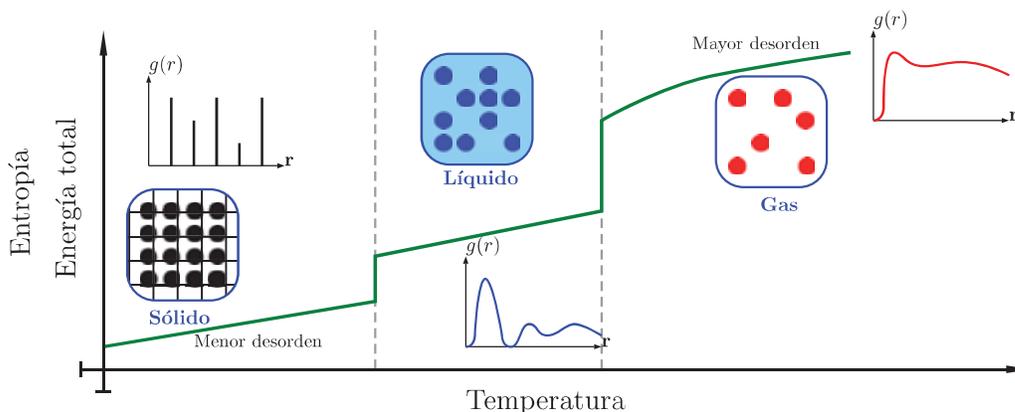
Las transiciones de fase a menudo rompen simetrías, el mecanismo por el cual el sistema elige un estado durante la transición de fase se llama ruptura espontánea de simetría<sup>1</sup>; además, el sistema selecciona uno de los dos estados posibles como un estado fundamental durante esta transición de fase. El comportamiento termodinámico en cada una de las fases puede caracterizarse por un parámetro de orden, que es un observable físico. El parámetro de orden cambia de manera no analítica en el punto

<sup>1</sup>Por ejemplo, el Hamiltoniano del modelo de Ising tiene una simetría espín-*flip*, mientras que el estado ferromagnético tiene una simetría espín *up* o espín *down*

## 1. INTRODUCCIÓN

de transición de fase (punto crítico). Algunos ejemplos de estos parámetros de orden son para ferromagnetos la magnetización, para ferroeléctricos la polarización, para materiales con cambio estructural la distorsión, para aleaciones binarias la concentración atómica, para superconductores la amplitud del par electrónico, etc.

En las transiciones de fase ordinarias o de primer orden, el parámetro de orden salta de manera discontinua a la temperatura crítica (por ejemplo a la temperatura de fusión  $T_c$ )<sup>1</sup>. Esto implica un calor latente de fusión,  $L = T_c \Delta S$ , mientras la temperatura permanece constante en el valor crítico durante la transición, la entropía y energía cambian abruptamente. En la figura 1.2 se muestra esquemáticamente este hecho, donde la energía cambia mediante saltos abruptos conllevando a cambios estructurales (observados mediante la función de distribución radial  $g(r)$ ). Este es un caso típico de una transición de fase estructural, sólido-líquido (orden-desorden) y líquido-gas, caracterizado por el cambio discontinuo en la energía a una temperatura crítica (temperatura de fusión o evaporación). Además, como la energía en términos del calor latente no se puede redistribuir instantáneamente, se produce una mezcla de fases durante la transición como una coexistencia de fases sólido-líquido cerca del punto de fusión.

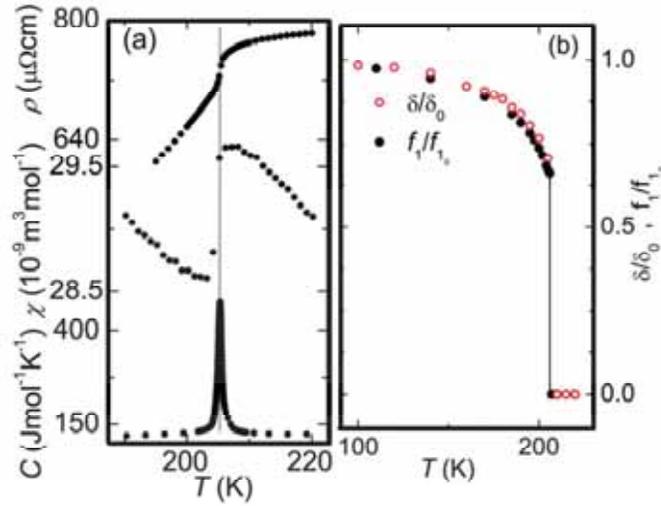


**Figura 1.2:** Esquema de una transición de fase ordinaria, donde se muestra la dependencia del parámetro de orden en función con la temperatura. Además, en cada fase se puede observar una representación estructural a través de su distribución atómica  $g(r)$ .

Sin embargo, en algunos sistemas existen un acople fuerte entre el parámetro de orden estructural y magnético, por ejemplo las aleaciones de  $SrFe_2As_2$ . En la figura 1.3 (b) se muestra que a  $T_0 = 205K$ , la red cristalina sufre una distorsión discontinua representada por el parámetro  $\delta/\delta_0$ . Esta transición estructural es acompañada de un orden magnético representado por  $f_1/f_{1_0}$ , donde la dependencia idéntica de  $\delta(T)$  y  $f_1(T)$  con la temperatura demuestra que los parámetros de orden estructural y magnético están

<sup>1</sup>En contraste, en las transiciones de fase continuas o de segundo orden, el parámetro de orden aumenta lenta y continuamente de cero a un valor finito en el punto crítico, implicando una discontinuidad en el calor específico a la temperatura crítica, mientras que la longitud de correlación y la susceptibilidad divergen en la temperatura crítica.

vinculados. Esos resultados indican inequívocamente que  $SrFe_2As_2$  se comporta de manera muy diferente a otros compuestos que sugieren una transición de fase de segundo orden a bajas temperaturas ( $\sim 10K$ ) desconectando el acople de los dos parámetros de orden (58). Además, en la figura 1.3 (a) se observa un pico muy agudo en la medición del calor específico a  $T_0$ , confirmando la transición estructural-magnética de primer orden con un calor latente de  $200J/mol$ .



**Figura 1.3:** Transición estructural y magnética de primer orden. (a) Resistividad, susceptibilidad y calor específico del sistema  $SrFe_2As_2$  cerca a la transición a  $205K$ . (b) Vinculación de los parámetros estructural y magnético ( $\delta(T)$  y  $f_1(T)$ ) normalizados a sus valores de saturación. Imágenes tomadas de la referencia (58).

## 1.2. Transiciones de fase continuas

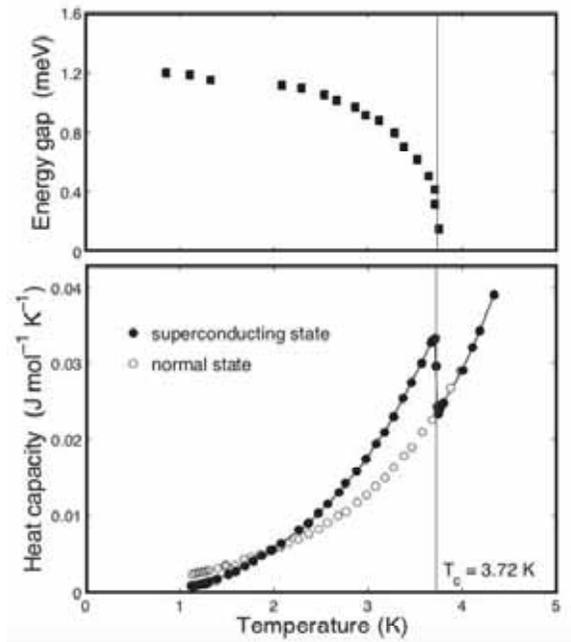
En relación a lo comentado en la introducción, algunos sistemas en la naturaleza presentan una transición de fase cuántica como los fermiones pesados, transiciones metal-aislante, transiciones magnéticas, superconductores con alta temperatura crítica, entre otros. Esta transición es controlada por un punto crítico cuántico (QCP). Además, el QCP se alcanza variando parámetros externos como la temperatura, presión, campo magnético, sustitución química o simplemente algún parámetro de interacción del Hamiltoniano, es decir, desde el punto de vista microscópico la transición es controlada por la competencia entre términos diferentes de interacción de electrones en un Hamiltoniano.

A continuación se muestra un ejemplo de estas transiciones de segundo orden para el caso del estaño ( $Sn$ ). En la parte superior de la figura 1.4 se muestra la dependencia del parámetro de orden superconductor con la temperatura, este parámetro está representado por una brecha de energía (*energy gap*) centrada en el potencial químico del

## 1. INTRODUCCIÓN

---

espectro electrónico. Además, se observa que el parámetro de orden disminuye continuamente por debajo de la temperatura de transición superconductor de  $T_c = 3.72K$  (136). Por otro lado, en la parte inferior de la figura 1.4 se observa la existencia de una discontinuidad en la capacidad calorífica a la temperatura de  $T_c$ , característico de un estado superconductor, en contraste con un estado normal. Los datos para el estado normal (estado no superconductor) son obtenidos aplicando un campo magnético para suprimir la superconductividad (26).



**Figura 1.4:** Transición superconductor de segundo orden. La brecha de energía y la capacidad calorífica del estaño ( $Sn$ ) en función de la temperatura (parte superior e inferior, respectivamente), donde se observa una transición en el punto crítico ( $T_c$ ). Imágenes editadas de las referencias (26, 136).

Sin embargo, cerca a una transición continua la correlación espacial de las fluctuaciones del sistema se convierten a largo alcance y próximo al QCP su longitud de escala típica diverge de la siguiente manera:

$$\zeta \propto |v|^{-\nu} \quad (1.1)$$

donde,  $\zeta$  representa la longitud de correlación,  $v$  es un parámetro adimensional que mide la distancia al QCP ( $v = [T_c - T]/T_c$ ), y  $\nu$  es el exponente crítico, además,  $T_c$  es la temperatura crítica a la cual ocurre la transición continua. También, existe a parte de la correlación espacial, la correlación temporal y que próximo al QCP su escala temporal típica para un decaimiento de las fluctuaciones diverge de la siguiente forma:

$$\iota_c \propto \zeta^z \propto |v|^{-\nu z} \quad (1.2)$$

donde,  $\iota$  es la correlación temporal,  $z$  representa el exponente crítico dinámico, es decir, que describe la dinámica intrínseca del sistema (47). Vale la pena comentar que las relaciones (1.1) y (1.2) son las divergencias responsables de los denominados fenómenos críticos, en los cuales el sistema se encuentra en el QCP ( $T = T_c$ ), la longitud de correlación y la correlación temporal son infinitos, posterior a esto el sistema muestra invariancia de escala. En consecuencia, algunas magnitudes del sistema dependen de parámetros externos mediante leyes de potencia, y las magnitudes importantes muestran un comportamiento asintótico descrito para algunos casos como:

♠ Calor específico (campo nulo)  $C \propto v^{-\alpha}$  (1.3)

♠ Susceptibilidad isotérmica  $\chi \propto v^{-\gamma}$  (1.4)

♠ Parámetro de orden (para la fase desordenada,  $\phi = 0$ )  $\phi \propto v^\beta$  (1.5)

♠ Función de correlación  $\langle \psi(r), \psi(0) \rangle \propto \frac{1}{r^{d-2+\eta}}$  (1.6)

donde,  $\alpha, \beta, \gamma, \eta, \delta$  representan los exponentes críticos, los cuales definen el comportamiento crítico próximo a la transición de fase, y  $d$  es la dimensión espacial. Además, estos exponentes están relacionados a través de desigualdades tales como:

♣ Desigualdad de Rushbrooke  $\alpha + 2\beta + \gamma \geq 2$

♣ Desigualdades de Griffiths  $\alpha + \beta(1 + \delta) \geq 2$   
 $\gamma \geq \beta(\delta - 1)$

♣ Desigualdad de Fisher  $\gamma \geq (2 - \eta)\nu$

♣ Desigualdad de Josephson  $d\nu \geq 2 - \alpha$

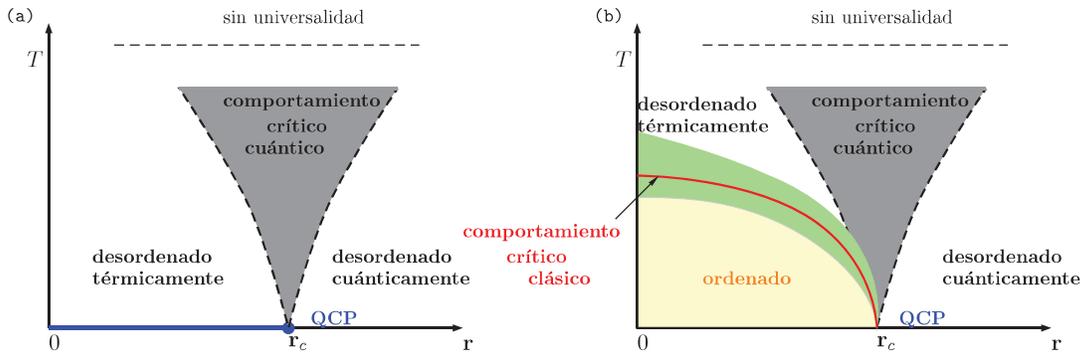
Por otra parte, es adecuado observar que en la criticalidad ( $T = T_c$ ) estas desigualdades entre los exponentes críticos son satisfechas por igualdades (conocidas como leyes de escalamiento (23)).

### 1.2.1. Efectos cuánticos próximos al punto crítico cuántico

Para determinar estos efectos, primero, se necesita comparar las energías asociadas a las fluctuaciones de las frecuencias típicas,  $\hbar\omega_c$ , y las fluctuaciones térmicas,  $k_B T$ . Las fluctuaciones de las frecuencias están relacionadas con la escala temporal típica,  $\tau_c \propto \omega_c^{-1}$ , la cual diverge cerca de la transición continua y de este modo se tiene que;  $\hbar\omega_c \propto |\nu|^{\nu z}$ .

Este último resultado ayuda a entender que las QPTs son diferentes a temperatura nula que a temperatura finita. Vale la pena mencionar que a temperatura finita, independiente del modelo empleado, las fluctuaciones importantes se dan cerca del QCP y se describen clásicamente de mejor manera cuando  $\hbar\omega_c \ll k_B T$ . En caso contrario, los efectos cuánticos serán relevantes cuando se considera;  $\hbar\omega_c \gg k_B T$ . Asimismo, el comportamiento crítico es completamente clásico cerca de la transición,  $T_c$ , es decir, características cuánticas serán irrelevantes cuando  $|\nu| < T_c^{1/\nu z}$ .

Por otro lado, el comportamiento de las transiciones a temperatura nula en función de un parámetro de orden,  $r$  (presión, sustitución química o campo magnético), es siempre determinado por las fluctuaciones cuánticas relevantes. Además, para temperaturas demasiado bajas ( $T_c \rightarrow 0$ ) los efectos cuánticos son observados experimentalmente influyendo en las transiciones de fase (23). Sin embargo, la competencia entre estas fluctuaciones produce un diagrama de fase esencialmente importante en la proximidad del QCP que denominaremos  $r_c$ , siempre y cuando exista un orden de largo alcance a temperatura nula o finita.



**Figura 1.5:** Esquema del diagrama de fase (temperatura en función del parámetro de control) en la vecindad del QCP, donde el orden existe a temperatura nula (a) y temperatura finita (b). En (a) la línea azul representa la fase ordenada a  $T=0$ . En (a) y (b) las líneas discontinuas indican la frontera del comportamiento crítico cuántico bajo la relación  $k_B T > \delta^{\nu z}$ . En (b) la línea roja separa la fase ordenada de largo alcance de la desordenada térmicamente, donde próximo a esta línea el comportamiento crítico es clásico. Figuras editadas de la referencia (140).

En la figura 1.5 (a) se observa un ordenamiento a  $T = 0$ , por ejemplo sistemas de espines cuánticos en dos dimensiones donde el orden es prohibido por el teorema de

Mermin-Wagner (80). En este caso, el comportamiento a temperatura finita es caracterizado por tres regiones bien definidas según el parámetro de orden, estas regiones están separadas por *crossovers* que determinan la dependencia del comportamiento crítico bajo la influencia de las fluctuaciones térmicas y cuánticas. En el dominio desordenado térmicamente, el orden es destruido principalmente por el efecto de la temperatura, mientras que para el dominio desordenado cuánticamente el sistema es gobernado esencialmente por las fluctuaciones cuánticas. Por lo que entre estos dominios se encuentra la región del comportamiento crítico cuantico (19, 20). La frontera de esta región es determinada por la condición;  $k_B T > \hbar \omega_c \propto \delta^{\nu z}$ , donde  $\delta = |r - r_c|$  establece la distancia hacia el QCP, y donde la criticalidad es fijada por las fluctuaciones térmicas.

Asimismo, la región crítica cuántica es controlada por las excitaciones térmicas de su estado fundamental, cuya característica es la ausencia de cuasipartículas convencionales. En consecuencia, esto causa que las variables termodinámicas tengan un comportamiento no convencional fuera del régimen del líquido de Fermi (NFL). Además, cuando el orden también existe a temperatura finita, el diagrama de fase se convierte en un esquema más sustancial. Por ejemplo, en la figura 1.5 (b) se observa una transición de fase al variar el parámetro de orden  $r$  a bajas temperaturas, y cerca del QCP las fluctuaciones clásicas comienzan a dominar a temperatura finita hasta lograr ser despreciables a medida que se disminuye la temperatura al QCP ( $T \rightarrow 0, r = r_c$ ). Al llegar al QCP solamente las fluctuaciones cuánticas sobreviven y son las que caracterizan al sistema.

### 1.2.2. Teoría de escalamiento en las transiciones de fases cuánticas

Prosiguiendo con lo anterior, las QPTs se caracterizan debido a las divergencias de las longitudes de correlación espacial y correlación temporal,  $\zeta \sim \delta^{-\nu}$  y  $\iota_c \sim \delta^{-\nu z}$ , respectivamente; donde  $\delta$  mide la distancia hacia al QCP y  $z$  define la anisotropía entre la dimensión temporal y las dimensiones espaciales. En el caso anisotrópico se tiene que  $z=1$  y la divergencia temporal ( $\iota$ ) en la criticalidad ( $\delta=0$ ) es idéntica a la divergencia espacial (*zeta*). Por consiguiente, si se tiene medida la distancia al QCP como  $\delta \propto (J - J_c)$ , donde  $J$  es un parámetro del Hamiltoniano y en base a la hipótesis de Kadanoff (61), se asume que:

$$J' = B^{-y} J \tag{1.7}$$

$$\delta' = B^A \delta \tag{1.8}$$

$$\iota' = B^z \iota \tag{1.9}$$

donde  $B = \frac{L}{L'}$  define el factor de escalamiento y  $L, L'$  son las dimensiones del sistema original y del reescalado. Por lo tanto, se pueden relacionar los exponentes  $B$  e  $y$  con los exponentes críticos de tal manera que la longitud de correlación espacial escala de forma:  $\zeta'(|\delta'|) = \frac{\zeta(|\delta|)}{B}$ , y empleando la ecuación (1.8) se obtiene:  $\zeta'(B^A |\delta|) = \frac{\zeta(|\delta|)}{B}$ . Ahora, la expresión final de la longitud de correlación espacial en la vecindad de la criticalidad es:

$$\zeta = |\delta|^{-1/A} \zeta' \tag{1.10}$$

## 1. INTRODUCCIÓN

---

donde se asumió que  $B^A \delta = 1$  y  $B = |\delta|^{-1/A}$ . Además, en concordancia con  $\zeta \sim \delta^{-\nu}$  el exponente  $\nu$  es expresado como:

$$\nu = \frac{1}{A} \quad (1.11)$$

Por otro lado, para determinar el exponente  $z$ , es necesario exigir que el principio de incertidumbre de Heisenberg sea invariante de escala ( $\Delta y \Delta \tau \geq \hbar$ ), donde la energía  $\Delta y$  debe escalar con otra energía  $J$  según la ecuación (1.7), y la parte temporal según la ecuación (1.9) de manera que se puede obtener lo siguiente:

$$B^{z-y} \Delta y \Delta t = \Delta y \Delta t, \implies z = y \quad (1.12)$$

También se establece que la parte singular de la energía libre a temperatura nula se comporta como;  $f_s = \frac{F_s}{L^d} = Jf(\delta)$ , y reescalando por  $L' = \frac{L}{B}$  se tiene:

$$f'_s = \frac{F_s}{(L')^d} = B^d f_s = J' f(\delta') \quad (1.13)$$

Y empleando otra vez las ecuaciones (1.7) y (1.8) se obtiene;  $B^d f_s = B^{-y} J f(B^A |\delta|)$ , y considerando  $B = |\delta|^{-1/A}$  se tiene:

$$\frac{f_s}{J} = |\delta|^{\frac{y+d}{A}} f(1) \quad (1.14)$$

donde la parte singular de la densidad de energía define el exponente  $\alpha$  y se comporta como;  $f_s \propto |\delta|^{2-\alpha}$ . Por lo tanto, con las relaciones para  $z$  y  $\nu$  definidas en (1.11) y (1.12) reemplazamos en la ecuación (1.14) se obtiene que la densidad de energía libre escala de la siguiente forma;  $f_s \propto |\delta|^{\nu(d+z)}$ , de este modo los exponentes satisfacen la siguiente igualdad:

$$2 - \alpha = \nu(d + z) \quad (1.15)$$

Sin embargo, es claro observar que esta última identidad es similar a la desigualdad de Josephson ( $d\nu \geq 2 - \alpha$ ), haciendo que la dimensión efectiva sea  $d_{eff} = d + z$  que satisface la igualdad en ambos casos. Esto significa que la dimensión del sistema juega un papel excepcional en este tipo de transiciones a temperatura nula ( $d_{eff} > d$ ). En consecuencia, las fluctuaciones más no sus interacciones se convierten irrelevantes y la criticalidad puede ser descrita por una teoría Gaussiana (criterio de Ginzburg). Por otra parte, si  $z=1$  el modelo cuántico de  $d$  dimensiones puede ser tratado como un modelo clásico en  $(d + 1)$  dimensiones (75). En el capítulo de resultados se observará que el exponente dinámico  $z$  para el modelo de collar de Kondo es igual a la unidad.

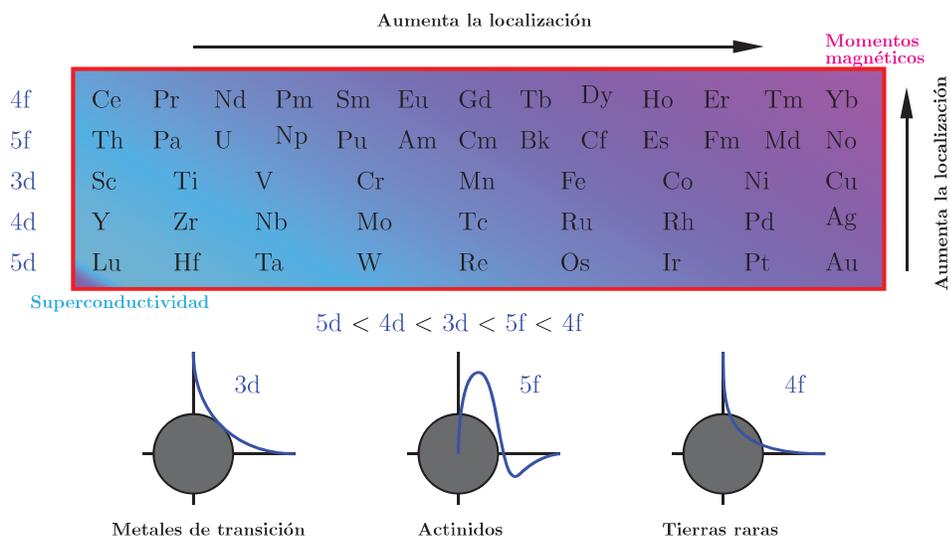
### 1.3. Materiales de fermiones pesados

Los materiales de fermiones pesados<sup>1</sup> son un ejemplo extremo, en el que un componente del sistema de electrones está altamente localizado, generalmente dentro de los

---

<sup>1</sup>Los fermiones pesados (HF, del inglés *heavy fermion*) son electrones fuertemente correlacionados inmersos en una red de momentos magnéticos localizados, en el cual su masa efectiva puede ser  $m_{eff} \approx 1000$  veces la masa del electrón ( $m_e$ ) en un metal normal.

orbitales  $f$  dando lugar a la formación de momentos magnéticos. La interacción de los momentos magnéticos localizados con el mar de electrones de conducción proporciona la fuerza impulsora para la física de electrones fuertemente correlacionados en estos materiales. Sin embargo, existen tendencias que gobiernan el comportamiento de los electrones fuertemente correlacionados, es decir, los electrones que interactúan con mayor fuerza tienden a situarse en orbitales parcialmente llenos que están bien ubicados alrededor del núcleo. La superposición débil entre estos orbitales de los átomos vecinos promueve la formación de bandas electrónicas estrechas, mientras que las interacciones entre electrones se maximizan cuando ocupan el mismo orbital altamente localizado (21).



**Figura 1.6:** Diagrama de Kmetko-Smith que muestra elementos de la tabla periódica con orbitales  $d$  y  $f$ , con tendencia general al incremento de los momentos localizados. Imagen editada de la referencia (21).

Con el fin de observar el incremento del grado de localización, los orbitales electrónicos parcialmente llenos de la tabla periódica pueden ordenarse y establecer dos tendencias; primero, los orbitales con números cuánticos principales más altos tienden a estar más deslocalizados como;  $5d < 4d < 3d < 5f < 4f$ . Segundo, a medida que se avanza desde los orbitales  $d$  a los  $f$  (a lo largo de la fila de la tabla periódica), el incremento en la carga nuclear reduce el tamaño de los orbitales. Estas dos tendencias están resumidas en el diagrama de Kmetko-Smith de la figura 1.6, donde las filas centrales de la tabla periódica se apilan en orden de la localización creciente. Los orbitales  $d$ , que se encuentran en el lado inferior izquierdo de este diagrama, son altamente itinerantes, lo que da lugar que los metales exhiban superconductividad convencional a bajas temperaturas. Por el contrario, los metales de los electrones de las tierras raras o los actínidos, ubicados en la parte superior derecha del diagrama, forman imanes o

## 1. INTRODUCCIÓN

---

materiales antiferromagnéticos<sup>1</sup>.

Vale comentar brevemente que para comprender los materiales de fermiones pesados se necesita entender como los electrones forman momentos localizados. Por ejemplo, un momento localizado es un electrón no apareado enlazado en un átomo aislado o ión. A temperaturas por debajo de la energía de ionización ( $|E_F|$ ), el único grado de libertad remanente de este electrón localizado es su momento magnético ( $\vec{M} = \mu_B \vec{\sigma} = \frac{e\hbar}{2m_e} \vec{\sigma}$ , donde  $\mu_B$  y  $\sigma$  son el magneton de Bohr y las matrices de Pauli, respectivamente)<sup>2</sup>. En particular, para un espín puro, el espín total es  $J = S$  y  $g = 2$ , pero para iones de tierras raras y actínidos, el momento angular orbital y de espín se combinan en un entidad única  $\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$  y  $g$  se encuentra entre 1 y 2. Por ejemplo, un ión de Cerio  $Ce^{3+}$  contiene un electrón desapareado  $4f$  en el estado  $4f^1$ , con  $l = 3$  y  $s = \frac{1}{2}$ . El acoplamiento espín-orbita da lugar a un multiplete con  $j = 3 - \frac{1}{2} = \frac{5}{2}$ , que consta de  $2j + 1 = 6$  orbitales degenerados  $|4f^1 : Jm\rangle$  ( $m_J \in [\frac{-5}{2}, \frac{5}{2}]$ ), con un momento magnético asociado  $M = 2.64\mu_B$ . Sin embargo, en forma general los HF's son materiales intermetálicos que contienen elementos metálicos y tierras raras (desde el Cerio  $Ce$  hasta el Iterbio  $Yb$ ) o actínidos (como el Uranio  $U$ ). Estos sistemas presentan una configuración del tipo  $4f^n 5d^1 6s^2$  y  $5f^n 6d^1 7s^2$  para las tierras raras y los actínidos, respectivamente<sup>3</sup>.

Por un lado, la inestabilidad en las capas  $f$  debido a la competencia de las interacciones de Kondo y RKKY proporciona un carácter ambiguo para los electrones de ser considerados como localizados o itinerantes (128, 129, 130). Por otro lado, los electrones de conducción suministrados por los elementos metálicos incrementan la interacción electrón-electrón en estos sistemas, observados en el valor mayor de la masa efectiva de los electrones de conducción. Por ejemplo para el cobre ( $Cu$ ), el orden de magnitud de los HF's (cuasipartículas) es de  $m_{eff} \in [100 - 1000]m_e$  (129). En ese sentido, la renormalización de la  $m_{eff}$  de los HF's ayuda a explicar muchas de las propiedades anómalas observadas experimentalmente en estos sistemas, particularmente en el estado líquido de Fermi (FL, del inglés *Fermi-liquid*).

Además, una característica común en estos sistemas es el comportamiento magnético a altas temperaturas, descrito por una susceptibilidad magnética proporcional al inverso de la temperatura; adicionalmente este comportamiento tipo-Curie está asociado con la presencia de un momento magnético del ión  $f$ . Pero cuando se reduce la temperatura en estos sistemas, la susceptibilidad se vuelve independiente de la temperatura correspondiente al comportamiento tipo-Pauli (25), suponiendo un aniquilamiento o blindaje del momento magnético del ión análogo al efecto Kondo (149). A pesar de mantenerse el problema de Kondo de impurezas magnéticas en una matriz metálica, el

---

<sup>1</sup>Los materiales que se encuentran en el *crossover* (cruce) entre estas dos regiones son particularmente interesantes debido a que estos sistemas están al límite del magnetismo.

<sup>2</sup>En un esquema clásico de momentos localizados se presenta el paramagnetismo de Curie con una susceptibilidad magnética a altas temperaturas ( $\chi(T) \sim \frac{M^2}{3(T-\theta)}$ ,  $M^2 = g^2 \mu_B^2 J(J+1)$  donde  $\theta$ ,  $J$ , y  $g$  son la temperatura de Curie-Weiss, número cuántico del momento angular total y la razón giromagnética, respectivamente).

<sup>3</sup>Ambos, con la capa  $f$  incompleta, mientras que los electrones de las capas  $d$  y  $s$  forman una banda de conducción.

*crossover* desde un comportamiento magnético a altas temperaturas hasta otro comportamiento no magnético disminuyendo la temperatura del sistema es un fenómeno que contiene una física peculiar (22, 24, 25).

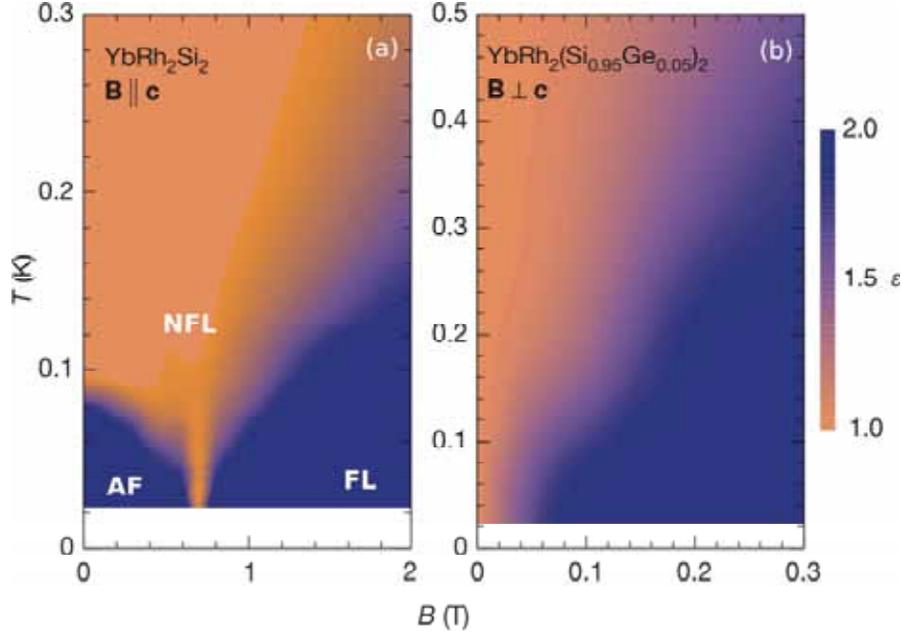
### 1.3.1. Física de los fermiones pesados

En general, como ya se había comentado, las propiedades físicas de los HFs están enmarcadas dentro de la competencia entre dos interacciones importantes (despreciando las fluctuaciones de carga). El primero es el efecto Kondo, que describe el blindaje parcial de los momentos magnéticos por los electrones de conducción (65, 66, 149). Y el segundo es la interacción RKKY que describe la interacción magnética colectiva de largo alcance entre los momentos localizados (62, 110, 153). Por lo que existen dos energías de interacción referenciales cuyas temperaturas características ( $T_K$  y  $T_{RKKY}$ ) dependen de la intensidad del parámetro de control ( $J/t$ ). Además, el estado magnético de los HFs es definido cuando la interacción RKKY es mayor que la interacción Kondo, y para el caso contrario se obtiene el estado no magnético.

Sin embargo, según la teoría de Landau sobre el FL (70), la susceptibilidad magnética ( $\chi(T)$ ) y el calor específico dividido por la temperatura ( $C(T)/T$ ) tiende a una constante en el límite en que  $T \rightarrow 0$ , además la resistividad eléctrica está expresada como;  $\rho(T) \sim \rho_0 + aT^2$ , donde  $\rho_0$  es la resistividad residual y  $a > 0$ . Otro grupo de compuestos de HFs presenta un comportamiento fuera del régimen del FL (NFL) diferente a lo descrito por la teoría de Landau. En este régimen  $\chi(T)$  y  $C(T)/T$  divergen de forma logarítmica o en ley de potencia cuando  $T \rightarrow 0$ , además la resistividad eléctrica varía potencialmente  $\rho(T) \sim T^\beta$  ( $1 < \beta < 2$ ) (130, 131), y la densidad de estados en la superficie de Fermi ( $\eta(E_F)$ ) diverge.

En este escenario, diferentes teorías fueron propuestas para explicar el comportamiento de NFL, y se puede mencionar a tres de ellas (130, 131); **(a)** modelos basados en presencia de desorden (10, 83, 86), **(b)** modelos de Kondo multicanales (28, 89), y **(c)** modelos basados en la proximidad de una transición magnética (138). Por ejemplo, los compuestos como  $UCu_{5-x}Pd_x$  son sistemas que presentan desorden mediante la concentración química ( $x$  toma valores de 1 y 2). En relación a estos resultados, Bernal y colaboradores propusieron el modelo de desorden de Kondo, donde las ligaduras de los HFs son descritas en términos de un conjunto de espines independientes acoplados a una nube de electrones de conducción (10). Por otra parte, Miranda y colaboradores consideraron añadir el rol de la interacción electrón-electrón y del desorden en el comportamiento de NFL (81, 82, 83). Otra contribución fue realizada por Castro-Neto y colaboradores, en la cual se consideró la competencia entre el efecto Kondo y la interacción RKKY además del desorden.

En relación a los modelos de multicanales, se consideraron diferentes bandas de electrones de conducción en el blindaje de los momentos localizados, estas diferentes bandas son asociadas a multicanales (29). Por ejemplo, el sistema  $UBe_{13}$  es descrito mediante este modelo. Y en relación al tercer modelo, la manipulación del parámetro de control  $J/t$  lleva al sistema al QCP donde se fija la transición de fase a temperatura



**Figura 1.7:** Diagrama de fases temperatura-campo magnético del  $\text{YbRh}_2\text{Si}_2$  ( $T$  en Kelvin y  $B$  en Tesla). (a) se muestra la supresión del ordenamiento magnético por el  $\vec{B} \parallel \vec{c}$ , donde a temperaturas muy bajas (región naranja) se observa el NFL alrededor del QCP ( $B_c = 0.66\text{T}$ ). (b) Efecto del dopaje de  $\text{Ge}$  sobre el QCP para  $\vec{B} \perp \vec{c}$  ( $B_c = 0.027\text{T}$ ,  $\rho_0 = 5\mu\Omega$ ). Imágenes tomadas de la referencia (30).

nula. En consecuencia, se espera que las interacciones entre las excitaciones elementales de las cuasipartículas y las fluctuaciones de espín expliquen el desaparecimiento del magnetismo en el punto crítico (24, 47, 130). Por ejemplo, el sistema  $\text{YbRh}_2\text{Si}_2$  describe un comportamiento de NFL cuando un campo magnético transversal (eje- $z$ ) se aplica (30). En la figura 1.7 (a) se muestra el diagrama de fases temperatura versus campo magnético ( $T - B$ ) para el  $\text{YbRh}_2\text{Si}_2$  (30), donde el comportamiento NFL fue encontrado en la región de color naranja que está definida por  $\Delta\rho(T) = (\rho(T) - \rho_0) \propto T^\epsilon$  ( $\epsilon = 1$ ), donde  $\rho_0 = 1\mu\Omega$  es la resistividad residual. La región de color azul define el comportamiento de FL y la fase antiferromagnética (AF) con  $\epsilon = 2$ .

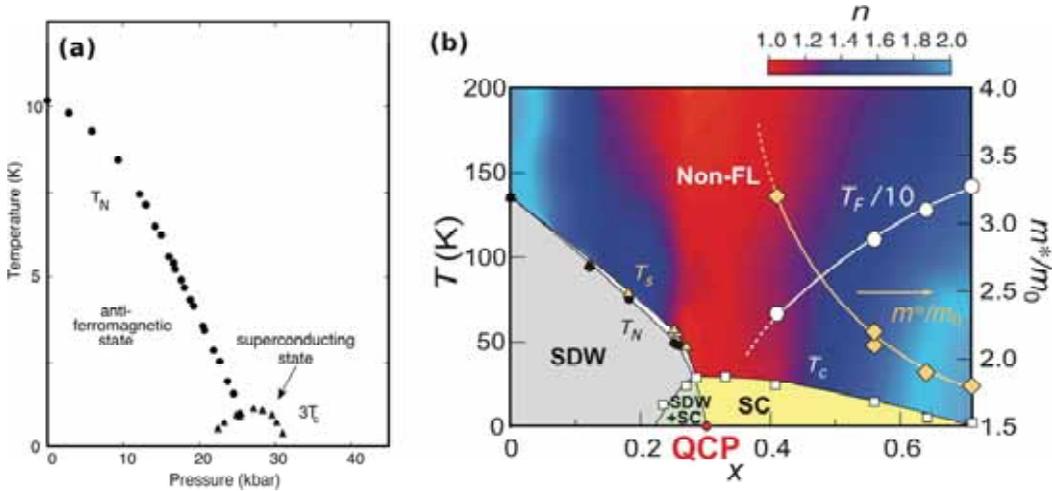
Incluso, Custers y colaboradores reportaron que cuando se dopa el  $\text{YbRh}_2\text{Si}_2$  con  $\text{Ge}$  se modula el QCP inducido químicamente por campos magnéticos (véase la figura 1.7 (b)), también existe un comportamiento universal del calor específico y resistividad en dependencia con la temperatura. Además, ellos inferieron que todo movimiento balístico de electrones se desvanece en un QCP, formando una nueva clase de conductor en el que los electrones individuales decaen dentro de movimientos colectivos que transportan corriente eléctrica (30).

### Estados fundamentales de los fermiones pesados

A continuación se describen de forma general la clasificación y variedad de estados fundamentales de los HFs, por ejemplo:

- (a) Superconductor en coexistencia con la fase antiferromagnética (98, 127).
- (b) Fase antiferromagnética (122).
- (c) Líquido de Fermi (21, 70).
- (d) Aisladores de Kondo (4, 15).

En detalle para el caso (a) se tienen compuestos como;  $UPt_3$  (132),  $UBe_{13}$  (42, 91),  $CeCu_2Si_2$  (127, 154),  $CePd_2Si_2$  (76),  $CeCu_2Ge_2$  (52),  $URu_2Si_2$  (120),  $CeRhIn_5$  (93), y  $CeCoIn_5$  (11, 92, 125). Lo importante en estos sistemas es que se induce la transición mediante la sustitución química de uno de los constituyentes, además, la inestabilidad para estos estados superconductores se presenta cuando el sistema entra en el régimen de FL. En la figura 1.8 (a) se muestra el diagrama de fases temperatura versus presión ( $T - P$ ) para el compuesto  $CePd_2Si_2$  (76), en la cual se observa la aparición de la fase superconductor alrededor del QCP cuando la temperatura está próxima al cero absoluto.



**Figura 1.8:** (a) Diagrama de fase superconductor temperatura-presión del  $CePd_2Si_2$ , donde la temperatura de Néel ( $T_N$ ) y la temperatura crítica ( $T_c$ ) superconductor están indicadas mediante  $\circ$  y  $\triangle$  que definen las fases ordenada (AF) y superconductor (SC). Imagen tomada de la referencia (76). (b) Diagrama de fase superconductor del  $BaFe_2(As_{1-x}P_x)_2$ , donde la transición al estado fundamental SDW a  $T_N$  es precedida por la transición estructural a  $T_s$ . El comportamiento de NFL es la región de color rojo observada por encima del domo superconductor alrededor del QCP ( $x = 0.3$ ). Imagen tomada de la referencia (45).

En la figura 1.8 (b) se muestra la fase superconductor del compuesto  $BaFe_2(As_{1-x}P_x)_2$  a  $T_c$ , además se muestra la evolución de la masa renormalizada  $\frac{m^*}{m_0} = \frac{m_{eff}}{m_e}$  y la tem-

## 1. INTRODUCCIÓN

---

peratura de Fermi  $T_F = \hbar e^2 A_k / 2\pi k_B m^*$  para  $x > 0.4$ . En este sistema la sustitución química isovalente de  $P$  por  $As$  en el compuesto original  $BaFe_2As_2$  ofrece una manera distinta de suprimir el orden magnético e inducir la superconductividad. También, se observa la fase ordenada SDW (del inglés *spin density wave*) y el domo superconductor (fases SDW-SC y SC), en el cual  $T_N$  decrete conforme se incrementa la concentración  $x$  hasta llegar continuamente al cero absoluto a  $x = 0.3$  (QCP). Y el comportamiento NFL es evidente por encima del domo superconductor y representa la región donde el exponente  $n$  expresada en la resistividad con la temperatura ( $\rho(T) = \rho(0) + aT^n$ ) está cerca a la unidad.

Para el segundo caso **(b)** se tienen compuestos como;  $U_2Zn_{17}$ ,  $UCd_{11}$ , y  $UCu_5$  en los cuales dejan de presentar orden magnético de largo alcance cuando son sometidos a presión evidenciando la existencia de un régimen de FL. Por el contrario, cuando se aplica presión negativa, es decir, mediante la sustitución química en el sistema  $CeRu_2Si_2$  puede inducirse antiferromagnetismo. Otro ejemplo de este estado fundamental (AF) es el sistema  $CeCu_{6-x}Au_x$ , con lo cual se puede mencionar que los HFs están próximos a una inestabilidad magnética. Además, Schröder y colaboradores observaron en  $CeCu_{6-x}Au_x$  la presencia de una fase AF para una concentración de  $x > 0.1$ , donde para  $x = 0.1$  la  $T_N$  se anula y el comportamiento del sistema en la región NFL es dominado por el QCP con una resistividad expresada como;  $\rho(T) = \rho_0 + aT$  ( $a > 0$ ) (122).

Para el tercer caso **(c)**, los compuestos que presentan el estado fundamental de un FL son  $CeCu_6$ ,  $UAl_2$ ,  $CeRu_2Si_2$ , y  $CeRu_2Ge_2$  estos sistemas no sufren inestabilidad a menos que estén a temperaturas cercanas al cero absoluto. Por ejemplo, la presión transforma al sistema  $CeRu_2Ge_2$  de un estado ferromagnético en un estado FL desordenado ( $67(kbar) < P < 140(kbar)$ ), donde la supresión del orden magnético se da a  $67(kbar)$  (134). Comparando estos resultados con los sistemas isoelectrónicos  $CeRu_2(Ge_{(1-x)}Si_x)_2$  se obtiene un diagrama de fases  $J$  de hibridización unificada, este diagrama es caracterizado por las escalas de energía FL y Kondo ( $T_{FL}$  y  $T_K$ ), con un comportamiento de NFL que aparece en  $T_{FL} = 0K$ , mientras que  $T_K$  sigue siendo finito (134). Finalmente, vale la pena mencionar que para el último caso **(d)** de aisladores de Kondo, se incluyó entre los HFs debido a que en estos sistemas las propiedades termodinámicas a temperaturas suficientemente altas se describen mediante un modelo de gas de electrones con masa renormalizada, ejemplos de estos compuestos son:  $FeSi$  (34),  $Ce_3Bi_4Pt_3$  (15, 51)<sup>1</sup>,  $SmB_6$  (150) y  $YbB_{12}$  (85).

Los **aisladores de Kondo** a pesar de ser aisladores en su estado fundamental a temperatura nula, tienen diversas propiedades físicas en común con los HFs metálicos, por ejemplo, la susceptibilidad magnética a altas temperaturas tiene un comportamiento tipo Curie-Weiss, sin embargo, a medida que el sistema se enfría la  $\chi$  tiende a un valor constante y en algunos casos llega a ser nula. Además, los iones  $f$  de las tierras raras, responsables de la dependencia de la susceptibilidad con la temperatura ( $\chi(T)$ ), son blindados por los electrones tipo- $s$  formando un estado singlete no magnético tipo

---

<sup>1</sup>En este sistema, la susceptibilidad decrece con la temperatura saturando en un valor finito debido a una contribución de Van Vleck (4).

Kondo a bajas temperaturas. Lo contrario ocurre con los HFs metálicos, donde los electrones de la banda de conducción quedan aparentemente localizados en sitios de las tierras raras al formar un par singlete con los momentos localizados, dando origen a un estado aislador y para formar este estado se requiere dos electrones por celda unitaria ( $f$ - $s$ ).

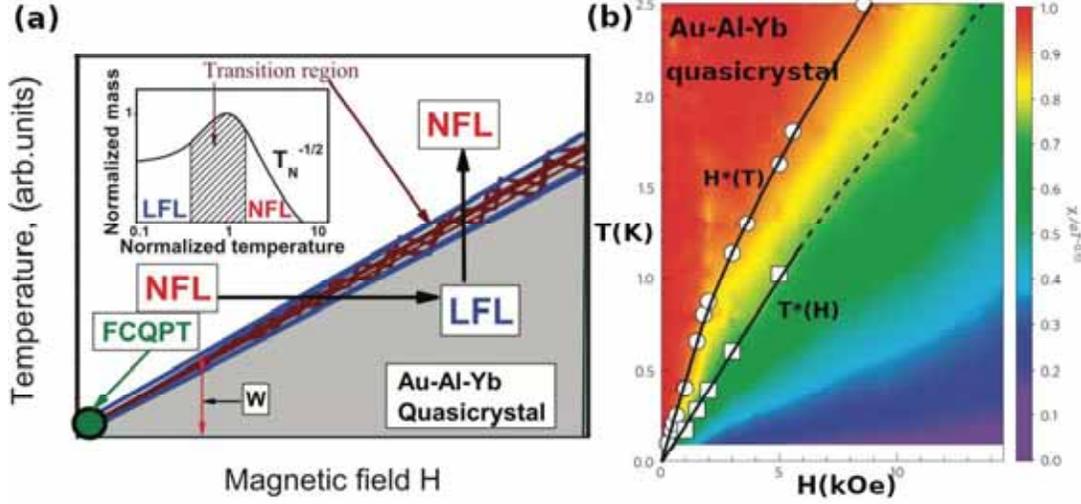
Sin embargo, algunos compuestos que se encuentran dentro de este grupo de aisladores de Kondo son (100):  $Ce_3Bi_4Pt_3$  [ $\Delta = 3.6meV$ ],  $SmB_6$  [ $\Delta = 2.3meV$ ],  $CeNiSn$  [ $\Delta = 0.3meV$ ],  $YbB_{12}$  [ $\Delta = 5.3meV$ ] y  $FeSi$  (definiendo  $k_B T \gg \Delta$ , donde  $\Delta$  es la brecha de energía). Este último compuesto es un semiconductor de estructura cúbica y presenta una  $\chi(T)$  y  $\rho(T)$  que tiende a cero exponencialmente con la temperatura. Algunos modelos populares que ayudan a describir a estos sistemas son el **modelo de Anderson** y el **modelo de la red de Kondo** (7, 35), sin dejar de lado el modelo de dos bandas que fue empleado principalmente para describir la transición metal-aislante (32).

### 1.3.2. Comportamiento de los fermiones pesados en cuasicristales

Como ya se comentó al inicio de este capítulo, recientemente se ha observado un comportamiento tipo HF en cuasicristales metálicos presentando una QPT (5, 8, 33, 77, 123, 135, 143, 144, 145). Los cuasicristales (QCs, del inglés *quasicrystals*) son caracterizados por la ausencia de simetría traslacional (aperiodicidad)<sup>1</sup>, esta característica ha atraído gran atención de estudio en estos años porque nuevas composiciones de QCs, aproximantes y fases metálicas complejas revelan propiedades mecánicas, magnéticas, termodinámicas y de transporte electrónico muy inusuales (57). Además, debido a que estos sistemas pueden brindar nociones básicas relacionadas con el estado crítico cuántico observado en metales de HFs (123). Sin embargo, reportes previos mencionan que algunos QCs se encuentran en una QPT de condensación de fermiones, donde los QCs poseen un comportamiento de NFL (estado crítico cuántico) y aplicando campo magnético se transforma en una fase FL, denominada también LFL (*Landau Fermi-liquid*) (123). Esta y otras características ubica a algunos QCs dentro de la familia de metales de HFs.

En la figura 1.9 (a) se muestra el diagrama de fases del QCs  $Au_{51}Al_{34}Yb_{15}$ , donde el campo magnético desempeña el papel del parámetro de control, impulsando el sistema hacia afuera del FCQPT (del inglés, *fermion condensation quantum-phase-transition*) para valores de  $H = 0$  y  $T = 0$  sin ninguna modulación ya que el estado crítico del cuasicristal está formado por una densidad singular de estados. Además, a partir de la ecuación  $M_N^* \approx c_0 \frac{1+c_1 T_N^2}{1+c_2 T_N^{5/2}}$  (donde,  $M_N^*$  y  $T_N$  expresan la masa efectiva normalizada y la temperatura normalizada) y a temperaturas fijas, el aumento de  $H$  impulsa el sistema a lo largo de la flecha horizontal desde el estado NFL al LFL. Por lo contrario, para valores de  $H$  fijos y temperaturas crecientes el sistema transita a lo largo de la

<sup>1</sup>La aperiodicidad en los QCs juega un papel transcendental en la formación de las propiedades físicas, ya que la estructura de bandas electrónica gobernada por el teorema de Bloch no puede definirse bien (56).



**Figura 1.9:** (a) Diagrama de fases T-H del  $Au_{51}Al_{34}Yb_{15}$ , donde las flechas verticales y horizontales muestran las transiciones LFL-NFL y NFL-LFL a  $H$  y  $T$  fijos, respectivamente. A  $H = 0$  y  $T = 0$  el sistema está en FCQPT mostrado por círculo sólido. El panel interior presenta la masa efectiva versus temperatura ambas normalizadas, en esa región de transición (área sombreada), la  $M_N^*$  alcanza su valor máximo a  $T/T_{max} = 1$ . Imagen tomada de la referencia (123). (b) Diagrama de contorno de la susceptibilidad uniforme normalizada  $\chi(T, H)/\chi(T, 0) = \chi(T, H)/aT^{-0.51}$  ( $a = 0.081 e.m.u.K^{0.51}mol^{-1}$ ). Los círculos y cuadrados abiertos denotan un campo *crossover*  $H^*$  definido por  $\chi(T, H^*)/\chi(T, 0) = 0.95$  y una temperatura característica  $T^*$ , respectivamente. Las líneas continuas son guías para el ojo y la línea discontinua es una extrapolación a lo largo de una línea de contorno. Imagen tomada de la referencia (33).

flecha vertical desde el estado LFL al estado NFL.

En el panel interior de la figura 1.9 (a) se muestra el comportamiento de la masa efectiva normalizada versus temperatura normalizada ( $M_N^*(T_N)$ ), donde el régimen  $T_N^{-1/2}$  está marcado como NFL ya que, al contrario del caso de LFL (masa efectiva constante), la masa efectiva depende en gran medida de la temperatura. Además, la región de temperatura  $T_N \sim 1$  significa un régimen de transición entre el comportamiento de FLF con una masa efectiva casi constante y el comportamiento de NFL, dado por la dependencia de  $T^{-1/2}$ . Por lo tanto, las temperaturas  $T \simeq T_{max}$ , mostradas por flechas en el panel interior y panel principal, pueden considerarse como el régimen de transición entre los estados LFL y NFL, donde el ancho de las regiones de transición LFL ( $W \propto T$ ) se muestra con flechas de color marrón.

Adicionalmente, en la figura 1.9 (b) se muestra el diagrama de fases T-H del cuasicristal  $Au - Al - Yb$  basado en una gráfica de contorno de la susceptibilidad uniforme normalizada ( $\chi(T, H)/\chi(T, 0)$ ). Vale la pena notar que  $T^*$  (cuadrados abiertos) parece aproximarse a cero ( $T \rightarrow 0$ ). El campo *crossover*  $H^*$  definido por  $\chi(T, H^*)/\chi(T, 0) = 0.95$  (círculo abierto) cae a cero cuando  $T \rightarrow 0$ , lo que significa que  $\chi$  diverge como  $H \rightarrow 0$

a  $T \sim 0$ . Estos resultados indican que el sistema presenta un estado crítico cuántico, con un punto singular en  $H = 0, T = 0$  sin sustitución química ni presurización.

---

# Conceptos sobre las redes de Kondo

---

En el presente capítulo se expone principalmente el modelo del collar de Kondo debido a que es la base conceptual y fenomenológica de un tipo de HF denominado aislador de Kondo, discutido en la última parte del capítulo anterior. En este modelo referencial también se muestra la manera como se introduce la modulación de intercambio aperiódica ( $J$ ), para observar la influencia que genera esta aperiodicidad sobre las propiedades físicas próximos a una transición de fase cuántica magnética.

## 2.1. Efectos de interacción

### 2.1.1. Efecto Kondo

Una gran variedad de aleaciones magnéticas diluidas<sup>1</sup> presentan un fenómeno interesante de dispersión de electrones de conducción en metales debido a las impurezas magnéticas. En estos sistemas se observa un fenómeno importante descrito por un mínimo en la resistividad eléctrica que decrece en función con la temperatura mediante la relación  $\rho(T) \sim \rho_0 + aT^2$ , obteniendo un valor finito muy cerca al cero absoluto<sup>2</sup>. Es notable que este modelo basado en una red de impurezas magnéticas también explique la formación de los HFs y aislantes de Kondo en compuestos intermetálicos, como elementos de tierras raras y actinidos (39). Además, en estas aleaciones que presentan un mínimo en la resistividad,  $\rho$ , la susceptibilidad,  $\chi$ , varía con la temperatura, a diferencia de otros sistemas donde no presentan variación en la susceptibilidad y no se observa el mínimo en la resistividad. Este resultado sugirió que este efecto era a causa directa de la interacción entre el momento localizado y los electrones de conducción.

Es oportuno aclarar que, cuando se menciona a los aisladores de Kondo (también denominados semiconductores de Kondo o semiconductores de HFs) nos referimos a los materiales con electrones fuertemente correlacionados (como el compuesto de  $Ce_3Bi_4Pt_3$  (15, 51)), que dan lugar a una banda muy estrecha, del orden de  $10meV$  a bajas temperaturas con el potencial químico ubicado en la brecha de banda (*bandgap*).

---

<sup>1</sup>Materiales magnéticos como Fe Mn, Ni, y Mn diluidos en metales no magnéticos de Mg, Au, Cu, Al, y Ag.

<sup>2</sup>El efecto fue descrito por primera vez por Jun Kondo en 1964, quien aplicó la teoría de perturbación de tercer orden al problema para dar cuenta de la dispersión de electrones  $s - d$ . El modelo de Kondo predijo que la razón de dispersión de los electrones de conducción en las impurezas magnéticas debería divergir a medida que la temperatura se aproxima a 0 K (65).

## 2. CONCEPTOS SOBRE LAS REDES DE KONDO

---

Mientras que en los HF's el potencial químico se encuentra en la banda de conducción (36, 40). La brecha de banda se abre a bajas temperaturas debido a la hibridación de electrones localizados con electrones de conducción, este efecto de correlación es el efecto Kondo. Como consecuencia, se observa una transición del comportamiento metálico al comportamiento aislante a través de las mediciones de resistividad.

Por otra parte, volviendo al problema denominado efecto Kondo, el Hamiltoniano de interacción  $s - d$  puede ser escrito como:

$$H_{s-d} = -\frac{2J}{N} \sum_q e^{(-qr_i)} \mathbf{s}_i \cdot \mathbf{S}, \quad (2.1)$$

y reemplazando la expresión del producto,  $\mathbf{s} \cdot \mathbf{S} = s_z S_z + \frac{1}{2}(s_+ S_- + s_- S_+)$ , y considerando la notación de la segunda cuantización,  $\frac{1}{2}(a_{k\uparrow}^\dagger a_{k\uparrow} - a_{k\downarrow}^\dagger a_{k\downarrow}) = s_z$ ,  $a_{k\uparrow}^\dagger a_{k\downarrow} = s_+$ , y,  $a_{k\downarrow}^\dagger a_{k\uparrow} = s_-$ , obtenemos la siguiente expresión:

$$H_{s-d} = -\frac{J}{N} \sum_{kk'} \left[ (a_{k'\uparrow}^\dagger a_{k\uparrow} - a_{k'\downarrow}^\dagger a_{k\downarrow}) S_z + a_{k'\uparrow}^\dagger a_{k\downarrow} S_- + a_{k'\downarrow}^\dagger a_{k\uparrow} S_+ \right] \quad (2.2)$$

donde,  $s$  y  $S$  representan los espines de los electrones de conducción y los momentos localizados, respectivamente. El factor de fase de la ecuación (2.1) proviene de la interacción local, donde los electrones de conducción deben de tener una amplitud en la posición de la impureza atómica ( $r_i$ ), y  $J$  es el parámetro de intercambio magnético entre los electrones de conducción y los momentos localizados. Además, el Hamiltoniano de la ecuación (2.2) fue considerado como un potencial de perturbaciones,  $H = H_0 + H_{s-d}$ , asumiendo que  $J$  puede tener valores tanto positivos como negativos, al considerar el término de mezcla covalente (término que resulta de la formación de un pico en la densidad de estados en el nivel de Fermi, denominado pico resonante de Kondo (69)). Posteriormente, se demostró que la contribución a la resistividad a causa de la dispersión de electrones de conducción por la impureza es dada por la siguiente expresión:

$$R = R_B \left[ 1 + 4J\eta(E_F) \ln \frac{k_B T}{D} \right] \quad (2.3)$$

donde,  $\eta(E_F)$ ,  $k_B$ , y  $D$  son la densidad de estados en el nivel de Fermi, la constante de Boltzman y el ancho de banda de conducción, respectivamente. Con la última relación podemos explicar el mínimo de la resistividad en función de la temperatura de los materiales que presentan el efecto Kondo.

Sin embargo, Kondo explicó este aumento logarítmico en la resistividad respecto al descenso de la temperatura de la siguiente manera: **(a)** La resistividad de las aleaciones magnéticas diluidas a bajas temperaturas decrece rápidamente debido a la pérdida por la dispersión de fonones con las impurezas ( $R \propto T^5$ ). **(b)** Para el caso de la interacción

antiferromagnética ( $J < 0$ ), la ecuación (2.3) muestra que la resistividad se incrementa conforme decese la temperatura ( $R \propto -\ln T$ ). Asimismo, en el diagrama de  $T$  versus  $R$  hay una región donde la resistividad es mínima a ciertas temperaturas bajas. Por lo tanto, la interacción antiferromagnética entre los espines de los electrones de conducción y los momentos localizados tendrán un efecto de mucha importancia para explicar el mínimo de la resistencia.

Además, según la ecuación (2.3) se observa una divergencia cuando la temperatura se acerca a cero. Es oportuno notar que términos perturbativos de mayor orden pueden traer importantes contribuciones conforme decese la temperatura. Utilizando el método de la suma infinita de Abrikosov (1, 2, 3), Kondo (66) reportó que la resistividad decrece y se aproxima a cero rápidamente cuando  $T \rightarrow 0$  para  $J > 0$ , pero para el caso opuesto  $J < 0$ , diverge con la temperatura para  $T = T_K$ , donde la expresión para la temperatura de Kondo es:

$$k_B T_K = \text{Dexp} \left( -\frac{1}{2|J|\eta(E_F)} \right), \quad (2.4)$$

Es decir,  $T_K$  es la temperatura de formación del estado espín singlete mediante el acoplamiento antiferromagnético entre los espines de los electrones de conducción y los momentos localizados. Posterior a estos resultados, hubo intentos de resolver el problema de Kondo y en 1975 K. G. Wilson reportó una solución a este problema utilizando la teoría del grupo de renormalización numérica (149), y a partir de este método otras soluciones fueron reportadas.

### 2.1.2. Interacción RKKY

El acoplamiento magnético, entre los momentos localizados en metales, es un mecanismo importante que depende de la capacidad de los electrones de conducción para interactuar magnéticamente con los momentos localizados, y así propagarse entre diferentes sitios magnéticos. La explicación de este mecanismo y de como los electrones pueden polarizarse fue mostrado por Ruderman y Kittel (110). No obstante, la teoría para interacciones del tipo orbital  $s-f$  y del tipo  $s-d$  fue desarrollada paralelamente por Kasuya (62) y Yosida (153). Posteriormente, este mecanismo pasó a llamarse teoría RKKY, donde la polarización de espín decae a razón de  $\frac{1}{r^3}$ , oscilando con un periodo de  $\frac{1}{2k_F}$  (oscilación de Friedel), donde  $r$  y  $k_F$  son la distancia del espín localizado y el número de onda de Fermi, respectivamente. Por lo tanto, la interacción RKKY es una interacción inter-sitio entre los momentos localizados mediada por los electrones de conducción cuya interacción está dada como:

$$H_{RKKY} = -\frac{9\pi(\eta_C J)^2}{8E_F} \sum_{\langle ij \rangle} \frac{\mathbf{S}_i \mathbf{S}_j}{r_{ij}^3} \left[ 2k_F \cos(2k_F r_{ij}) - \frac{\text{sen}(2k_F r_{ij})}{r_{ij}} \right], \quad (2.5)$$

donde,  $\mathbf{S}_{i,j}$ ,  $\eta_C$ ,  $r_{ij}$ , y  $k_F$  son los momentos localizados del  $i$ -ésimo y  $j$ -ésimo sitio, la densidad de los electrones de conducción, la distancia entre los momentos localizados,

## 2. CONCEPTOS SOBRE LAS REDES DE KONDO

---

y el número de onda de Fermi, respectivamente. Además, se puede observar que el  $H_{RKKY}$  es proporcional al producto  $\eta(E_F)J^2$ , de modo que la energía de la interacción RKKY, representada por su temperatura característica, puede ser escrita como:

$$T_{RKKY} \propto J^2\eta(E_F). \quad (2.6)$$

### 2.1.3. Competición entre el efecto Kondo y la interacción RKKY

Ahora, se puede observar que las temperaturas características tanto del efecto Kondo (ecuación (2.4)) como de la interacción RKKY (ecuación (2.6)) pueden ser escritas en función de  $\eta(E_F)|J|$ . En tal sentido, Doniach mostró que esta dependencia lleva a una competición entre estos dos comportamientos, resultando diferentes estados magnéticos dependiendo del valor de  $\eta(E_F)|J|$ , especialmente en sistemas Kondo concentrados, es decir, compuestos intermetálicos de *Ce*, *U*, e *Yb* (35)<sup>1</sup>.

Esta dependencia puede describirse de la siguiente manera: **(a)** Cuando  $\eta(E_F)|J|$  es pequeño, la  $T_{RKKY} > T_K$ , así que la interacción RKKY es la dominante y con ello un estado magnéticamente ordenado es esperado. **(b)** Cuando  $\eta(E_F)|J|$  aumenta, las dos temperaturas aumentan gradualmente, por lo tanto, la  $T_K$  crece más rápido debido a su dependencia exponencial resultando un aumento en el blindaje del momento magnético localizado por los electrones de conducción, además una considerable reducción del momento magnético efectivo. Por otro lado, considerando que la temperatura del orden magnético,  $T_M$ , es proporcional al momento efectivo al cuadrado por la  $T_{RKKY}$  (25, 35), es decir,

$$T_M \approx \mu_{eff}^2 T_{RKKY}. \quad (2.7)$$

La reducción del momento efectivo, provocado por el aumento del efecto Kondo, resulta en una disminución de la temperatura de ordenamiento. Además, usando la aproximación de campo medio y considerando el estado fundamental del sistema con espín efectivo  $S = \frac{1}{2}$ , el momento efectivo típico de sistemas Kondo es expresado como (demostrado por Doniach):

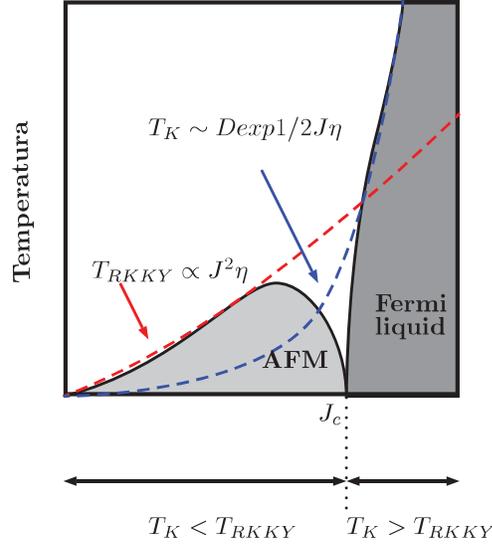
$$\mu_{eff} \approx \sqrt{1 - (J\eta(E_F))^2} \quad (2.8)$$

donde, se observa que para  $|J|\eta(E_F)$  igual o mayor a un valor crítico  $[|J|\eta(E_F)]_c$  hace que la temperatura de orden magnético se anule y se obtiene un estado magnéticamente no ordenado.

Al respecto, Doniach presentó un diagrama de fase donde se observa la dependencia de  $T_K$  y  $T_{RKKY}$  en función del parámetro  $|J|$  (para nuestro caso  $|J|\eta(E_F)$ ). Esta dependencia se puede observar en la figura 2.1, donde al generar cambios en el producto

---

<sup>1</sup>Tomando en cuenta que esta competencia de interacciones (Kondo y RKKY) genera un carácter ambiguo (localizado o itinerante) en los electrones de la capa *f*.



**Figura 2.1:** Diagrama de Doniach mostrando los regímenes antiferromagnético ( $T_K < T_{RKKY}$ ) y líquido de Fermi ( $T_K > T_{RKKY}$ ). Los experimentos mostraron que la transición entre estos dos regímenes es un punto crítico cuántico  $J_c$ . La temperatura de Fermi efectiva del líquido de Fermi (HF) se indica como una línea continua. La evidencia experimental circunstancial sugiere que esta escala cae a cero en el punto crítico cuántico antiferromagnético. Imagen editada de la referencia (21).

$|J|\eta(E_F)$ , se puede modificar el peso de ambas interacciones, de esta manera se cambia el estado fundamental del sistema. Por otro lado, Lavagna y colaboradores reportaron que  $|J|\eta(E_F)$  presenta una fuerte dependencia con el volumen de la celda unitaria (72, 73), de modo que es posible alterar este parámetro aplicando factores externos al sistema como presión o sustitución química. Este modelo de Doniach ha sido empleado para explicar resultados experimentales de varios compuestos intermetálicos de  $Ce$  y  $U$ .

## 2.2. Redes de Kondo

### 2.2.1. Modelo de Anderson

El modelo de Anderson se utiliza para describir impurezas magnéticas tipo- $d$  incrustadas en metales, este modelo también fue introducido para estudiar el problema de Kondo<sup>1</sup>, es decir, el modelo de Anderson es útil para el estudio de sistemas de HF's intermetálicos y aisladores de Kondo (108). Como los aisladores de Kondo son sistemas electrónicos fuertemente correlacionados, los modelos propuestos usan diferentes Hamiltonianos para estos sistemas, una de ellos es el Hamiltoniano del modelo de An-

<sup>1</sup>Vale aclarar, que el problema de Kondo se trata del comportamiento de una impureza magnética acoplada a una banda de electrones de conducción.

## 2. CONCEPTOS SOBRE LAS REDES DE KONDO

---

derson utilizado para orbitales tipo- $f$ <sup>1</sup> (7). En el cual, se describe una colección de estados  $f$ , creados en los sitios de una red cristalina y correlacionados con una banda de conducción. El Hamiltoniano de Anderson está descrito de la siguiente forma:

$$H_A = \sum_{i,j,\sigma} t_{ij}^s c_{j\sigma}^\dagger c_{i\sigma} + E_f \sum_{i,\sigma} f_{j\sigma}^\dagger f_{i\sigma} + \frac{U}{2} \sum_{i,\sigma} n_{i\sigma}^f n_{i-\sigma}^f + V \sum_{i,\sigma} (c_{i\sigma}^\dagger f_{i\sigma} + f_{i\sigma}^\dagger c_{i\sigma}), \quad (2.9)$$

donde,  $t_{ij}^s$  representa la probabilidad de que un electrón de la banda de conducción salte de un sitio  $i$  al sitio  $j$ , los operadores  $c_{j\sigma}^\dagger/c_{i\sigma}$  crean/destruyen electrones en la banda de conducción, y los operadores  $f_{j\sigma}^\dagger/f_{i\sigma}$  crean/destruyen electrones en los niveles  $f$  localizados. Los parámetros  $E_f$ , y  $V$  son la energía de los estados  $f$  y el término de hibridización entre la banda de conducción y el orbital  $f$ .  $n_{i\sigma}^f = f_{i\sigma}^\dagger f_{i\sigma}$  es el operador número de los momentos localizados.  $U$  es la intensidad de las correlaciones Coulombianas entre los electrones  $f$  de espines opuestos en un mismo sitio. Con todos esos términos el  $H_A$  es un problema de muchos cuerpos y para abordar tal problema necesitamos introducir algunas aproximaciones, por ejemplo, la aplicación del método de bosones esclavos (*slave-bosons formalism*) que incorpora correlaciones fuertes a los aisladores Kondo proporcionando buenos resultados (108, 117).

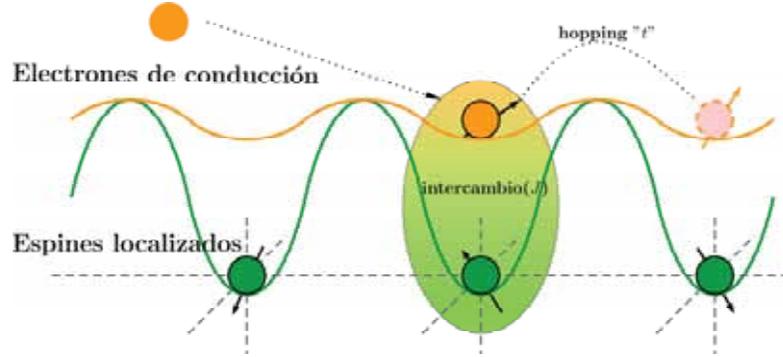
En el caso que se desee estudiar el modelo de impureza de Anderson en una situación más general, se necesita una aproximación distinta. Y para esto, existen varios métodos disponibles en la literatura (48). Entre ellos el método más renombrado es el grupo de renormalización numérica (149), y para el Hamiltoniano de Kondo original y aplicado al modelo de Anderson (68). Otras técnicas desarrollada para este modelo son las transformaciones unitarias continuas para diagonalizar el Hamiltoniano aproximadamente (147). Sin embargo, para el caso del modelo de impurezas de Anderson, una transformación unitaria similar es conocida como transformación de Schrieffer-Wolff (121). Esto ha sido introducido para eliminar la hibridización entre los estados electrónicos en la banda y el orbital de la impureza. Además, esta acción genera una interacción espín-espín entre el electrón de la impureza y los electrones de la banda de conducción, volviendo a mencionar que esta interacción es la responsable para el efecto Kondo (63).

### 2.2.2. Modelo de la red de Kondo

El modelo de red de Kondo (KLM, del inglés *Kondo lattice model*) es un modelo canónico para estudiar la interacción de electrones de conducción (móviles) con centros de dispersión de espín- $\frac{1}{2}$  localizados (innóviles) (35). En la representación más común del modelo hay un espín localizado en cada sitio de la red y la única interacción considerada es un intercambio de Heisenberg entre los electrones de conducción y los espines localizados en cada sitio (véase la figura 2.2).

---

<sup>1</sup>Anderson consideró dos niveles- $d$  degenerados, donde había un término de intercambio entre esos niveles, y el resultado mostró que el término de intercambio favorece la aparición de un momento localizado.



**Figura 2.2:** Diagrama esquemático del KLM, donde los electrones de conducción pueden saltar de un sitio a otro interactuando con los espines localizados via un intercambio de Heisenberg.

Sin embargo, el KLM emerge del modelo periódico de Anderson dado por el Hamiltoniano (2.9), en el límite cuando  $U \rightarrow \infty$  y expandiendo  $V$  hasta el segundo orden mediante la transformación Schrieffer-Wolff (eliminando las fluctuaciones de carga de los espines  $f$ ) (121). Por lo tanto, en el régimen de energías bajas el modelo periódico de Anderson es descrito adecuadamente por el KLM (126), donde se puede expresar como:

$$H_{KLM} = -t \sum_{\langle i,j \rangle} (c_{i,\sigma}^\dagger c_{j,\sigma} + h.c.) + J \sum_i \mathbf{S}_i \cdot c_{i,\sigma}^\dagger \sigma_{\alpha,\beta} c_{i,\beta}. \quad (2.10)$$

Los electrones  $f$  son representados por los espines localizados,  $c_{i,\sigma}^\dagger$  es un operador de creación de un electrón de conducción, y  $t$  es el *hopping* entre los primeros vecinos, es decir, todos estos términos expresan la banda de conducción. La hibridización del modelo de Anderson es sustituida por el segundo término que expresa la interacción entre los electrones de conducción y los espines o momentos localizados a través de la interacción intra-sitio  $J$  ( $\sigma$  son las matrices de Pauli). Incluso este modelo fue usado para estudiar aislantes de Kondo ( $J > 0$ ) (109) y manganitas ( $J < 0$ ) (31).

Vale la pena comentar que el KLM posee dos escalas de energía; la interacción RKKY y el blindaje Kondo. La primera tiende a establecer un estado magnético de largo alcance (donde los espines infinitamente distantes permanecen correlacionados) y la segunda establece un estado líquido de espín sin orden magnético. Se realizaron varios estudios con este modelo mediante cálculos de campo medio, donde las propiedades importantes de la fase paramagnética del KLM son manifestadas en oscilaciones dipolares de sistemas de átomos fríos al desplazarse un potencial de confinamiento (en 1D y 2D) (41). Además, el KLM está estrechamente relacionado con sistemas de estado sólido.

Asimismo, el modelo también fue estudiado en una fase desordenada, tipo líquido

## 2. CONCEPTOS SOBRE LAS REDES DE KONDO

---

de espín<sup>1</sup>, donde para cualquier valor de la razón  $J/t$  produce una brecha de energía finita para las excitaciones de carga y de espín (137). Sin embargo, la peculiaridad en el modelo uni-dimensional es que la brecha de energía es siempre menor que la brecha de carga, lo que sugiere que a energías bajas el KLM es bien descrito por las excitaciones de espín en lugar de la carga. Por otra parte, las aproximaciones del KLM en dos y tres dimensiones (18, 60, 116, 158), muestran que la fase desordenada (líquido de espín) debe cambiar a temperaturas bajas hacia un estado ordenado de largo alcance para valores de  $J/t$  menores que un valor crítico  $(J/t)_c$ .

Es necesario agregar que existen dificultades con el KLM en las cercanías de una inestabilidad magnética para dimensiones  $d \geq 2$  y a temperaturas finitas, pero para determinar todo esto se realizaron diversas aproximaciones y una de esas es el modelo simplificado del KLM, el llamado modelo del collar de Kondo (KNM, del inglés *Kondo necklace model*), de modo que un parámetro de anisotropía tipo Ising es introducido separadamente en el Hamiltoniano.

### 2.2.3. Modelo del collar de Kondo (KNM)

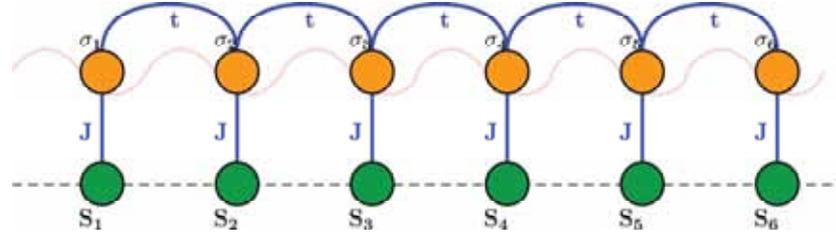
Por lo anteriormente expuesto, se entiende que las propiedades físicas de los fermiones pesados en sistemas sólidos provienen principalmente de la interacción entre el espín (orden magnético) y la carga (distribución espacial). Sin embargo, el modelo simplificado desde el Hamiltoniano del KLM propuesto por Doniach en 1977 fue pensando para estudiar la competición entre el blindaje de Kondo y la interacción RKKY, denominado modelo del collar de Kondo (KNM) (35). En este esquema, la banda de conducción es representada por una cadena de espines acoplados X-Y, es decir, se sustituye el término del *hopping* de los electrones de conducción en el KLM por una interacción X-Y de espines de conducción. El grado de libertad de la carga de los electrones de conducción es despreciado, esto permite que las características fundamentales del sistema se describa solamente con las excitaciones de espín, y el Hamiltoniano se expresa como sigue:

$$H_{KNM} = t \sum_{\langle i,j \rangle} (\sigma_i^X \sigma_j^X + \sigma_i^Y \sigma_j^Y) + J \sum_i S_i \sigma_i, \quad (2.11)$$

donde  $t$  es el *hopping* o acoplamiento entre espines de conducción,  $\langle i, j \rangle$  representa la suma entre los vecinos más próximos,  $S$  y  $\sigma$  son los operadores de espín- $\frac{1}{2}$  actuando en el sitio  $i$ , del momento localizado y electrón de conducción, respectivamente. El primer término del Hamiltoniano de KNM representa a los electrones moviéndose en una red y el segundo expresa la interacción de naturaleza magnética entre el espín del electrón de conducción ( $\sigma_i$ ) y el momento localizado ( $S_i$ ) en el sitio  $i$  de la red, mediante una interacción espín-espín. A continuación en la figura 2.3 se muestra un diagrama esquemático de la cadena collar de Kondo para seis sitios de la red.

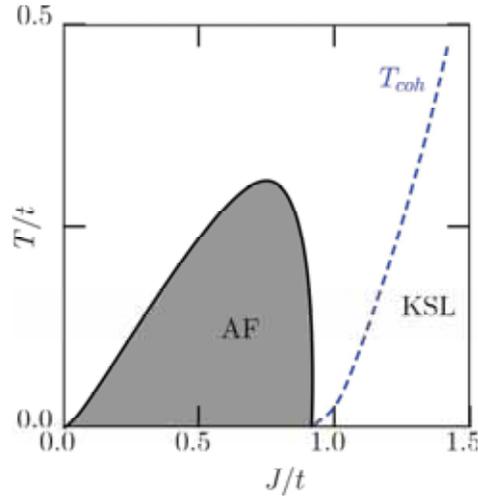
---

<sup>1</sup>Es conveniente precisar que el estado de fase ordenado (AF) desaparece debido a que las fluctuaciones cuánticas aumentan en una dimensión y las correlaciones magnéticas decaen exponencialmente con la distancia entre los espines.



**Figura 2.3:** Diagrama esquemático del KNM con seis sitios en una banda semillena y con un parámetro de intercambio AF ( $J > 0$ ). Además, el KNM se define con dos espines en cada sitio  $i$ , donde la representación menor de la celda del sistema está descrita por cuatro estados (1 singlete y 3 tripletes). Figura editada de la referencia (115).

No obstante, los dos modelos de Kondo (KLM y KNM) se diferencian básicamente en lo siguiente; el KLM sirve para describir sistemas isotrópicos tipo Heisenberg, donde se consideran grados de libertad de espín y de carga de los electrones de conducción. El KNM sirve para describir sistemas tipo X-Y, donde solo se considera términos de espín. La congelación del grado de libertad de carga conduce a la exclusión del comportamiento anómalo de electrones próximos de una inestabilidad magnética (según la física del efecto Kondo). Además las excitaciones electrón-hueco desaparecen cuando se descarta el grado de libertad de carga del electrón de conducción. La justificación válida de este hecho es que a energías bajas el grado de libertad de la carga es irrelevante en la física del efecto Kondo (37, 38).

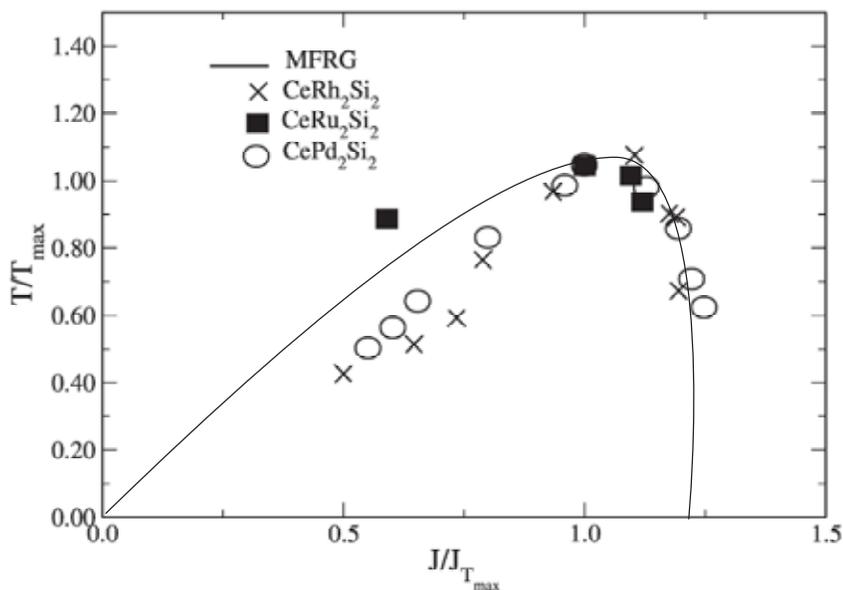


**Figura 2.4:** Diagrama de fase de la temperatura  $T/t$  respecto a la razón  $J/t$  del KNM en 3D. La línea punteada define el *crossover* o la temperatura de coherencia,  $T_{coh}$ , que separa los dos regímenes en la región no magnética, la fase antiferromagnética y el régimen KSL. Imagen editada de la referencia (97).

Sin embargo, el KNM incorpora el aspecto principal de la competencia entre el blindaje de Kondo y la interacción RKKY, que en una banda semillena genera un estado

## 2. CONCEPTOS SOBRE LAS REDES DE KONDO

fundamental aislante. Asimismo, teóricamente este aspecto principal es suficiente en algunos casos donde solo se considera el grado de libertad de espín (74, 133). Por la parte experimental, es evidente que pequeñas presiones manifestadas en los parámetros  $t$  y  $J$ , puedan alterar un estado fundamental magnético (23). Por lo tanto, se espera que las propiedades físicas del KLM en una banda semillena se conserven, de tal manera que el estudio de los sistemas aisladores de Kondo sea apropiado mediante el KNM (43). Además, otros estudios sugieren que los modelos KLM y KNM pertenecen al mismo tipo de universalidad en una dimensión (119), también es conveniente mencionar que la universalidad de las transiciones cuánticas de los HF's no es única y que aún no ha sido determinada en su totalidad (75).



**Figura 2.5:** Diagrama de fase del KNM en 3D comparada con datos experimentales provenientes de la referencia (27). Imagen editada de la referencia (97).

En esa línea de investigación, se reportó el diagrama de fase ( $T/t$ ) en función de ( $J/t$ ) del KNM en tres dimensiones a través del método de renormalización de campo medio (97). En la figura 2.4 se muestra este diagrama de fase, que está en excelente concordancia con los resultados experimentales de A. L. Cornelius y J. S. Schilling en compuestos de *Ce* (véase la figura 2.5). Sin embargo, este modelo fue estudiado ampliamente en 1D empleando diversos métodos como campo medio variacional (35), campo medio con operadores de enlace (71, 157), diagonalización exacta (151, 152), expansiones en series (67, 79), grupo de renormalización (84, 90), bosonización (64, 133), entre otros.

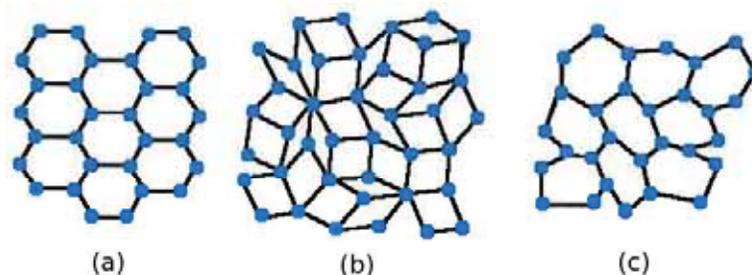
No obstante en dimensiones mayores a 1D, la termodinámica y el comportamiento crítico de las propiedades físicas, como el calor específico, a temperatura finita del KNM próximo de una inestabilidad magnética están siendo abordados con estudios recientes.

Por lo tanto, este aspecto viene a ser el motivo del presente trabajo de tesis donde la aperiodicidad química, en el acoplamiento magnético de Kondo, es investigada.



# Hamiltoniano efectivo aperiódico del KNM

En la formación de materiales, la acción básica que utiliza la naturaleza consiste en combinar átomos para formar moléculas que posteriormente forman el sólido, donde la unión o enlace entre ellos es un efecto de la interferencia cuántica de las funciones de onda de los electrones de conducción. Sin embargo, se puede tener sistemas cristalinos, aperiódicos y amorfos, de los cuales algunos presentan ciertas simetrías. Así, los cristales periódicos poseen simetría traslacional y rotacional; los cristales aperiódicos (o cuasicristales) poseen simetría rotacional mas no traslacional, pero si orden o correlación a largo alcance. Por último las estructuras amorfas solo poseen orden a corto alcance (véase la figura 3.1).



**Figura 3.1:** Ilustración del teselado del espacio 2D mediante distintas estructuras como; (a) ordenada y periódica con celda hexagonal, (b) aperiódica con dos celdas poligonales regulares (teselado de Penrose) y (c) desordenada sin celda definida.

Por otra parte, en 1984 existía una controversia en la cristalografía donde solo podían ser construidos cristales a través de celdas unitarias, los cuales podían ser repetidas periódicamente para generar el cristal. Estos sistemas poseen un número limitado de simetrías rotacionales (como ejes de rotación 2-,3-,4- y 6-*fold*), mientras que las simetrías 5 y 10 no eran permitidas, ese mismo año D. Shechtman, Blech, Gratias y Cahn (124) reportaron que el compuesto  $AlMn$  mostraba una simetría prohibida (10-*fold*), en el cual el sistema presentaba orden pero de forma aperiódica distinta a los cristales ordinarios en aquella ocasión.

**Tabla 3.1:** La cadena de Fibonacci.

Número de Fibonacci	Secuencia de Fibonacci	#L	#S
$F_0=1$	S	0	1
$F_1=1$	L	1	0
$F_2=2$	LS	1	1
$F_3=3$	LSL	2	1
$F_4=5$	LSLLS	3	2
$F_5=8$	LSLLSLSL	5	3
$F_6=13$	LSLLSLSLLSLLS	8	5
$F_7=21$	LSLLSLSLLSLLSLSLLSLSL	13	8
...	...	...	...

Posteriormente reportaron un gran número de cuasicristales, especialmente en aleaciones ternarias basadas en  $Al$  ( $Al-Li-Cu$ ,  $Al-Mn-Si$ ,  $Al-Ni-Co$ ,  $Al-Pd-Mn$ ,  $Al-Cu-Fe$ ,  $Al-Cu-V$ , entre otros) (56, 57). Por lo cual, se puede clasificar dos tipos de QCs; **(a)** QCs poligonales (diédricos), estos sistemas tienen un eje de simetría local 8-, 10- o 12-*fold*, es decir, QCs octagonales, decagonales o dodecagonales, respectivamente. Estos sistemas son periódicos a lo largo de este eje y cuasiperiódicos en planos normales a él. **(b)** Por el contrario, los QCs icosaédricos son aperiódicos en todas las direcciones. Y un ejemplo sencillo en una dirección de estos sistemas aperiódicos son las cadenas de Fibonacci, la cual se expone a continuación para luego introducir en el Hamiltoniano del KNM.

### 3.1. Secuencia de Fibonacci

La cadena de Fibonacci es un ejemplo de una secuencia cuasiperiódica en una dimensión y puede ser construido por dos segmentos de corta,  $S$ , y larga longitud,  $L$ , ( $S$  y  $L$ , del inglés *short* y *large*). Para generar una estructura aperiódica basada en estos dos segmentos se aplica la regla de sustitución de forma repetitiva de la siguiente manera:

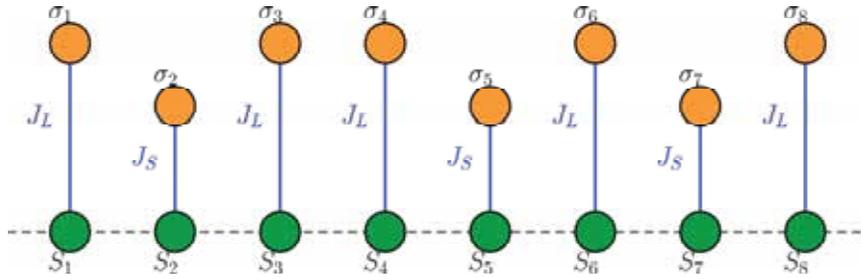
$$Regla : \begin{cases} S \rightarrow L \\ L \rightarrow LS \end{cases} \quad (3.1)$$

Para generar la secuencia cuasiperiódica con una longitud mayor se tiene que:  $L \rightarrow LS \rightarrow LSL \rightarrow LSLLS \rightarrow \dots$ . Por consiguiente, mediante esta regla de sustitución se puede tener una secuencia de Fibonacci de diferente longitud como se muestra en la tabla 3.1:

Por lo tanto, en el presente trabajo se considera una aperiodicidad química que está inmersa en el parámetro de modulación del acoplamiento de intercambio magnético

( $J_i$ ). Por tal motivo, es oportuno emplear secuencias de Fibonacci que ayudan a estudiar el efecto de la aperiodicidad sobre las propiedades físicas (como el calor específico) dentro del KNM, siguiendo esta secuencia cuasiperiódica y por regla de sustitución se puede representar dos valores diferentes del acoplamiento como  $J_S$  o  $J_L$ , que se muestra en la figura 3.2.

Vale la pena mencionar que los QCs (al ser estructuras aperiódicas con orden de largo alcance no presentan simetría de traslación) poseen contrapartes o fases cristalinas denominadas **aproximantes** que si poseen simetría de translación pero con un orden interno similar al de los QCs. En general, estos aproximantes están formados por celdas fundamentales gigantes que contienen decenas e incluso centenas de átomos. Por ende, este aspecto de los aproximantes también es importante investigar para determinar su influencia del orden aperiódico sobre la brecha de espín y el calor específico.



**Figura 3.2:** Diagrama esquemático del KNM para ocho sitios con aperiodicidad química sumergido en el acoplamiento de intercambio magnético según la secuencia de Fibonacci.

### 3.2. Aproximación de campo medio en operadores de enlace

En esta subsección se emplea la representación de espines en operadores de enlace para determinar el Hamiltoniano efectivo aperiódico, esta aproximación fue empleada con mucho éxito en trabajos previos para los modelos de KLM (60) y KNM (157). Ahora se considera de nuevo el siguiente Hamiltoniano:

$$H_{KNM} = t \sum_{\langle i,j \rangle} (\sigma_i^X \sigma_j^X + \sigma_i^Y \sigma_j^Y) + \sum_i J_i S_i \cdot \sigma_i, \quad (3.2)$$

siendo  $\sigma_i$  y  $S_i$  conjuntos independientes de operadores de Pauli, donde el primer término expresa la propagación de electrones y el segundo término representa la interacción magnética entre los electrones de conducción y localizados mediante el acoplamiento de intercambio  $J_i$ , esta última con una secuencia establecida en el diagrama de la figura 3.2. Sin embargo, la modulación aperiódica expresada en los acoplamientos  $J_L$  y  $J_S$  está relacionada con los números de Fibonacci  $F_i$ , que siguen la siguiente relación;  $F_{n+1} = F_n + F_{n-1}$ , cuyos valores se muestran en la tabla anterior 3.1. Por consiguiente, en base a esto se puede construir una red estructuralmente periódica de  $N$  espines

### 3. HAMILTONIANO EFECTIVO APERIÓDICO DEL KNM

---

localizados pero con una aperiodicidad química, es decir, dentro de la supercelda se tiene  $F_n$  ( $F_{n-1}$ ) momentos localizados con un acoplamiento  $J_L$  ( $J_S$ ) de tal modo que;  $N = m(F_n + F_{n-1})$  ( $m$  es el número de superceldas). Por ejemplo, según el diagrama de la figura 3.2 se tiene que  $N = 8$  y  $F_n = 5$  ( $F_{n-1} = 3$ ) momentos localizados en una supercelda ( $m = 1$ ).

Por otro lado, las representaciones para operadores de enlace de dos electrones de espín- $\frac{1}{2}$  están definidas en el espacio de Hilbert que contienen cuatro estados; uno singlete  $|s\rangle$  y tres tripletes  $|t_\alpha\rangle$  ( $\alpha = x, y, z$ ), donde el estado fundamental del par ( $\sigma, S$ ) es el singlete en el límite de acoplamiento fuerte ( $J/t \rightarrow \infty$ ). Los cuatro estados son creados desde el vacío mediante los operadores;  $s^\dagger|0\rangle = |s\rangle$  y  $t_\alpha^\dagger|0\rangle = |t_\alpha\rangle$ , que están definidos como (véanse las ecuaciones (A.11)):

$$\sigma_{i,\alpha}(S_{i,\alpha}) = \mp \frac{1}{2}(s_i^\dagger t_{i,\alpha} + t_{i,\alpha}^\dagger s_i \pm i\epsilon_{\alpha\beta\gamma} t_{i,\beta}^\dagger t_{i,\gamma}), \quad (3.3)$$

donde  $\epsilon_{\alpha\beta\gamma}$  es el tensor antisimétrico de Levi-Civita, y  $\alpha, \beta, \gamma$  representan los componentes en los ejes  $x, y, z$ , respectivamente. Por lo tanto, empleando esta representación para los electrones de conducción y espines localizados en el Hamiltoniano (3.2) y considerando una banda semillena (un electrón de conducción por sitio) se tiene que:

$$H = H_0 + H_1 + H_2, \quad (3.4)$$

donde los Hamiltonianos parciales son:

$$\begin{aligned} H_0 &= \frac{1}{4} \sum_i^{mF_n} (-3s_i^\dagger s_i + \sum_\alpha t_{i,\alpha}^\dagger t_{i,\alpha}) \\ &\quad + \frac{\xi}{4} \sum_i^{mF_{n-1}} (-3s_i^\dagger s_i + \sum_\alpha t_{i,\alpha}^\dagger t_{i,\alpha}) \\ &\quad + \sum_i \frac{\mu_i}{J_L} (s_i^\dagger s_i + \sum_\alpha t_{i,\alpha}^\dagger t_{i,\alpha} - 1), \\ H_1 &= \frac{t}{4J_L} \sum_{\langle ij \rangle, \alpha} (s_i^\dagger s_j^\dagger t_{i,\alpha} t_{j,\alpha} + s_i^\dagger s_j t_{i,\alpha} t_{j,\alpha}^\dagger + h.c.), \\ H_2 &= -\frac{t}{4J_L} \sum_{\langle ij \rangle, \alpha} (t_{i,z}^\dagger t_{j,z}^\dagger t_{i,\alpha} t_{j,\alpha} - t_{i,z}^\dagger t_{j,z} t_{i,\alpha} t_{j,\alpha}^\dagger + h.c.), \end{aligned}$$

$\xi = \frac{J_S}{J_L}$  representa la razón entre los acoplamientos que establecen una energía de referencia (al fijar  $J_L$  en  $H$ ), y  $\mu_i$  es el potencial químico de cada sitio y que es introducido para condicionar un estado físico único<sup>1</sup>. Además, el término  $H_0$  representa la

---

<sup>1</sup>La condición,  $s_i^\dagger s_i + \sum_\alpha t_{i,\alpha}^\dagger t_{i,\alpha} = 1$ , establece el número de ocupación de una cuasipartícula en cada sitio.

interacción entre los espines  $S$  y  $\sigma$  en el sitio  $i$ , y los términos  $H_1$  y  $H_2$  están asociados con el *hopping* de los electrones de conducción. También, es preciso mencionar que debido a la simetría de traslación del sistema se puede considerar el valor medio del operador singlete ( $\langle s_i^\dagger \rangle = \langle s_i \rangle = \bar{s}$ ) implicando que  $\mu_i = \mu$ , donde esta consideración corresponde a una condensación tipo Bose-Einstein del estado singlete local Kondo en cada sitio en el límite de acoplamiento fuerte.

Es decir cuando  $J/t \rightarrow \infty$  el espín localizado  $S$  captura un espín de la banda de conducción  $\sigma$  formando un estado singlete, de modo que los estados tripletes presentan una densidad baja lo cual permite despreciar las interacciones triplete-triplete del término  $H_2$ <sup>1</sup>. Por lo tanto, considerando solo  $H_0 + H_1$  el sistema forma un estado fundamental correspondiente al producto de singletes, además, con todo lo asumido líneas arriba se puede simplificar el Hamiltoniano principal en un Hamiltoniano efectivo de campo medio,  $H_{mf}$ , expresandolo solo con operadores cuadráticos para describir la transición de fase cuántica desde la fase desordenada (líquido de espín) a la fase ordenada AF. Además, después de realizar transformaciones de Fourier a los operadores bosonicos ( $t_{i,\alpha} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} t_{\mathbf{k},\alpha} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_i}$ ,  $t_{i,\alpha}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} t_{\mathbf{k},\alpha}^\dagger e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_i}$ ) se obtiene el  $H_{mf}$  en el espacio de momentos,

$$H_{mf} = N \left( -\frac{3}{4} \bar{s}^2 G_n(\xi) + \frac{\mu}{J_L} \bar{s}^2 - \frac{\mu}{J_L} \right) + \left( \frac{G_n(\xi)}{4} + \frac{\mu}{J_L} \right) \sum_{\mathbf{k}} t_{\mathbf{k},z}^\dagger t_{\mathbf{k},z} + \sum_{\mathbf{k}} \left[ \Lambda_{\mathbf{k}} t_{\mathbf{k},\gamma}^\dagger t_{\mathbf{k},\gamma} + \Delta_{\mathbf{k}} (t_{\mathbf{k},\gamma}^\dagger t_{-\mathbf{k},\gamma}^\dagger + t_{\mathbf{k},\gamma} t_{-\mathbf{k},\gamma}) \right], \quad (3.5)$$

donde  $\Lambda_{\mathbf{k}} = \omega_0 + 2\Delta_{\mathbf{k}}$ ,  $\Delta_{\mathbf{k}} = t\bar{s}^2 \lambda(\mathbf{k})/4J_L$ ,  $\lambda(\mathbf{k}) = \sum_{d=1}^D \cos(k_d)$  y  $\omega_0 = (\frac{G_n(\xi)}{4} + \frac{\mu}{J_L})$ , con el siguiente índice;  $\gamma = x, y$ . Además,  $N$  es el número de sitios de la red,  $D$  es la dimensión Euclideana del sistema y  $\bar{s}$  es el parámetro de orden singlete. Vale la pena comentar que los vectores de onda  $\mathbf{k}$  se consideran en la primera zona de Brillouin y el parámetro de una red hipercúbica  $a = 1$ , también se ha considerado que:

$$G_n(\xi) = \frac{F_n + \xi F_{n-1}}{F_n + F_{n-1}} = \frac{\tau_n + \xi}{\tau_n + 1} \quad (3.6)$$

donde  $n$  es el número de términos en la secuencia de Fibonacci y  $\tau_n = F_n/F_{n-1}$ . En el límite  $\tau_{n \rightarrow \infty} \rightarrow \tau^* = (\sqrt{5} + 1)/2$  (regla de oro) y con esto  $G_{n \rightarrow \infty}(\xi) = G^*(\xi) = (\tau^* + \xi)/(\tau^* + 1)$ . Por otra parte, el Hamiltoniano de la ecuación (3.5) puede ser diagonalizado usando la técnica de las funciones de Green (102, 103)<sup>2</sup>, para obtener los promedios térmicos de las funciones de correlación del estado singlete y triplete y el

<sup>1</sup>La interacción de tripletes posee efectos despreciables en el Hamiltoniano efectivo con términos cuadráticos, y la interacción entre tres tripletes y un singlete también se desprecia por no tener contribuciones en la energía del estado fundamental (44, 71, 88).

<sup>2</sup>Las ecuaciones de movimiento de las funciones de Green para la diagonalización están expuestas en una sección del apéndice A.

espectro de las excitaciones en la fase paramagnética (104). Sin embargo, con los polos de los propagadores obtenidos desde las ecuaciones (A.24) y (A.21) se determina las energías de estos polos que son dados por  $\omega_0 = (\frac{G_n(\xi)}{4} + \frac{\mu}{J_L})$ , el cual es el espectro sin dispersión de la rama- $z$  del estado triplete longitudinal. Y también dado por  $\omega_{\mathbf{k}} = \pm \sqrt{\Lambda_{\mathbf{k}}^2 - (2\Delta_{\mathbf{k}})^2} = \omega_0 \sqrt{1 + t\bar{s}^2 \lambda(k)/(J_L \omega_0)}$ , el cual corresponde al estado triplete transversal para las ramas  $\omega_x = \omega_y$ . En particular, para retornar al caso periódico solo se aproxima  $J_S = J_L = J$ , y  $\xi \rightarrow 1$ , entonces  $G_n = 1$  y ambos espectros  $\omega_0$  y  $\omega_k$  representan las excitaciones del KNM periódico presentadas en trabajos previos (102).

### 3.3. Energía libre de la fase paramagnética

Una expresión para la energía promedio a temperatura finita puede ser obtenida a partir de los espectros de excitación y sus características bosónicas de los mismos. Para esto, se necesita obtener el valor medio del Hamiltoniano efectivo para adquirir la energía interna,  $U = \langle H_{mf} \rangle^1$ , de la siguiente manera (102, 106):

$$\langle H_{mf} \rangle = \varepsilon_0 + \sum_{\mathbf{k}} [\omega_0 \eta(\omega_0) + \omega_{\mathbf{k}} \eta(\omega_{\mathbf{k}})], \quad (3.7)$$

donde la energía del estado fundamental en la fase paramagnética tipo líquido de espín está dado por:

$$\varepsilon_0 = N \left( -\frac{3}{4} \bar{s}^2 G_n(\xi) + \frac{\mu}{J_L} \bar{s}^2 - \frac{\mu}{J_L} \right) + \sum_{\mathbf{k}} (\omega_{\mathbf{k}} - \omega_0). \quad (3.8)$$

Además,  $\eta(\omega) = \frac{1}{2} [\coth(\beta\omega/2) - 1]$  es el factor de Bose,  $\beta = 1/k_B T$ ,  $k_B$  es la constante de Boltzman y  $T$  la temperatura absoluta. Sin embargo, para construir la energía libre  $F$  mediante el uso de relaciones termodinámicas usuales es necesario asumir que las excitaciones del sistema son cuasipartículas. Para determinar  $F$ , se usa la expresión del potencial termodinámico de un gas de estas cuasipartículas que obedecen la estadística de Bose-Einstein (bosones libres), donde la entropía se expresa como (96):

$$S = k_B \sum_{\mathbf{k}} ([\eta(\omega_{\mathbf{k}}) + 1] \ln[\eta(\omega_{\mathbf{k}}) + 1] - \eta(\omega_{\mathbf{k}}) \ln[\eta(\omega_{\mathbf{k}})]). \quad (3.9)$$

Por lo tanto, empleando las ecuaciones (3.7), (3.9), y mediante la expresión termodinámica  $F = U - TS$ , se obtiene la energía libre de la fase paramagnética tipo líquido de espín.

$$F = \varepsilon_0 - \frac{2}{\beta} \sum_{\mathbf{k}} \ln[\eta(\omega_{\mathbf{k}}) + 1] - \frac{N}{\beta} \ln[\eta(\omega_0) + 1]. \quad (3.10)$$

---

<sup>1</sup>Esto se realiza mediante la expresión fundamental de Zubarev (teorema del salto), que relaciona el promedio térmico con las funciones de Green (159).

### 3.4. Ecuaciones auto-consistentes del modelo del collar de Kondo

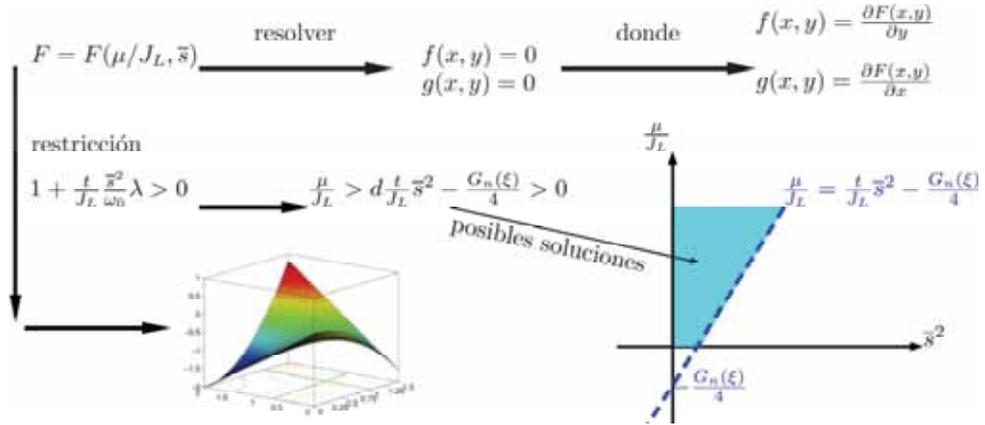
A partir de la energía libre  $F$  se puede obtener el comportamiento termodinámico en la proximidad del QCP o de la inestabilidad magnética, desplazándose desde una fase desordenada paramagnética. Por otra parte, en el KNM las excitaciones son magnones triplemente degenerados (*triplons*) con una brecha de espín (*spin-gap*) que se desvanece al acercarse al QCP, como se mostrará en la parte de resultados en dos y tres dimensiones.

Sin embargo, siguiendo la aproximación del campo medio, los parámetros introducidos pueden obtenerse minimizando la energía media paramagnética del KNM dada por la ecuación (3.7), derivando las siguientes ecuaciones de los puntos de inflexión<sup>1</sup>,  $(\partial F/\partial\mu, \partial F/\partial\bar{S}) = (0, 0)$ .

$$2 \left( \frac{3}{4} G_n(\xi) - \frac{\mu}{J_L} \right) = \frac{t}{N J_L} \sum_{\mathbf{k}} \frac{\omega_0}{\omega_{\mathbf{k}}} \lambda(\mathbf{k}) \coth \frac{\beta \omega_{\mathbf{k}}}{2},$$

$$2 - \bar{S}^2 = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \frac{\Lambda_{\mathbf{k}}}{\omega_{\mathbf{k}}} \coth \frac{\beta \omega_{\mathbf{k}}}{2} + \eta(\omega_0). \quad (3.11)$$

Establecidas estas ecuaciones auto-consistentes, se puede verificar que para  $T = 0$ ,  $J_S = J_L$ , y  $G_n(\xi) = 1$  las ecuaciones anteriores (3.11) son equivalentes a las encontradas para el estado fundamental de líquido de espín Kondo (*Kondo spin liquid state*) (156).



**Figura 3.3:** Esquema del procedimiento de solución de las ecuaciones no lineales empleando el método de Broyden.

<sup>1</sup>También conocidos como *saddle-point equations*.

### 3.5. Soluciones empleando el método de Broyden

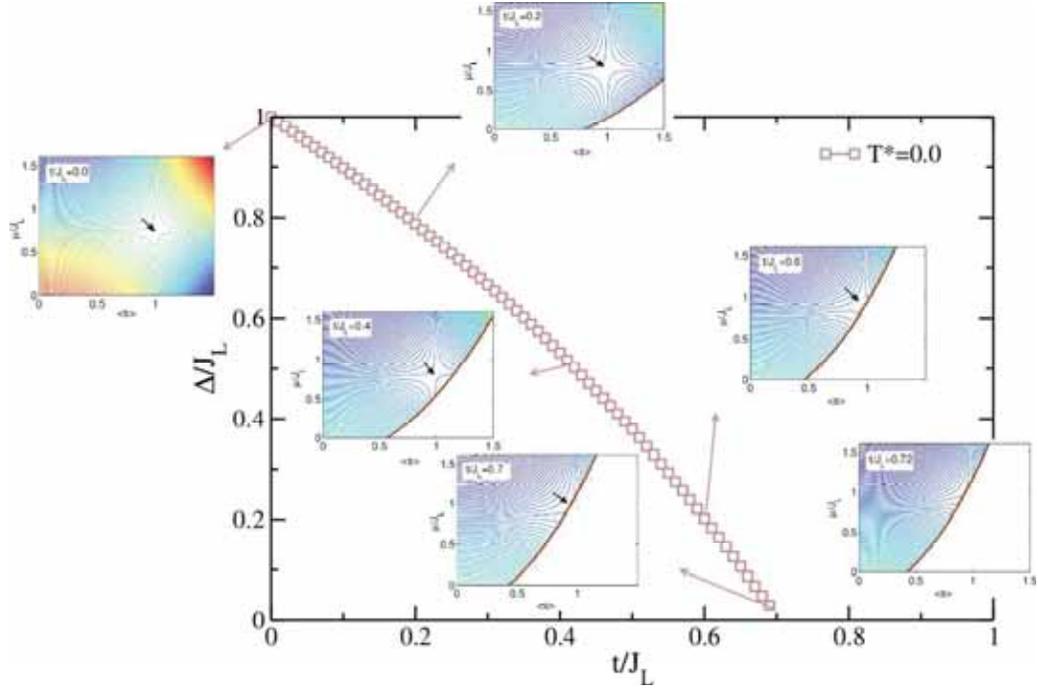
Ahora se emplea uno de los métodos para resolver un sistema de ecuaciones no lineales (16, 95), para ello se considera la energía libre de la fase paramagnética (ecuación (3.10)), que es una función no lineal de dos variables como  $F = F(\mu/J_L, \bar{s}) = F(x, y)$ . A continuación se desarrolla el procedimiento del método de Broyden en dos dimensiones (véase el esquema 3.3):

1. Se fijan los valores iniciales como soluciones de las ecuaciones auto-consistentes:  
 $r_0 = (x_0, y_0) \Rightarrow ((\mu/J_L)_0, \bar{s}_0)$
2. Se calcula la matriz Jacobiana,  $\mathcal{J}(r_0) = \mathcal{J}((\mu/J_L)_0, \bar{s}_0) = \mathcal{J}_0$ .  
 Luego se determina la primera aproximación usando el método de Newton:  
 $r_1 = r_0 - \mathcal{J}_0^{-1} \times G(r_0)$   
 donde  $G = (f, g)$ ,  $f = \frac{\partial F(x,y)}{\partial y}$ , y  $g = \frac{\partial F(x,y)}{\partial x}$
3. Con el paso anterior se calcula  $r_i$  y  $G(r_i)$ , luego se evalúa la siguiente condición:  
 $|G(r_i) - G(r_{i-1})| < \epsilon$ .
4. Ahora se calcula el Jacobiano aproximado mediante:  
 $\mathcal{J}_i = \mathcal{J}_{i-1} + \frac{1}{u^T u} (v - \mathcal{J}_{i-1} u) u^T$   
 donde  $u = r_i - r_{i-1}$  y  $v = G(r_i) - G(r_{i-1})$
5. Luego se calcula la diferencia entre las posibles soluciones,  $r_i$  y  $r_{i-1}$ :  
 $\Delta r = -\mathcal{J}_i^{-1} G(r_i)$
6. Finalmente se calcula la solución  $r_i = r_{i-1} + \Delta r$  y luego se retorna al paso 3.

Posteriormente, se ha implementado el método de Broyden, considerando el procedimiento anterior, para obtener las soluciones de una cantidad física como la brecha de espín de Kondo (*Kondo spin-gap*) que está definida como:

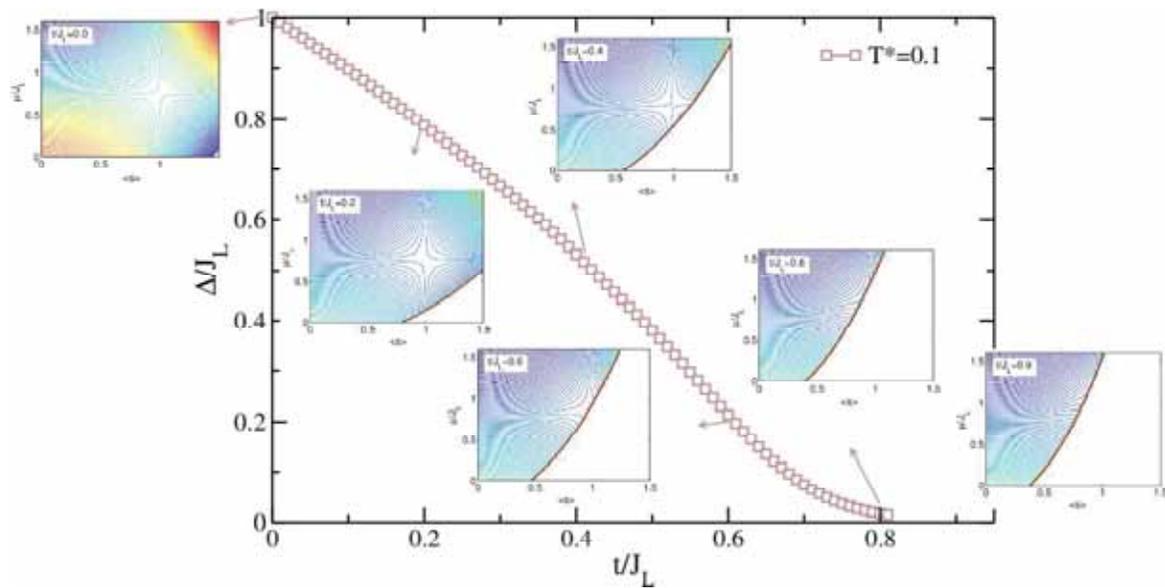
$$\Delta/J_L = \omega_0 \sqrt{1 - D \left( \frac{t}{J_L} \right) \frac{\bar{S}^2}{\omega_0}} \quad (3.12)$$

donde,  $\omega_0 = \left( \frac{G_n(\xi)}{4} + \frac{\mu}{J_L} \right)$  y representa el espectro sin dispersión de la rama-z del estado triplete longitudinal. Todas las soluciones obtenidas en estos dos últimos párrafos fueron para un sistema en dos dimensiones ( $D = 2$ ). Por ejemplo, en la figura 3.4 se observa los puntos de inflexión (soluciones válidas) para los factores de acople  $t/J_L = 0.0, 0.2, 0.4, 0.6$ , y  $0.7$  (próximo al QCP en 2D) a temperatura nula ( $T^* = k_B T/J_L = 0.0$ ) y para el caso periódico ( $\xi = 1.0$ ). Sin embargo, para valores mayores  $t/J_L > 0.7$  (como 0.72) no se observa ningún punto de inflexión o solución válida. Es decir, que conforme se acerca al QCP los puntos de inflexión desaparecen, esta característica es observada también en otros trabajos (102, 104, 156).



**Figura 3.4:** Solución de la brecha de espín en 2D empleando el método de Broyden a temperatura nula. Los paneles interiores muestran los puntos de inflexión para diferentes factores de acoplamiento  $t/J_L$ .

Por otra parte, cuando se considera temperatura finita ( $T^* = k_B T/J_L = 0.1$ ) para el caso periódico ( $\xi = 1.0$ ) también se obtiene soluciones válidas para la brecha de espín ( $\Delta/J_L$ ), donde se observa que el QCP se desplaza de 0.7 a 0.8 asintóticamente (véase la figura 3.5), además, los puntos de inflexión van desapareciendo para valores mayores  $t/J_L > 0.8$  (como 0.9). Estos resultados confirman que es posible explorar las soluciones de las propiedades físicas, tanto para la brecha de espín de Kondo como para el calor específico, cerca de la QPT a medida que  $T^* \rightarrow 0$ .



**Figura 3.5:** Solución de la brecha de espín en 2D empleando el método de Broyden a temperatura finita. Los paneles interiores muestran los puntos de inflexión para diferentes factores de acoplamiento  $t/J_L$ .

**Parte III**

**Resultados y discusión**



# Efectos de la modulación de intercambio aperiódico del KNM

---

Los cálculos numéricos de las propiedades físicas, como la brecha de espín (*spin-gap*) y el calor específico, se realizaron mediante el método de Broyden para obtener las soluciones numéricas de las ecuaciones auto-consistentes a temperatura finita (3.11) en dos y tres dimensiones (2D y 3D). En el presente capítulo se discute el efecto de la modulación de intercambio aperiódico (denominada también aperiodicidad química) sobre la excitación de la brecha de espín Kondo y sobre el calor específico ( $\Delta$  y  $C$ ), además de la dependencia con la temperatura.

La información de la aperiodicidad en los cálculos fueron introducidos considerando, por un lado, diversos aproximantes arbitrarios  $F_n/F_{n-1}$  y por otro lado, variando la relación de acoplamiento de Kondo  $\xi = J_S/J_L$ . Además, estos resultados obtenidos fueron corroborados con relaciones analíticas encontradas en modelos de alta dimensionalidad (102). Vale la pena señalar que  $F_n$  sigue la secuencia de Fibonacci (por ejemplo: 1, 1, 2, 3, 3, 5, 8, ... y así sucesivamente). Sin embargo, si se considera  $\xi = 1.0$  el valor es equivalente al modelo del collar de Kondo original con un término de acoplamiento  $J_S = J_L = J$  en la ecuación (2.11).

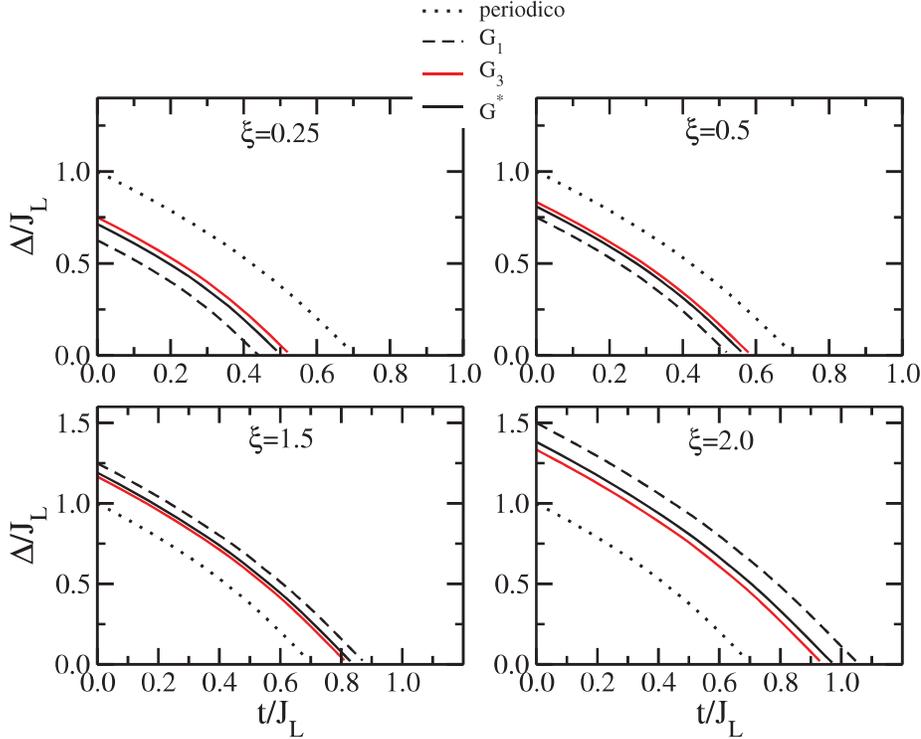
Además, los resultados presentados en esta tesis son para valores de temperatura muy bajos, de tal manera que se cumpla  $k_B T < J_L, J_S, t$ . Asimismo, la aproximación de campo medio empleada se basa en un fuerte límite de acoplamiento, del mismo modo, se limita nuestro estudio a la fase paramagnética del KNM. Es decir, para  $g = (t/J_L)_c - t/J_L \geq 0$ , donde  $g$  es el distancia al QCP ( $t/J_L = (t/J_L)_c, T = 0$ ). Finalmente, todas las figuras presentadas en este trabajo de tesis están bosquejadas y editadas considerando la temperatura reducida  $T^* = k_B T/J_L$ , proveniente de las ecuaciones auto-consistentes del KNM y que en adelante se denominará solo temperatura.

## 4.1. Influencia de la aperiodicidad química sobre la brecha de espín

Antes de discutir nuestros resultados sobre la brecha de espín, primero se hizo una comparación del método de Broyden con otra implementación de un trabajo ya repor-

#### 4. EFECTOS DE LA MODULACIÓN DE INTERCAMBIO APERIÓDICO DEL KNM

tado (ecuaciones (12) y (13) de la referencia (104)) para la modulación aperiódica en el KNM, obteniendo las soluciones que garantizan resultados fiables y válidos a temperatura nula. A continuación se presentan los datos obtenidos con el método de Broyden, los cuales reproducen los resultados de la referencia (104).



**Figura 4.1:** Reproducción de resultados para 2D de la referencia (104) mediante el método de Broyden para los casos  $\xi = 0.25, 0.5, 1.5$  y  $2.0$ , donde  $G_1$ ,  $G_3$ , y  $G^*$  representan el par  $F_1/F_0$ ,  $F_3/F_2$ , y  $\tau^*$  respectivamente. Además el caso periódico corresponde a  $\xi = 1.0$  ( $J_S = J_L$ ).

Por ejemplo, en la figura 4.1 se muestran resultados de la brecha de espín ( $\Delta/J_L$ ) de la ecuación (3.12) para un sistema de dos dimensiones. El análisis de  $\Delta/J_L$  es importante porque define la transición de fase desorden a orden magnético (líquido de espín de Kondo a AF) en el QCP ( $J_L/t = (J_L/t)_c$ ,  $T = 0$ ). A partir de esa misma ecuación (3.12) se puede ver que la influencia de la modulación aperiódica de los acoplamientos de intercambio está controlada por  $G_n(\xi)$ . Además se evidencia la dependencia de  $\Delta/J_L$  con  $\xi$  y  $n$  (es decir, los pares  $[F_n, F_{n-1}]$  son valores de entrada para  $\tau_n$ ), los cuales muestran solo cambios cuantitativos en el comportamiento de  $\Delta/J_L$  para todos los casos de 2D.

#### 4.1.1. Influencia a temperatura nula

En esta parte se discute el efecto de la aperiodicidad química en la brecha de espín de Kondo ( $\Delta/J_L$ ) a temperatura nula ( $T^* = 0.0$ ) en 2D y 3D de modo similar a un trabajo ya reportado por D. Reyes y colaboradores (104). El análisis de  $\Delta/J_L$  es importante debido a la desaparición de la propia brecha y la aparición de modos suaves que definen la transición desde el líquido de espín de kondo desordenado hasta la fase AF en el QCP. Sin embargo, a temperatura nula y cerca del QCP, existen fluctuaciones cuánticas en todas las escalas de longitud que definen un comportamiento de escalamiento (*scaling behavior*) para las cantidades físicas.

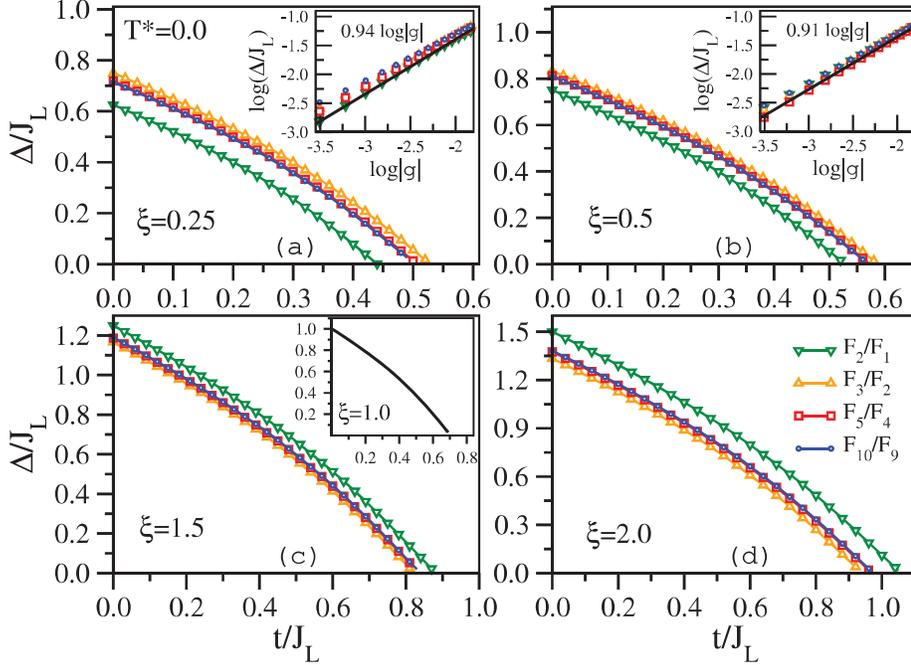
Por ejemplo, la longitud de correlación escala como  $\zeta \propto |g|^{-\nu}$ , donde  $\nu$  es el exponente crítico y  $g = |(\frac{t}{J_L})_c - (\frac{t}{J_L})|$ . Este hecho está relacionado con el comportamiento de escalamiento de  $\Delta/J_L$  en la fase singlete de Kondo que se desvanece cuando  $\Delta/J_L \propto |g|^{\nu z}$  a medida que  $g \rightarrow 0$ . El exponente  $\nu z$  de  $\Delta/J_L$  está conectado a la clase de universalidad del QCP, donde  $z$  es el exponente crítico dinámico que determina la dimensión efectiva  $d_{eff}$  del modelo de acuerdo con  $d_{eff} = D + z$  (23). Por lo que, los resultados están de acuerdo con las características del campo medio y de las aproximaciones empleadas en el presente trabajo bajo el Hamiltoniano (3.5) de operadores de enlace.

En la fase paramagnética, la rama de excitaciones polarizadas- $z$  tiene un valor sin dispersión  $\omega_z(k) = \omega_0$  y las otras dos ramas muestran una dispersión que tiene un mínimo en el vector recíproco AF  $\mathbf{Q} = (\pi, \pi, \pi)$ . Este valor mínimo de las excitaciones define la ecuación para la brecha de espín de Kondo, esta ecuación (3.12) caracteriza la energía para la fase singlete de Kondo en función de  $t/J_L$ , donde la aperiodicidad química de los acoplamientos de intercambio está controlada por  $G_n(\xi)$ . En particular, considerando el caso periódico  $J_L = J_S$  ( $G_n(\xi) \rightarrow 1$  en la ecuación (3.6)) se obtiene la brecha de espín original en el KNM a temperatura cero (104, 156).

En la figura 4.2 se muestra la dependencia de los aproximantes  $F_n/F_{n-1}$  sobre la brecha de espín  $\Delta/J_L$  en 2D, para diferentes razones de acoplamientos Kondo ( $0.25 \leq \xi = \frac{J_S}{J_L} \leq 2$ ). El efecto que genera el aproximante es cambiar ligeramente la posición del QCP, es decir, se observa una convergencia rápida conforme se aumenta la secuencia del aproximante (las secuencias más altas son similares a  $F_{10}/F_9$ ). Esta influencia se observa para todos los valores de  $\xi$ , de modo que a medida que  $\xi$  aumenta el QCP se desvía hacia valores más altos de  $t/J_L$ , mostrando un crecimiento de la fase de líquido de espín de Kondo desordenada.

Además, el cambio de  $\xi$  conduce a diferentes acoplamientos de Kondo, como un entorno químico distinto en el sistema. En el panel interior de la figura 4.2 (c) se observa el caso periódico  $\xi = 1.0$ , con un QCP alrededor de  $(t/J_L)_c \approx 0.69$  para 2D, que está en concordancia con trabajos previos (102, 156). Por otro lado, en los paneles interiores de las figuras 4.2 (a) y (b) se observa, para  $\xi = 0.25$  y  $0.5$  respectivamente, que  $\Delta/J_L \propto |g|^{\nu z}$  cerca de la QPT. Por lo tanto, se puede identificar inmediatamente el exponente de la brecha de espín  $\nu z \approx 1$  (0.94 y 0.91) propio de las redes de Kondo

#### 4. EFECTOS DE LA MODULACIÓN DE INTERCAMBIO APERIÓDICO DEL KNM

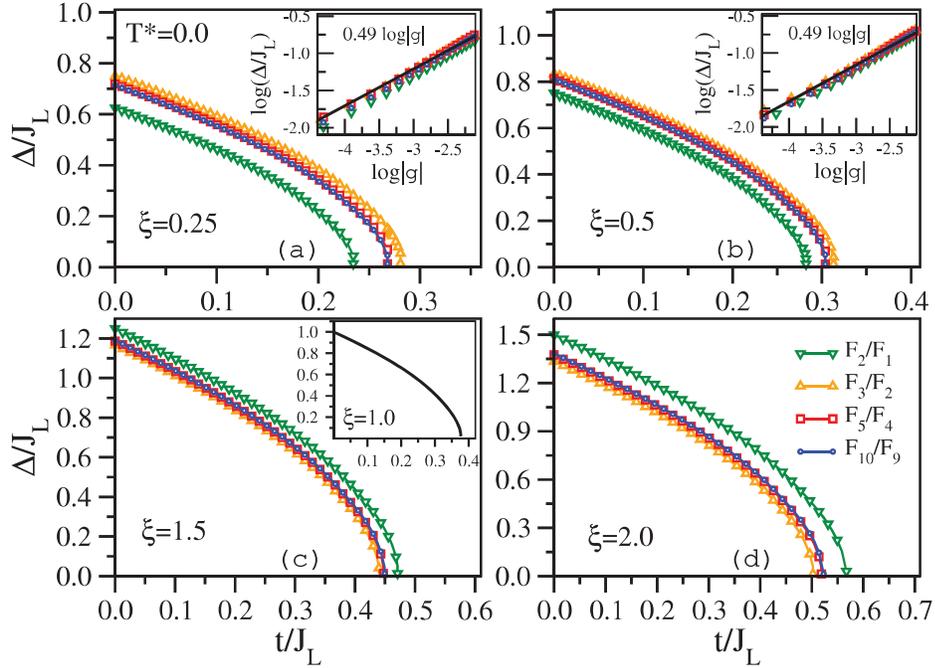


**Figura 4.2:** Brecha de espín a temperatura nula como función de  $t/J_L$  en 2D para diferentes valores de  $\xi$  y  $F_n/F_{n-1}$ . En los paneles interiores de (a) y (b) se muestran gráficas  $\log - \log$  de  $\Delta/J_L$  versus  $|g|$  para  $\xi = 0.25$  y  $0.5$ , respectivamente. En el panel interior de (c) se muestra para el caso periódico  $\xi = 1.0$  donde se recupera el QCP del KNM estandar en 2D.

en 2D (23). Este comportamiento crítico de la brecha de espín también se encuentra para otros aproximantes de  $\xi = 1.5$  y  $2.0$ .

También a temperatura nula, se verifica la robustez del método bajo el cambio de la dimensionalidad a 3D. En la figura 4.3 se observa un comportamiento cualitativamente similar al KNM en 2D, donde la influencia de los aproximantes  $F_n/F_{n-1}$  y la relación entre los acoplamientos Kondo  $\xi$  es notoria. En el panel interior de la figura 4.3 (c) se muestra el caso periódico, en el cual conforme se incrementa  $t/J_L$  (desde su límite de acoplamiento fuerte) la brecha de espín en el vector de onda recíproco  $\mathbf{Q}$  disminuye y desaparece en el QCP alrededor de  $(t/J_L)_c \approx 0.38$  con un exponente crítico  $\nu z \approx 0.5$ , de acuerdo con resultados previos (102, 156).

En los paneles interiores de las figuras 4.3 (a) y (b) se muestran para los casos aperiódicos  $\xi = 0.25$  y  $0.5$ , donde se observa las gráficas  $\log - \log$  de  $\Delta/J_L \propto |g|^{\nu z}$  cerca del QCP, identificando el exponente crítico  $\nu z \approx 0.5$  (0.49 para los dos casos) para una red cúbica de acuerdo con el exponente dinámico del campo medio  $z = 1$  (23). Este comportamiento es compartido para todos los valores de  $\xi$ , es decir, conforme se incrementa  $\xi$  se requiere un valor mayor de  $t/J_L$ , el cual destruye el estado singlete de Kondo e induce un orden AF. También se asegura que para  $\xi = 1.5$  y  $2.0$  se



**Figura 4.3:** Brecha de espín a temperatura nula como función de  $t/J_L$  en 3D para diferentes valores de  $\xi$  y  $F_n/F_{n-1}$ . En los paneles interiores de (a) y (b) se muestran gráficas  $\log - \log$  de  $\Delta/J_L$  versus  $|g|$  para  $\xi = 0.25$  y  $0.5$ , respectivamente. En el panel interior de (c) se muestra para el caso periódico  $\xi = 1.0$  donde se recupera el QCP del KNM estándar en 3D.

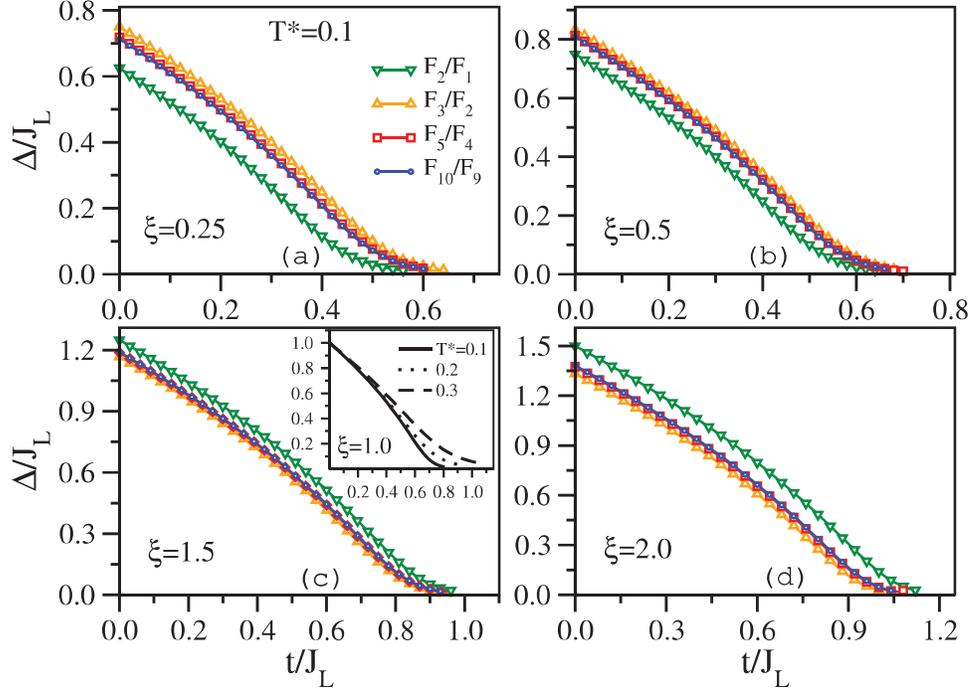
observa un exponente crítico  $\nu z \approx 0.5$ .

#### 4.1.2. Influencia a temperatura finita

Habiendo ya establecido de cómo la aperiodicidad química afecta la brecha de espín de Kondo a temperatura nula en 2D y 3D, ahora se estudia el mismo escenario pero a temperatura finita tal que  $k_B T < J_L, J_S, t$ .

En la figura 4.4 se muestran los resultados numéricos para la brecha de espín de Kondo a temperatura finita  $T^* = 0.1$  en función de  $t/J_L$  en 2D. Contrariamente al caso de la temperatura nula (véase la figura 4.2) se observa que a medida que  $t/J_L$  aumenta la energía de la brecha de espín disminuye pero sin ninguna indicación que sugiera un valor crítico para  $(t/J_L)_c$ , donde  $\Delta/J_L$  se desvanecería. Vale la pena mencionar que este comportamiento es independiente de los casos periódicos  $\xi = 1.0$  o aperiódicos  $\xi \neq 1.0$  y también es válido para todos los aproximantes considerados en esta presente tesis. Por lo tanto, se puede concluir que el KNM periódico y aperiódico en 2D está en concordancia con el teorema de Mermim-Wagner (80), que evita cualquier tipo de estado ordenado a temperatura finita para  $D < 3$ .

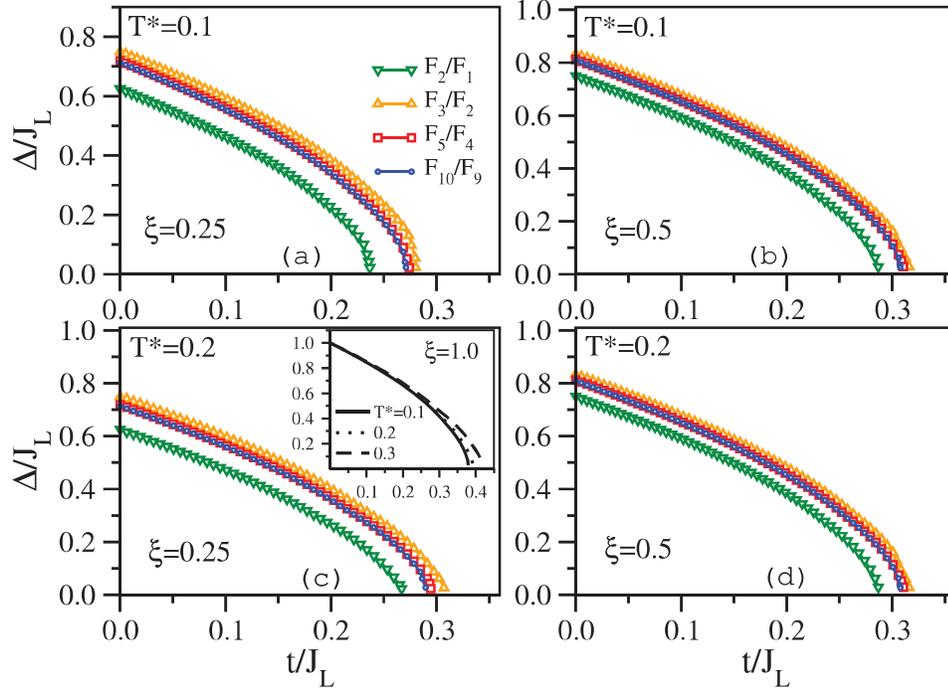
#### 4. EFECTOS DE LA MODULACIÓN DE INTERCAMBIO APERIÓDICO DEL KNM



**Figura 4.4:** Brecha de espín a temperatura finita de  $T^* = 0.1$  como función de  $t/J_L$  en 2D para diferentes valores de  $\xi$  y  $F_n/F_{n-1}$ . En el panel interior de (c) se muestra para el caso periódico ( $\xi = 1.0$ ) en 2D y para varias temperaturas finitas ( $T^* = 0.1, 0.2$ , y  $0.3$ ).

Los paneles superiores e inferiores de la figura 4.5 muestran los resultados de la brecha de espín de Kondo en 3D para  $T^* = 0.1$  y  $T^* = 0.2$ , respectivamente. En esas gráficas se encuentra una diferencia crucial en relación con el KNM en 2D. Se observa que existe siempre un QCP de modo similar al caso 3D a temperatura nula (véase la figura 4.3) que indica una transición de fase del estado paramagnético a un estado ordenado, de acuerdo con las predicciones teóricas para la interacción isotrópica de Kondo (80). Este comportamiento es independiente de la relación de acoplamiento de Kondo  $\xi$  y de los aproximantes  $F_n/F_{n-1}$  considerados.

Por ejemplo, al aumentar la temperatura en el KNM periódico (véase el panel interior de la figura 4.5 (c)), el QCP aumenta lo que demuestra que la temperatura mejora la energía de la brecha de espín y en consecuencia la fase paramagnética del KNM. El mismo comportamiento se observa en el caso aperiódico  $\xi \neq 1.0$  como se muestra para  $\xi = 0.25$  (véase la figura 4.5 (a) y (c)) y para  $\xi = 0.5$  (véase la figura 4.5 (b) y (d)) a medida que aumenta la temperatura.



**Figura 4.5:** Brecha de espín a temperaturas finitas de  $T^* = 0.1, 0.2$  como función de  $t/J_L$  en 3D para diferentes valores de  $\xi$  y  $F_n/F_{n-1}$ . En el panel interior de (c) se muestra para el caso periódico ( $\xi = 1.0$ ) en 3D y para varias temperaturas finitas ( $T^* = 0.1, 0.2$ , y  $0.3$ ).

## 4.2. Influencia de la aperiodicidad química sobre el calor específico

Es preciso recordar que después de la minimización de la energía libre paramagnética  $F$  se obtenía las ecuaciones auto-consistentes de los puntos de inflexión (*saddle-point equations*), las cuales fueron la base para obtener las soluciones numéricas. Asimismo, el calor específico se calcula a partir de la ecuación (3.7) en la fase paramagnética, como la derivada respecto a la temperatura de la energía interna (valor medio del Hamiltoniano efectivo):

$$C = \frac{\partial \langle H_{mf} \rangle}{\partial T} \quad (4.1)$$

$$C = \frac{k_B \omega_0^2}{4(T^*)^2} \frac{1}{\pi} \int_0^\pi \left( \frac{1}{\text{senh}^2 \frac{\omega_0}{2T^*}} + \frac{1 + Y \times \lambda(k)}{\text{senh}^2 \omega_0 \sqrt{1 + Y \times \lambda(k)}} \right) dk \quad (4.2)$$

donde,  $\omega_0 = \left( \frac{G_n(\xi)}{4} + \frac{\mu}{J_L} \right)$ ,  $Y = t\bar{S}^2/\omega_0 J_L$ , y  $\lambda(k) = \sum_{s=1}^D \cos k_s$ , además,  $D$  es la dimensión Euclideana, y  $T^* = k_B T/J_L$  es la temperatura reducida. Por otra parte, existe una motivación de este tipo de cálculos numéricos, considerando la aperiodicidad

## 4. EFECTOS DE LA MODULACIÓN DE INTERCAMBIO APERIÓDICO DEL KNM

---

de intercambio en las propiedades termodinámicas de los modelos de redes de Kondo de dimensiones superiores, porque hasta donde se sabe, no hay estudios de este tipo reportados en la literatura.

Por otra parte, ya se han estudiado intensamente las propiedades físicas de los QCs (y sus aproximantes) a temperatura finita, como por ejemplo las familias del  $Al - Cu - Fe$ ,  $Ce - Yb$ ,  $Y - Mg - Zn$ , y  $Ag - In - Yb$ , en los cuales demostraron que el calor específico tiene una dependencia de la ley de potencia sobre la temperatura similar a los compuestos periódicos. En consecuencia, este comportamiento se entiende adecuadamente en el marco de Landau sobre los líquidos de Fermi (12, 13, 94). A pesar de ello, en la última década varios trabajos, por ejemplo en el compuesto  $Yb - Al - Au$ , han mostrado un comportamiento NFL (33, 78, 123, 145, 146), donde las mediciones de la susceptibilidad magnética,  $\chi$ , y el calor específico,  $C$ , divergen cuando la temperatura  $T \rightarrow 0$ .

Sin embargo, otros investigadores han confirmado que este comportamiento se debe a la fuerte correlación de la fluctuación de valencia crítica del  $Yb$  y la pequeña zona de Brillouin que refleja la celda unitaria grande (142, 144, 146). Este comportamiento NFL a menudo se encuentra cerca de un QCP magnético (130), lo que indica que este estado en esos sistemas puede estar relacionado con la inestabilidad magnética a temperatura nula. Además, en este estado, el coeficiente del término lineal del calor específico,  $\gamma$ , no se satura como se esperaba en el escenario de Landau, es más muestra una dependencia de la temperatura a medida que disminuye este mismo. Para ser precisos, en el QCP esto puede ocurrir hasta las temperaturas más bajas (23).

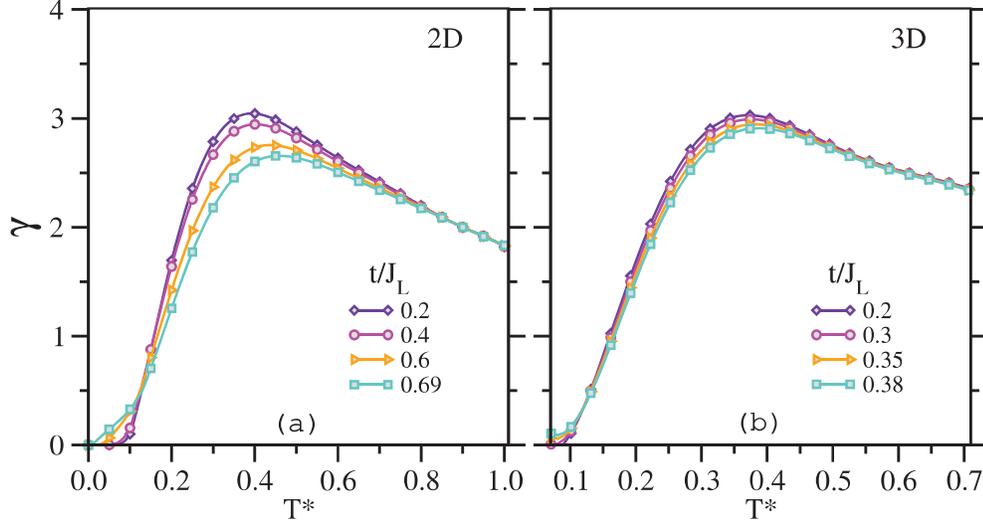
### 4.2.1. Influencia del acoplamiento Kondo en 2D y 3D

Para iniciar la discusión del efecto aperiódico en el calor específico en función de la temperatura, primero se mostrará el caso periódico del KNM en 2D y 3D. En la figura 4.6 (a) y (b) se muestra el coeficiente del término lineal del calor específico  $\gamma = \frac{C}{T^*}$  periódico ( $\xi = 1.0$ ) para diferentes valores del acoplamiento Kondo  $t/J_L$  en 2D y 3D, respectivamente.

Dado que nuestro enfoque se basa en un límite de acoplamiento fuerte, los valores del acoplamiento de Kondo  $t/J_L$  están restringidos a valores menores que el QCP  $t/J_L < (t/J_L)_c$ , donde  $(t/J_L)_c \approx 0.69$  y  $(t/J_L)_c \approx 0.38$  para 2D y 3D, respectivamente. Sin embargo, las gráficas muestran una disminución exponencial a bajas temperaturas que manifiesta la presencia de una brecha de energía finita. En particular en la figura 4.6 (a) se observa que conforme se incrementa  $t/J_L$  existe una disminución del pico de  $\gamma$  (mayor valor), y este pico ligeramente se desplaza a una temperatura mayor. Este comportamiento fue observado en modelos de redes de Kondo (107, 155).

### 4.2.2. Regímenes cerca de la temperatura nula

Los resultados numéricos para el calor específico  $C$  para  $D = 2$  y  $3$  se muestran en las figuras 4.7 y 4.8 para la trayectoria de NFL ( $|g| = 0, \Delta/J_L < T^* < 1$ ) y para el



**Figura 4.6:** Variación del término del calor específico ( $\gamma = C/T^*$ ) en función de la temperatura para el caso periódico ( $\xi = 1.0$ ) y diferentes acoplamientos Kondo ( $t/J_L$ ) en (a) 2D y (b) 3D, respectivamente.

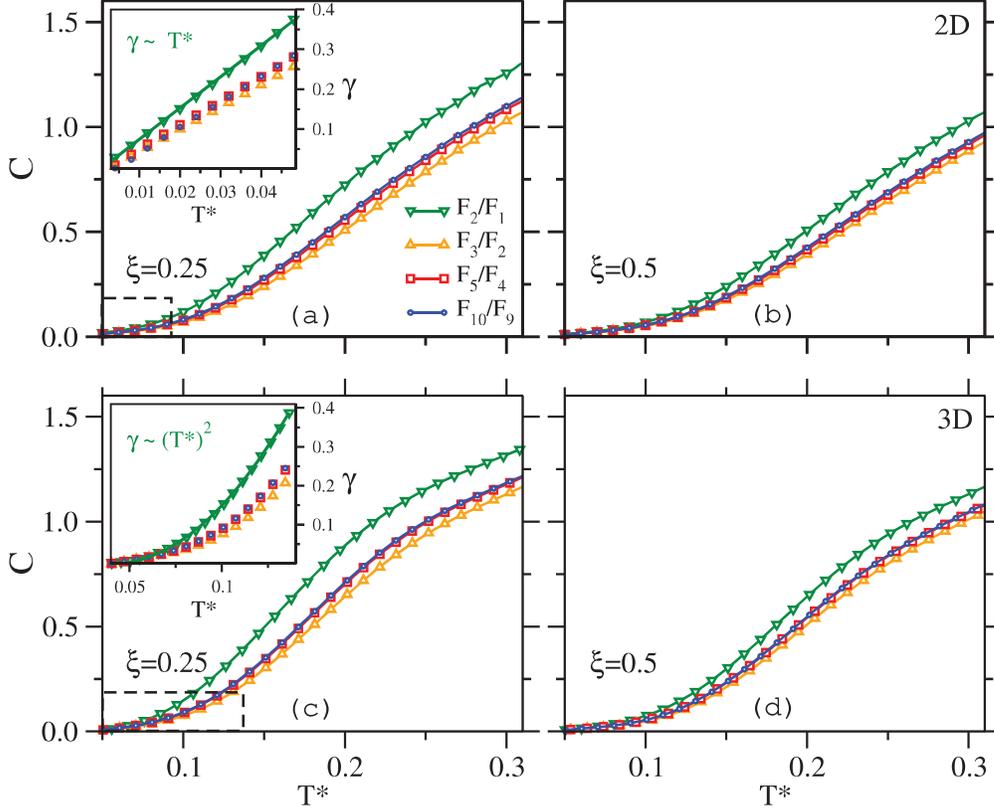
estado KSL ( $|g| > 0, T^* < \Delta/J_L < 1$ ), respectivamente<sup>1</sup>, donde  $g = |(\frac{t}{J_L})_c - (\frac{t}{J_L})|$ . Además, nuestro interés es explorar la influencia de la aperiodicidad química mediante el acoplamiento de Kondo (relacionado con  $\xi = J_S/J_L$ ) y los diferentes aproximantes  $F_n/F_{n-1}$  en el calor específico cerca del QCP. Para lo cual, se examina el  $C$  en la fase paramagnética a temperaturas bajas tales que  $k_B T < J_L$ . Por simplicidad, se considera solo los casos  $\xi = 0.25$  y  $0.5$  de tal manera que  $J_S < J_L$ , sin pérdida de generalidad, porque  $\xi > 1.0$  o  $\xi < 1.0$  nos muestra un entorno químico diferente. Esta fase se caracteriza por una brecha de espín finita que se renormaliza simplemente por la aperiodicidad química introducida en el término de acoplamiento de Kondo, como se muestra a temperatura nula (véanse las figuras 4.2 y 4.3) y temperatura finita (véanse las figuras 4.4 y 4.5).

#### 4.2.2.1. Caso: *Non-Fermi liquid*

En la figura 4.7 (a-d) se muestra el calor específico  $C$  en la trayectoria NFL (*Non-Fermi liquid trajectory*) en función de  $T^*$  para  $\xi = 0.25$ ,  $\xi = 0.5$  y diferentes aproximantes  $F_n/F_{n-1}$ . Los paneles superior e inferior representan para el KNM en 2 y 3 dimensiones, respectivamente. Los paneles interiores de la figura 4.7 (a) y (c) muestra la dependencia de  $\gamma$  con  $T^*$  para  $\xi = 0.25$  a bajas temperaturas (región rectangular discontinua) en 2D y 3D, respectivamente. Estas gráficas muestran la relación  $\gamma_{|g|=0} \propto T^{*(D-z)/z}$  con el exponente dinámico tomando el valor  $z = 1$ , de acuerdo con la teoría de escalamiento (*scaling behavior*) (23), y los resultados analíticos en trabajos previos (102, 107).

<sup>1</sup>Este término  $\gamma = \frac{C}{T^*}$  posee dos aproximaciones en cada régimen: NFL ( $\gamma \propto T^{D-1}$ ) y KSL ( $\gamma \propto e^{-\Delta/k_B T}$ ).

#### 4. EFECTOS DE LA MODULACIÓN DE INTERCAMBIO APERIÓDICO DEL KNM



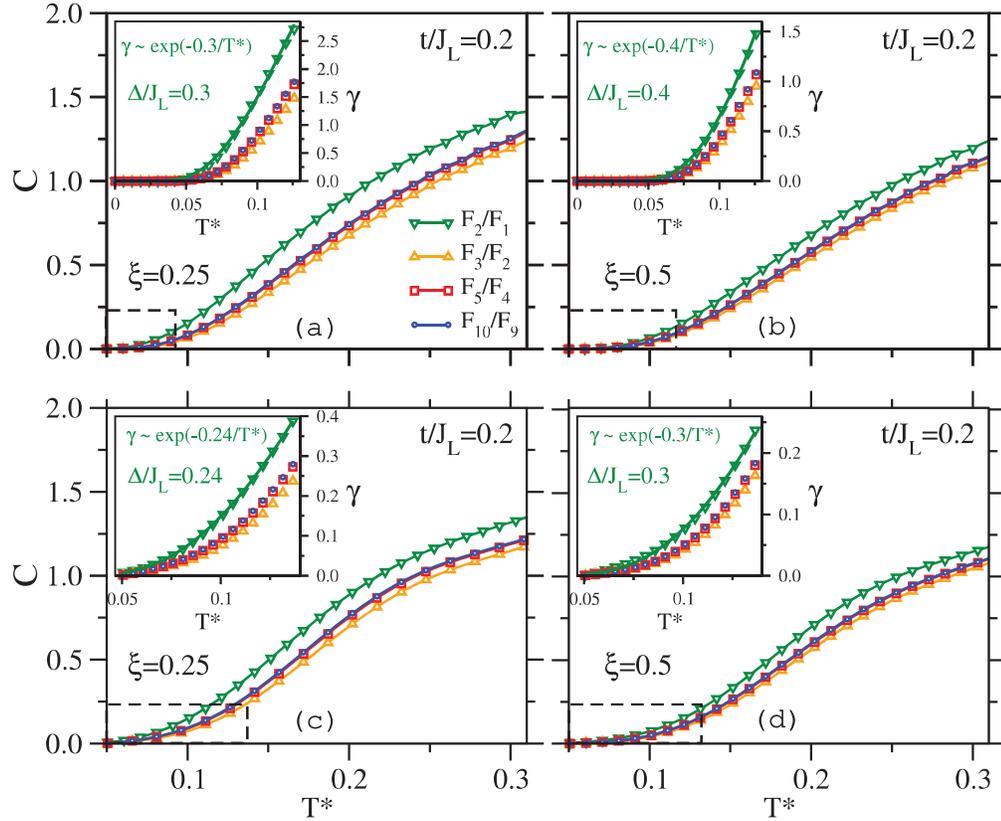
**Figura 4.7:** Variación del  $C$  en la trayectoria NFL como función de  $T^*$  para diferentes aproximantes  $F_n/F_{n-1}$  y para  $\xi=0.25, 0.5$  en (a-b) 2D y (c-d) 3D, respectivamente. En los paneles interiores de (a) y (c) se muestra  $\gamma$  versus  $T^*$  para  $\xi=0.25$  a bajas temperaturas.

Además, se puede garantizar que en la figura 4.7 (c) y (d) se encuentran la misma ley de escalonamiento para  $\xi=0.5$  en 2D y 3D, respectivamente. Conjuntamente con lo anterior para el exponente de la brecha  $\nu z \approx 0.5$  en 3D, se encontró que  $\nu = 1/2$ , lo cual es un resultado que está de acuerdo con el campo medio o carácter Gaussiano de las aproximaciones que hemos usado para tratar con el Hamiltoniano de operadores de enlace (*bond-operator Hamiltonian*). Asimismo, dado que  $z=1$  en 3D se tiene que  $d_{eff} = D + z = d_c = 4$ , donde  $d_c$  es la dimensión crítica superior para la transición magnética (23). En consecuencia, el presente enfoque proporciona la descripción correcta del QCP del KNM para  $D \geq 3$ .

##### 4.2.2.2. Caso: *Kondo spin liquid*

En la figura 4.8 (a-d) se muestra el calor específico  $C$  en el estado KSL (*Kondo spin liquid state*) en función de  $T^*$  para  $\xi=0.25, \xi=0.5$  y diferentes aproximantes  $F_n/F_{n-1}$ . Los paneles superior e inferior representan para el KNM en 2 y 3 dimensiones, respectivamente. Los paneles interiores en todas las gráficas muestran  $\gamma$  versus  $T^*$  a bajas temperaturas (región rectangular discontinua). Sin embargo, cada curva de las

gráficas muestran una disminución exponencial a bajas temperaturas que manifiestan la presencia de una brecha de espín de Kondo finita. E incluso este comportamiento guarda la siguiente relación  $\gamma_{|g|>0} \propto \exp^{-\Delta/(J_L T^*)}$  que está en concordancia con la teoría de escalamiento (23) y con algunos resultados analíticos previos (102). Además, los valores más grandes de  $F_n/F_{n-1}$  muestran una disminución rápida correspondiente a una mayor brecha de energía ( $\Delta/J_L$ ).



**Figura 4.8:** Variación del  $C$  en el estado KSL como función de  $T^*$  para diferentes aproximantes  $F_n/F_{n-1}$  y para  $\xi = 0.25, 0.5$  en (a-b) 2D y (c-d) 3D, respectivamente. En los paneles interiores (a-d) se muestra  $\gamma$  versus  $T^*$  para  $\xi = 0.25$  y  $0.5$  a bajas temperaturas.

Vale la pena mencionar que se observa una convergencia rápida cuando se incrementa la secuencia del aproximante, donde las secuencias superiores ( $\tau^*$ ) son similares a  $F_{10}/F_9$ . No obstante, para un aproximante mayor de la secuencia de Fibonacci  $F_{10}/F_9$  se observa que  $\gamma$  se satura en una curva exponencial que indica que se alcanzó el tamaño del sistema. En este punto, la única forma de modificar la curva  $\gamma$  sería cambiando el acoplamiento Kondo  $t/J_L$ , de modo que, al reducir esto aumentaría la brecha de espín. También se observa que nuestros resultados para la red 2D son similares a los resultados para la red 3D. Asimismo, en este régimen, el calor específico se rige por el término exponencial y de ello se puede concluir que la dimensionalidad no produce mucha dife-

#### 4. EFECTOS DE LA MODULACIÓN DE INTERCAMBIO APERIÓDICO DEL KNM

---

rencia en las propiedades termodinámicas. Este tipo de comportamientos se reportaron utilizando métodos numéricos para el KLM periódico 2D (46), y el KNM anisotrópico (107).

# Conclusiones y perspectivas

---

## 5.1. Conclusiones

En el presente trabajo de tesis se estudió la influencia de la modulación de intercambio aperiódica, denominada también aperiodicidad química, en el comportamiento de las propiedades termodinámicas del modelo del collar de Kondo en dos y tres dimensiones. En general, se investigó la influencia de varios parámetros como  $\xi$  y los aproximantes  $\tau_n = F_n/F_{n-1}$  (ambos factores expresados en  $G_n(\xi)$ ) como efecto de la aperiodicidad sobre la energía de la brecha de espín de Kondo ( $\Delta/J_L$ ) y el calor específico ( $C$ ) de la fase paramagnética.

1. Primero, a partir del capítulo de resultados para la brecha de espín de Kondo se puede concluir que la aperiodicidad química no cambia el comportamiento cualitativo del KNM a temperatura nula y finita. En el caso de la temperatura nula siempre existirá un QCP  $(t/J_L)_c$  para  $D = 2$  y  $3$ , donde la brecha de espín se desvanece como  $\Delta/J_L \propto |g|^{\nu z}$ , y se produce una QPT a una fase magnética ordenada. Además, el cálculo del exponente crítico de  $\Delta/J_L$  observado fue  $\nu z \approx 1$  y  $\nu z \approx 0.5$  en 2D y 3D, respectivamente. En consecuencia, el comportamiento de la energía  $\Delta/J_L$  a temperatura nula sugiere claramente que el estado fundamental del KNM con modulación de intercambio aperiódico pertenece a la misma clase de universalidad que las redes periódicas de Kondo (71, 102, 104, 156). Sin embargo, a temperatura finita se encontró una diferencia crucial en 2D y 3D, por ejemplo, en 2D a medida que  $t/J_L$  aumenta la  $\Delta/J_L$  disminuye sugiriendo que no hay ningún QCP  $(t/J_L)_c$ . Por otra parte, en 3D si hay un valor crítico que indica una transición de fase del KSL desordenado a un estado magnético ordenado de largo alcance. También, se encontró que este comportamiento es independiente de los casos periódicos  $\xi = 1.0$  o aperiódicos  $\xi \neq 1.0$ . Todos estos resultados están en concordancia con el teorema de Mermim-Wagner (80), que prevee cualquier tipo de estado ordenado a temperatura finita para  $D < 3$ .
2. Por otro lado, hemos obtenido el calor específico debido a los grados de libertad magnéticos en la fase paramagnética del KNM para  $D = 2, 3$  y temperaturas  $k_B T < J_L$ , donde la aperiodicidad química afecta los resultados del calor específico  $C$ . Donde el  $C$  mostró un comportamiento de ley de potencia  $\gamma_{|g|=0} \propto T^{*(D-z)/z}$  en la trayectoria NFL, y una disminución exponencial a bajas temperaturas

## 5. CONCLUSIONES Y PERSPECTIVAS

---

$\gamma_{|g|>0} \propto \exp^{-\Delta/(J_L T^*)}$  en el estado KSL, que es independiente de la dimensionalidad. Nuestros resultados mostraron que ambos regímenes están de acuerdo con la teoría de escalamiento (23) y resultados analíticos previos (102, 107). Prácticamente, todos los datos numéricos se obtuvieron para el límite de acoplamiento fuerte  $J/t \rightarrow \infty$ . Por lo tanto, nuestros resultados deberían proporcionar un punto de partida para estudios mucho más profundos sobre el comportamiento crítico cuántico termodinámico del KNM, por ejemplo el método Monte Carlo cuántico (9, 118) y el grupo de renormalización numérica (17).

### 5.2. Perspectivas

Como es sabido en aleaciones metálicas, el acoplamiento AF entre electrones de conducción y un momento localizado conduce al efecto Kondo. Además, la extensión de los momentos localizados que forman la red se entiende como una competencia entre la interacción RKKY (que favorece el orden magnético de largo alcance) y el efecto Kondo (que produce un estado fundamental no magnético). En los cuasicristales (y sus aproximantes), este apantallamiento debería depender en gran medida de la posición espacial de los momentos localizados y de la energía de Fermi del sistema (8). Entonces, el estudio de la presencia de una aperiodicidad estructural, y no química, en las redes de Kondo es un tema abierto y de relevancia para estudiar la criticalidad cuántica.

Otra perspectiva sería comparar nuestros resultados numéricos con datos experimentales para aclarar en qué medida las estimaciones de los parámetros aperiódicos ( $\xi$  y  $F_n/F_{n-1}$ ) con las cantidades medidas experimentalmente dependen de las herramientas analíticas y numéricas empleadas.

---

## Complementos de los métodos analíticos

---

La metodología empleada en la presente tesis se basa principalmente en métodos analíticos y numéricos. Por la parte de métodos analíticos se presenta una representación de operadores de espín  $\frac{1}{2}$  de singletes y tripletes para los electrones de conducción y los electrones localizados, seguidamente el método de las funciones de Green que se empleó para el desacople de las ecuaciones y obtener la relación de dispersión para las excitaciones del sistema. Para más detalles respecto a estos métodos revisar la referencia (75).

### A.1. Representación de operadores de Sachdev

#### Operadores de enlace para espín 1/2<sup>1</sup>

El espín es un operador vectorial cuyos componentes son generadores del grupo  $SU(2)$ , por ejemplo  $\mathbf{S} \rightarrow S_x, S_y, S_z$ , y estos pueden satisfacer las reglas de conmutación del momento angular:

$$[\mathbf{S}^2, S_x] = [\mathbf{S}^2, S_y] = [\mathbf{S}^2, S_z] = 0$$

$$[S_\alpha, S_\beta] = i\epsilon_{\alpha\beta\gamma} S_\gamma, \mathbf{S}^2 = S(S+1) \quad (\text{A.1})$$

donde  $\alpha, \beta, \gamma$  representan índices de los componentes  $x, y, z$  y  $\epsilon_{\alpha\beta\gamma}$  es el tensor antisimétrico (además se estima que:  $\hbar = \mu_B = 1$ ). Ahora, se considera a dos espines,  $\mathbf{S}_1$  y  $\mathbf{S}_2$ , en un sitio- $i$  de una red, donde su Hamiltoniano está descrito por:

$$H = J\mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2 \quad (\text{A.2})$$

Vale aclarar que cuando  $J > 0$  y  $J < 0$  se obtiene un acople antiferromagnético y ferromagnético, respectivamente. De tal manera que existen cuatro estados propios del Hamiltoniano dado por (A.2) (aquí se considera  $J > 0$ ). Sin embargo, si se desea valores del espín total  $S$  a lo largo del eje- $z$ , se elige cuatro combinaciones apropiadas de ellos

---

<sup>1</sup>S. Sachdev y colaboradores introdujeron una representación de operadores de espín- $\frac{1}{2}$  en 1989, denominados *bond-operators* (113).

## A. COMPLEMENTOS DE LOS MÉTODOS ANALÍTICOS

---

**Tabla A.1:** Estados singlete y triplete para un par de espines- $\frac{1}{2}$  situados en un sitio- $i$  de una red.

Estado		$S$	$S_z$
Singlete	$\frac{1}{\sqrt{2}}( \uparrow\downarrow\rangle -  \downarrow\uparrow\rangle)$	0	0
Triplete	$ \uparrow\uparrow\rangle$	1	1
Triplete	$\frac{1}{\sqrt{2}}( \uparrow\downarrow\rangle +  \downarrow\uparrow\rangle)$	1	0
Triplete	$ \downarrow\downarrow\rangle$	1	-1

(véase la tabla A.1):

Con esto se puede formar cuatro estados en el espacio de Hilbert (1 estado fundamental y 3 estados excitados). Por lo tanto se definen operadores de creación de estos estados a partir del vacío  $|0\rangle$  como:

$$\begin{aligned}
 |s\rangle &= s^\dagger|0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle), \\
 |t_x\rangle &= t_x^\dagger|0\rangle = -\frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\uparrow\rangle - |\downarrow\downarrow\rangle), \\
 |t_y\rangle &= t_y^\dagger|0\rangle = \frac{i}{\sqrt{2}}(|\uparrow\uparrow\rangle + |\downarrow\downarrow\rangle), \\
 |t_z\rangle &= t_z^\dagger|0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle).
 \end{aligned} \tag{A.3}$$

Si la brecha de energía entre el estado singlete ( $E_s = -3J/4$ ) y el estado triplete ( $E_t = J/4$ ) es pequeña, la física a bajas temperaturas será determinada por estos cuatro estados (75, 102), en consecuencia el sistema será descrito por el grado de libertad del espín. Sin embargo, la condición del estado físico en el espacio de Hilbert es satisfecha por la relación:

$$s^\dagger s + \sum_{\alpha} t_{\alpha}^\dagger t_{\alpha} = 1 \tag{A.4}$$

donde, el primer y segundo término representa cuando estados singletes y tripletes se tiene, respectivamente ( $\alpha = x, y, z$ ). A continuación se demuestra que podemos escribir los operadores del par de espín en términos de estos operadores ( $\mathbf{S}_1, \mathbf{S}_2 \rightarrow s, t_x, t_y, t_z$ ):

$$\begin{aligned}
 S_x|\uparrow\rangle &= \frac{1}{2}|\downarrow\rangle, & S_x|\downarrow\rangle &= \frac{1}{2}|\uparrow\rangle \\
 S_y|\uparrow\rangle &= \frac{i}{2}|\downarrow\rangle, & S_y|\downarrow\rangle &= \frac{-i}{2}|\uparrow\rangle
 \end{aligned}$$

$$S_z|\uparrow\rangle = \frac{1}{2}|\uparrow\rangle, \quad S_z|\downarrow\rangle = -\frac{1}{2}|\downarrow\rangle \quad (\text{A.5})$$

Posteriormente, se aplica el operador en una sola componente  $\mathbf{S}_1 \rightarrow S_{1x}$  a los estados singlete y tripletes como:

- Estado singlete  $|s\rangle$ :

$$\begin{aligned} S_{1x}|s\rangle &= S_{1x} \left( \frac{1}{\sqrt{2}}[|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle] \right) = -\frac{1}{2} \left( \frac{1}{\sqrt{2}}[|\uparrow\uparrow\rangle - |\downarrow\downarrow\rangle] \right) = \frac{1}{2}|t_x\rangle \\ S_{1x}|s\rangle &= S_{1x}s^\dagger|0\rangle = \frac{1}{2}|t_x\rangle \end{aligned}$$

Por otro lado se tiene que:

$$\begin{aligned} \frac{1}{2}t_x^\dagger s s^\dagger|0\rangle &= \frac{1}{2}|t_x\rangle \\ S_{1x} &\propto \frac{1}{2}t_x^\dagger s \end{aligned} \quad (\text{A.6})$$

- Estado triplete  $|t_x\rangle$ :

$$\begin{aligned} S_{1x}|t_x\rangle &= S_{1x} \left( -\frac{1}{\sqrt{2}}[|\uparrow\uparrow\rangle - |\downarrow\downarrow\rangle] \right) = \frac{1}{2}|s\rangle \\ S_{1x}|t_x\rangle &= S_{1x}t_x^\dagger|0\rangle = \frac{1}{2}|s\rangle \end{aligned}$$

Por otro lado se tiene que:

$$\begin{aligned} \frac{1}{2}s^\dagger t_x t_x^\dagger|0\rangle &= \frac{1}{2}|s\rangle \\ S_{1x} &\propto \frac{1}{2}s^\dagger t_x \end{aligned} \quad (\text{A.7})$$

- Estado triplete  $|t_y\rangle$ :

$$\begin{aligned} S_{1x}|t_y\rangle &= S_{1x} \left( \frac{i}{\sqrt{2}}[|\uparrow\uparrow\rangle + |\downarrow\downarrow\rangle] \right) = \frac{i}{2}|t_z\rangle \\ S_{1x}|t_y\rangle &= S_{1x}t_y^\dagger|0\rangle = \frac{i}{2}|t_z\rangle \end{aligned}$$

Por otro lado se tiene que:

$$\begin{aligned} \frac{i}{2}t_z^\dagger t_y t_y^\dagger|0\rangle &= \frac{i}{2}|t_z\rangle \\ S_{1x} &\propto \frac{i}{2}t_z^\dagger t_y \end{aligned} \quad (\text{A.8})$$

- Estado triplete  $|t_z\rangle$ :

$$S_{1x}|t_z\rangle = S_{1x} \left( \frac{1}{\sqrt{2}}[|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle] \right) = -\frac{i}{2}|t_y\rangle$$

$$S_{1x}|t_z\rangle = S_{1x}t_z^\dagger|0\rangle = -\frac{i}{2}|t_y\rangle$$

Por otro lado se tiene que:

$$-\frac{i}{2}t_y^\dagger t_z t_z^\dagger|0\rangle = -\frac{i}{2}|t_y\rangle$$

$$S_{1x} \propto -\frac{i}{2}t_y^\dagger t_z \quad (\text{A.9})$$

De tal manera que considerando las ecuaciones desde (A.6) hasta (A.9), se tiene que el operador  $S_{1x} = \frac{1}{2}(s^\dagger t_x + t_x^\dagger s - i[t_y^\dagger t_z - t_z^\dagger t_y])$  también se puede expresar en función de los operadores singlete y triplete, empleando el tensor antisimétrico  $\epsilon_{\alpha\beta\gamma}t_\beta^\dagger t_\gamma = (\epsilon_{xyz}t_y^\dagger t_z + \epsilon_{xzy}t_z^\dagger t_y)$ , como:

$$S_{1x} = \frac{1}{2} \left( s^\dagger t_x + t_x^\dagger s - i\epsilon_{\alpha\beta\gamma}t_\beta^\dagger t_\gamma \right) \quad (\text{A.10})$$

Por lo tanto, desarrollando del mismo modo para  $\mathbf{S}_1 \rightarrow S_{1y}$  y  $\mathbf{S}_1 \rightarrow S_{1z}$  se tiene una generalización para  $S_{1,\alpha}$ , además usando la misma lógica también se obtiene una generalización para  $S_{2,\alpha}$ , de tal manera que se tiene una representación en función de los operadores singlete y triplete como sigue:

$$S_{1,\alpha} = \frac{1}{2} \left( s^\dagger t_\alpha + t_\alpha^\dagger s - i\epsilon_{\alpha\beta\gamma}t_\beta^\dagger t_\gamma \right)$$

$$S_{2,\alpha} = \frac{1}{2} \left( -s^\dagger t_\alpha - t_\alpha^\dagger s - i\epsilon_{\alpha\beta\gamma}t_\beta^\dagger t_\gamma \right) \quad (\text{A.11})$$

### Relaciones de conmutación de los operadores de enlace 1/2

Vale mencionar que los operadores (A.4) satisfacen las relaciones de conmutación de la ecuación (A.1) como:

$$[s, s^\dagger] = 1, \quad [t_\alpha, t_\beta^\dagger] = \delta_{\alpha,\beta}, \quad [s, t_\alpha^\dagger] = 0 \quad (\text{A.12})$$

Ahora se verifica la conmutación para  $S_1$  y  $S_2$ , como es de costumbre primero se realiza para las componentes  $[S_{1x}, S_{1y}] = iS_{1z}$  empleando la representación para  $s$  y  $t_\alpha$  acompañada de la identidad  $[AB, CD] = -[C, A]BD - A[C, B]D - C[D, A]B - CA[D, B]$ , se encuentra que:

$$\begin{aligned}
[S_{1x}, S_{1y}] &= \frac{1}{4} \left( -t_y^\dagger t_x + i s^\dagger t_z + t_x^\dagger t_y + i t_z^\dagger s + i s^\dagger t_z - t_y^\dagger t_x + i t_z^\dagger s + t_x^\dagger t_y \right) \\
[S_{1x}, S_{1y}] &= \frac{i}{2} \left( s^\dagger t_z + t_z^\dagger s - i[t_x^\dagger t_y - t_y^\dagger t_x] \right) = i S_{1z}
\end{aligned} \tag{A.13}$$

De la misma manera se obtiene para el resto de componentes:

$$\begin{aligned}
[S_{1\alpha}, S_{1\beta}] &= i \epsilon_{\alpha\beta\gamma} S_{1\gamma}, & [S_{2\alpha}, S_{2\beta}] &= i \epsilon_{\alpha\beta\gamma} S_{2\gamma}, \\
[S_{1\alpha}, S_{2\beta}] &= 0, & \mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2 &= -\frac{3}{4} s^\dagger s + \frac{1}{4} t_\alpha^\dagger t_\alpha, \\
\mathbf{S}_1^2 &= \frac{3}{4}, & \mathbf{S}_2^2 &= \frac{3}{4}.
\end{aligned} \tag{A.14}$$

Por lo tanto, se puede mencionar de esta última relación que cada sitio- $i$  ocupa un único tipo de operador de espín  $\mathbf{S}_{1(2)}$ .

## A.2. Esquema de las Funciones de Green

### Método de las funciones de Green<sup>1</sup>

Primero se define un operador cualquiera  $X$ , el cual puede ser descrito como:

$$\langle X \rangle = \frac{1}{Z} \text{tr} \left[ X e^{-\beta(H - \mu N)} \right], \quad Z = \text{tr} \left[ e^{-\beta(H - \mu N)} \right]$$

donde,  $H$  es el Hamiltoniano del sistema,  $\beta = \frac{1}{k_B T}$  es el factor de Boltzmann y  $\mu$  es el potencial químico. Ahora se considera dos operadores en el cuadro de Heisenberg:  $A(t) = e^{iHt} A(0) e^{-iHt}$  y  $B(t') = e^{iHt'} B(0) e^{-iHt'}$  ( $\hbar = 1$ ). Asimismo, se define las funciones de Green retardada (+) y avanzada (-) como:

$$\ll A(t) B(t') \gg_{\pm} = \mp \theta(t - t') \langle [A(t), B(t')]_{\eta} \rangle. \tag{A.15}$$

Si los operadores son bosónicos o fermiónicos  $\eta = 1$  o  $-1$ , respectivamente. La función  $\theta(t)$  es la función escalón de Heavyside definida  $\theta(t) = 1$  ( $t > 0$ ) y  $\theta(t) = 0$  ( $t < 0$ ). Las funciones (A.15) satisfacen la ecuación de movimiento:

$$i \frac{d}{dt} \ll A(t); B(t') \gg_{\pm} = \delta(t - t') \langle [A(t), B(t')]_{\eta} \rangle + \ll [A(t), H]_{-}; B(t') \gg_{\pm} \tag{A.16}$$

donde,  $\ll A(t); B(t') \gg_{\pm}$  son funciones de  $(t - t')$  y pueden definirse para valores reales de  $z$  mediante la transformada de Fourier:

---

<sup>1</sup>Se presenta algunas definiciones básicas de la técnica de las funciones de Green que envuelven operadores y sus valores medios descritas por Zubarev (159).

$$\ll A(t); B(t') \gg_{\pm} = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \ll A(t); B(0) \gg_{\pm} e^{izt} dt. \quad (\text{A.17})$$

En el caso de la función de Grenn retardada, la integral (A.17) también converge para valores complejos de  $z$ , siempre que  $Im(z) > 0$ . Por lo tanto,  $\ll A; B \gg_{\pm}$  son funciones regulares en la parte superior (+) e inferior (-) del plano complejo  $z$ , respectivamente. Además, se puede mencionar que  $\ll A; B \gg_z$  es regular en todo el plano complejo  $z$  excepto sobre el eje real. Con esto y la ecuación (A.17) se obtiene la ecuación de movimiento de los propagadores:

$$z \ll A(t); B(t') \gg_z = \frac{1}{2\pi} \langle [A, B]_{\eta} \rangle + \ll [A(t), H]_-; B(t') \gg_z, \quad (\text{A.18})$$

además la expresión fundamental de Zubarev, la cual relaciona la media térmica  $\langle BA \rangle$  con las funciones de Green, está dado por:

$$\langle B(t')A(t) \rangle = \text{ilim}_{\delta \rightarrow 0^+} \int_{-\infty}^{\infty} [\ll A; B \gg_{z+i\delta} - \ll A; B \gg_{z-i\delta}] \left( \frac{e^{iz(t-t')}}{e^{\beta(z-\mu)} - \eta} \right) dz. \quad (\text{A.19})$$

### Relaciones de dispersión para las excitaciones del sistema

El Hamiltonio del campo medio esta expresado en la ecuación (3.7), y a partir de el se determina el valor medio de los operadores tripletes ( $\langle t_{k,z}^{\dagger}, t_{k,z} \rangle \leftarrow \ll t_{k,z}; t_{k,z}^{\dagger} \gg$ ) como:

$$\omega \ll t_{k,z}; t_{k',z'}^{\dagger} \gg = \frac{1}{2\pi} \langle [t_{k,z}, t_{k',z'}^{\dagger}] \rangle + \ll [t_{k,z}, H_{mf}]; t_{k',z'}^{\dagger} \gg. \quad (\text{A.20})$$

Además, desarrollando los términos por ejemplo se obtiene que  $[t_{k,z}, H_{mf}] = \omega_0 \sum_{k''} (t_{k'',z''}^{\dagger} [t_{k,z}, t_{k'',z''}] + [t_{k,z}, t_{k'',z''}^{\dagger}] t_{k'',z''})$  y reemplazando en (A.20) se tiene:

$$\begin{aligned} \omega \ll t_{k,z}; t_{k',z'}^{\dagger} \gg &= \frac{1}{2\pi} \delta_{k,k',z,z'} + \ll \omega_0 t_{k,z}; t_{k',z'}^{\dagger} \gg \\ & \ll t_{k,z}; t_{k,z}^{\dagger} \gg = \frac{1}{2\pi(\omega - \omega_0)} \end{aligned} \quad (\text{A.21})$$

Ahora para calcular el resto de valores medios se realiza lo siguiente:

$$\blacksquare \langle t_{k,\gamma}^{\dagger}, t_{k,\gamma} \rangle \leftarrow \ll t_{k,\gamma}; t_{k,\gamma}^{\dagger} \gg$$

$$\omega \ll t_{k,\gamma}; t_{k',\gamma'}^{\dagger} \gg = \frac{1}{2\pi} \langle [t_{k,\gamma}, t_{k',\gamma'}^{\dagger}] \rangle + \ll [t_{k,\gamma}, H_{mf}]; t_{k',\gamma'}^{\dagger} \gg$$

$$\begin{aligned}\omega \ll t_{k,\gamma}; t_{k',\gamma'}^\dagger \gg &= \frac{1}{2\pi} + \ll \Lambda_k t_{k,\gamma} + 2\Delta_k t_{-k,\gamma}^\dagger; t_{k,\gamma}^\dagger \gg \\ (\omega - \Lambda_k) \ll t_{k,\gamma}; t_{k,\gamma}^\dagger \gg &= \frac{1}{2\pi} + 2\Delta_k \ll t_{-k,\gamma}^\dagger; t_{k,\gamma}^\dagger \gg\end{aligned}\quad (\text{A.22})$$

$$\begin{aligned}\blacksquare \langle t_{k,\gamma}^\dagger, t_{-k,\gamma}^\dagger \rangle \leftarrow \ll t_{-k,\gamma}^\dagger; t_{k,\gamma}^\dagger \gg \\ \omega \ll t_{-k,\gamma}^\dagger; t_{k',\gamma'}^\dagger \gg &= \frac{1}{2\pi} \langle [t_{-k,\gamma}^\dagger, t_{k',\gamma'}^\dagger] \rangle + \ll [t_{-k,\gamma}^\dagger, H_{mf}]; t_{k',\gamma'}^\dagger \gg \\ \omega \ll t_{-k,\gamma}^\dagger; t_{k',\gamma'}^\dagger \gg &= - \ll \Lambda_k t_{-k,\gamma}^\dagger + 2\Delta_k t_{k,\gamma}; t_{k',\gamma'}^\dagger \gg \\ (\omega + \Lambda_k) \ll t_{-k,\gamma}^\dagger; t_{k,\gamma}^\dagger \gg &= -2\Delta_k \ll t_{k,\gamma}; t_{k,\gamma}^\dagger \gg\end{aligned}\quad (\text{A.23})$$

y operando estas dos ecuaciones (A.22) y (A.23) se obtiene

$$\begin{aligned}\ll t_{k,\gamma}; t_{k,\gamma}^\dagger \gg_\omega &= \frac{1}{2\pi} \frac{\omega + \Lambda_k}{\omega^2 - \Lambda_k^2 + (2\Delta_k)^2} \\ \ll t_{k,\gamma}; t_{k,\gamma}^\dagger \gg_\omega &= \frac{(\omega + \Lambda_k)}{2\pi(\omega^2 - \omega_k^2)},\end{aligned}\quad (\text{A.24})$$

donde  $\omega_k^2 = \Lambda_k^2 - (2\Delta_k)^2$ .

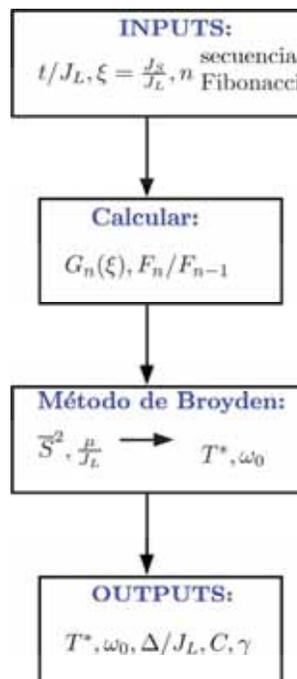


---

## Complementos de los métodos numéricos

---

La metodología utilizada para desarrollar la presente tesis se basa principalmente en métodos analíticos y numéricos. Respecto a los métodos numéricos se presenta el programa en fortran y los *scripts* en código *bash* que se implementaron para el cálculo del calor específico solo para el caso 2D (véase el diagrama de flujo B.1).



**Figura B.1:** Diagrama de flujo para determinar la brecha de espín y el calor específico en 2D o 3D, donde los datos de entrada (*INPUTS*) son necesarios para la obtención de los resultados (*OUTPUTS*).

## B.1. Programa principal para determinar el calor específico en 2D

```

program SpecificHeat
USE nrtype; Use nr, ONLY: broydn
implicit none
REAL(SP), DIMENSION(2) :: x
LOGICAL(LGT) :: check
real(SP) :: tJL,Gn,kbTJL, dalpha, ftol, fret,GAP,xj21,y
REAL(SP) :: ff,gg,ss,muJL,ss0,muJL0,w0,a
integer(I4B) :: ndata, nangles, i, j, n, nH, iter,ii
integer :: dum, signn, k, cont,ngen,nn,xfn,xfn1
real(SP) :: dff(2), dgg(2)
CHARACTER(len=1) :: last
CHARACTER(LEN=2) :: ngg
CHARACTER(LEN=10)::in1,in2
CHARACTER(LEN=5) :: in3
CHARACTER(LEN=50)::in4

INTERFACE
  FUNCTION cv(x,tJL,Gn,kbTJL)
  USE nrtype
  IMPLICIT NONE
  REAL(SP),DIMENSION(:),INTENT(IN) :: x
  REAL(SP), INTENT(IN) :: tJL,Gn,kbTJL
  REAL(SP) :: cv
  END FUNCTION cv
END INTERFACE

!===== INPUT PARAMETERS =====
if(iargc(>0)then
  call getarg(1,in1) !!! tJL = t/JL normalized. File: <"tJL.in">
  call getarg(2,in2) !!! xj21 aperiodic interchange. File: <"xj21.in">
  call getarg(3,in3) !!! ngen fibonacci-generation. File: <"ngens.in">
  call getarg(4,in4) !!! output file for specific heat
  read(in1,*) tJL
  read(in2,*) xj21 !!! xJ21=Js/JL=J2/J1
  print*, in3
  read(in3,*) ngen !!! ngen=G_n(Js/JL)
end if
!=====
!compression factor
a=1.0
ngen=2
CALL fibo_secuen(ngen,nn,xfn,xfn1,LAST)

```

```

print*, 'ngen=',ngen
print*, 'number of spins=', nn
!=====!
!      Gn(Ee)= equation (4)
Gn=(xFn*1.0+xFn1*(xj21))/(xFn*1.0+xFn1)
print*, Gn
print*, 'nJL=',xfn
print*, 'nJS=',xfn1

OPEN(UNIT=30,FILE=in4,ACTION='WRITE',STATUS='replace')
kbTJL = 1e-10
DO ii = 1,101
    x(1) = 0.9 ! ss
    x(2) = 1.9
    CALL broydn(x,check,tJL,Gn,kbTJL)
    ss = x(1)**2
    muJL=x(2)
    w0 = Gn/4. + muJL
    y = tJL*ss/w0
    write(30,*) kbTJL, w0*sqrt(1-2.*y),x(1)**2,x(2),cv(x,tJL,Gn,kbTJL)
    write(*,*) kbTJL, w0*sqrt(1-2.*y),x(1)**2,x(2),cv(x,tJL,Gn,kbTJL)
kbTJL= kbTJL + 0.01
END DO
close(30)

end program

```

## B.2. *Script* para compilar el resto de programas

```

#!/bin/bash

gfortran SpecifiHeat.f90 broydn.f90 nrutil.f90 nrtype.f90 nr.f90 fminln.f90 \\  

fdjac.f90 qrdcmp.f90 rsolv.f90 rotate.f90 grupdt.f90 pythag_sp.f90 lnsrch.f90 \\  

funcv.f90 lambda.f90 fibo_secuen.f90 cv.f90 -o Cv2D

```

## B.3. *Script* para calcular el calor específico en función de

$$t/J_L, \xi \text{ y } F_n/F_{n-1}$$

```

#!/bin/bash

dir1=$(pwd)
i=1
tjl=$(cat $dir1/tJLs.in)
for tj in $tjl; do
    mkdir $dir1/tJL-$tj

```

## B. COMPLEMENTOS DE LOS MÉTODOS NUMÉRICOS

---

```
xifile=$(cat $dir1/xj21s.in)
for xJ21 in $xifile; do
  mkdir $dir1/tJL-$tj/xi$xJ21

  gene=$(cat $dir1/ngens.in)
  for ngen in $gene; do
    echo " beginning the CV calculation for tjl= $tj/xj21=$xJ21/gen=$ngen at stage $i "

    ./Cv2D $tj $xJ21 $ngen ngen-$ngen.dat >> outfile-T$tj.dat
    mv ngen-$ngen.dat $dir1/tJL-$tj/xi$xJ21/
    done
  mv outfile-T$tj.dat $dir1/tJL-$tj/xi$xJ21/
done
  let i=i+1
done

echo "the process is completed"
```

## Publicación relacionada con la tesis

Es preciso destacar que parte del trabajo presentado en esta tesis fue publicada en una revista internacional ([hacer click en este enlace](#)).

Journal of Magnetism and Magnetic Materials 469 (2019) 461–466

Contents lists available at ScienceDirect

Journal of Magnetism and Magnetic Materials

journal homepage: [www.elsevier.com/locate/jmmm](http://www.elsevier.com/locate/jmmm)

Research articles

**Aperiodic exchange modulation effect on the specific heat in the Kondo necklace model**

Daniel Reyes<sup>a,\*</sup>, G. Cuba-Supanta<sup>b</sup>, H.S. Tarazona<sup>b</sup>, C.V. Landauero<sup>b</sup>, R.M. Espinoza-Bernardo<sup>b</sup>

<sup>a</sup> Instituto Militar de Engenharia, Praça General Tibúrcio, 80, 22290-270 Praia Vermelha, Rio de Janeiro, Brazil  
<sup>b</sup> Facultad de Ciencias Físicas, Universidad Nacional Mayor de San Marcos, P.O. Box 1-0149 Lima 16, Peru

## A B S T R A C T

In the present work we study the effect of the aperiodic exchange modulation on the spin gap at finite temperature as well as the specific heat of the Kondo necklace model in two and three dimensions. For this purpose, we use a representation for the localized and conduction electrons in terms of local Kondo singlet and triplet operators. A decoupling scheme on the double time Green's functions is also used to find the dispersion relation for the excitations of the system. The influence of the aperiodic exchange modulation on the spin gap at low temperatures is discussed in the paramagnetic phase. Moreover, we investigate the specific heat as a function of the aperiodic exchange modulation at low temperatures in two cases: above the quantum critical point i.e., along the so-called *non-Fermi liquid trajectory* and in the Kondo spin liquid state. We have also compared our results with previous bond operator mean-field calculations.

## 1. Introduction

In the last years many studies on the low energy properties of quantum spin systems with modulated spatial structure have been attracting wide interest due to the huge sensitivity to structural details in such systems [1–6]. Even, in real quasicrystalline systems [7] with structural [1,2] and chemical [8,9] aperiodicity, the physical properties strongly differ from their related crystalline phases [10,11]. In this scenario, it has been recently observed a heavy fermion *like* behavior on the  $\text{Yb}_{13}\text{Al}_8\text{Au}_{13}$  icosahedral quasicrystal compound and its approximant crystal  $\text{Yb}_{14}\text{Al}_8\text{Au}_{13}$  [12–15], where measurements of the magnetic susceptibility  $\chi$  and specific heat  $C$  diverge as temperature  $T \rightarrow 0$  (quantum criticality). Several authors have claimed that this non-Fermi liquid (NFL) behavior is due to strong correlations of the critical Yb-valence fluctuation and small Brillouin zone (corresponding by large unit cell) [16,17]. This singular behavior has been studied by using the Anderson impurity model for a single local moment coupled to conduction electrons in an approximant geometry [18]. The main result of this study is that NFL behavior of  $\chi$  and  $C$  are due to a broad power-law distribution of Kondo temperatures which delays screening of a huge fraction of the magnetic moments until very low temperatures.

In heavy fermion systems two different electrons are mainly found: conduction electrons, corresponding to  $s$  and  $p$  orbitals that move through the crystalline lattices, and the localized electrons, corresponding to  $f$  orbitals. The interaction between these electrons leads to competition between two effects. The first one, the Kondo effect, tends to screen the localized magnetic moment (of  $f$  electrons) and generates

a nonmagnetic ground state. The second one, called the Ruderman-Kittel-Kasuya-Yosida (RKKY) interaction, is an indirect exchange between the magnetic ions, mediated by the conduction electrons, and favors long-range magnetic order. These effects are contained in the Kondo necklace model [19] which neglects charge fluctuations and considers only spin fluctuations. Previous work of the Kondo necklace model (KNM) in one dimensional chain lattices showed that the pure KNM at zero [20] and finite temperature [21], do not present any long-range magnetic order. On the other hand, studies carried out with this model but at higher dimensions indicate that the model presents a quantum critical point (QCP) where the nonmagnetic gapped phase goes to zero and at the same time appears a magnetic gapless phase [22–24]. The KNM was also employed for studying heavy fermion systems under a magnetic field [25,26], considering thermal and magnetic entanglement [27], dimensional crossover [28,29], anisotropy [30–33] and recently for studying the role of an aperiodic exchange modulation (chemical aperiodicity) in heavy fermions materials [8].

Thermodynamic quantum critical behavior and physical properties of the KNM have been studied using the bond operator mean-field approximation where analytical relations [22,30] and numerical results [24,31,32,34] were found close to the QCP, for the spin gap, the critical Néel line, and the specific heat. In this framework, we introduce here an aperiodic modulation, i.e., a Fibonacci sequence, on the antiferromagnetic (AF) Kondo coupling  $J$  of the finite temperature KNM to study its effects on the specific heat. This study will be done along the so-called NFL trajectory, and in the Kondo spin liquid (KSL) state where

\* Corresponding author.  
 E-mail address: [daniel@chpfbr](mailto:daniel@chpfbr) (D. Reyes).

<https://doi.org/10.1016/j.jmmm.2018.08.072>  
 Received 26 February 2018; Received in revised form 20 July 2018; Accepted 26 August 2018  
 Available online 05 September 2018  
 0304-8853/© 2018 Elsevier B.V. All rights reserved.



# Bibliografía

---

- [1] Abrikosov, A. (1965a). Aa abrikosov, physics 2, 5 (1965). *Physics*, 2:5. 31
- [2] Abrikosov, A. A. (1965b). On the anomalous temperature dependence of the resistivity of non-magnetic metals with a weak concentration of magnetic impurities. *Soviet Journal of Experimental and Theoretical Physics*, 21:660. 31
- [3] Abrikosov, A. A., Gorkov, L. P., and Dzialoshinski, I. E. (1965). *Quantum field theoretical methods in statistical physics*, volume 4. Pergamon. 31
- [4] Aeppli, G. and Fisk, Z. (1992). Kondo insulators. *Comments Condens. Matter Phys*, 16:155–165. 23, 24
- [5] Amusia, M. Y. and Shaginyan, V. (2013). Fermion condensate as a new state of matter. *Contributions to Plasma Physics*, 53(10):721–730. 25
- [6] Anderson, M. H., Ensher, J. R., Matthews, M. R., Wieman, C. E., and Cornell, E. A. (1995). Observation of bose-einstein condensation in a dilute atomic vapor. *science*, 269:198–201. 4
- [7] Anderson, P. W. (1961). Localized magnetic states in metals. *Physical Review*, 124(1):41. 25, 34
- [8] Andrade, E. C., Jagannathan, A., Miranda, E., Vojta, M., and Dobrosavljević, V. (2015). Non-fermi-liquid behavior in metallic quasicrystals with local magnetic moments. *Physical review letters*, 115(3):036403. 5, 25, 66
- [9] Assaad, F. (1999). Quantum monte carlo simulations of the half-filled two-dimensional kondo lattice model. *Physical review letters*, 83(4):796. 66
- [10] Bernal, O., MacLaughlin, D., Lukefahr, H., and Andraka, B. (1995). Copper nmr and thermodynamics of ucu 5- x pd x: evidence for kondo disorder. *Physical review letters*, 75(10):2023. 21
- [11] Bianchi, A., Movshovich, R., Vekhter, I., Pagliuso, P., and Sarrao, J. (2003). Avoided antiferromagnetic order and quantum critical point in c e c o i n 5. *Physical review letters*, 91(25):257001. 23
- [12] Biggs, B., Li, Y., and Poon, S. (1991). Electronic properties of icosahedral, approximant, and amorphous phases of an al-cu-fe alloy. *Physical Review B*, 43(10):8747. 60

## BIBLIOGRAFÍA

---

- [13] Bobnar, M., Vrtnik, S., Jagličić, Z., Wencka, M., Cui, C., Tsai, A. P., and Dolinšek, J. (2011). Electrical, magnetic, and thermal properties of the single-grain  $\text{Ag}_{42}\text{Yb}_{16}$  icosahedral quasicrystal: Experiment and modeling. *Physical Review B*, 84(13):134205. [60](#)
- [14] Brenig, W. (2006). Finite-temperature properties of the two-dimensional  $\text{SU}(2)$  kondo necklace. *Physical Review B*, 73(10):104450. [6](#)
- [15] Breuer, K., Messerli, S., Purdie, D., Garnier, M., Hengsberger, M., Panaccione, G., Baer, Y., Takahashi, T., Yoshii, S., Kasaya, M., et al. (1998). Photoemission study of the kondo insulator  $\text{Ce}_3\text{Bi}_4\text{Pt}_3$ . *EPL (Europhysics Letters)*, 41(5):565. [23](#), [24](#), [29](#)
- [16] Broyden, C. G. (1967). Quasi-newton methods and their application to function minimisation. *Mathematics of Computation*, 21(99):368–381. [48](#)
- [17] Bulla, R., Costi, T. A., and Pruschke, T. (2008). Numerical renormalization group method for quantum impurity systems. *Reviews of Modern Physics*, 80(2):395. [66](#)
- [18] Capponi, S. and Assaad, F. (2001). Spin and charge dynamics of the ferromagnetic and antiferromagnetic two-dimensional half-filled kondo lattice model. *Physical Review B*, 63(15):155114. [36](#)
- [19] Chakravarty, S., Halperin, B. I., and Nelson, D. R. (1988). Low-temperature behavior of two-dimensional quantum antiferromagnets. *Physical review letters*, 60(11):1057. [17](#)
- [20] Chakravarty, S., Halperin, B. I., and Nelson, D. R. (1989). Two-dimensional quantum heisenberg antiferromagnet at low temperatures. *Physical Review B*, 39(4):2344. [17](#)
- [21] Coleman, P. (2015). *Introduction to many-body physics*. Cambridge University Press. [3](#), [19](#), [23](#), [33](#)
- [22] Continentino, M. (1991). Scaling in heavy fermions: the case of  $\text{CeRu}_2\text{Si}_2$ . *Journal de Physique I*, 1(5):693–701. [21](#)
- [23] Continentino, M. (2017). *Quantum scaling in many-body systems*. Cambridge University Press. [4](#), [15](#), [16](#), [38](#), [55](#), [56](#), [60](#), [61](#), [62](#), [63](#), [66](#)
- [24] Continentino, M. A. (1993). Universal behavior in heavy fermions. *Physical Review B*, 47(17):11587. [21](#), [22](#)
- [25] Continentino, M. A., Japiassu, G. M., and Troper, A. (1989). Critical approach to the coherence transition in kondo lattices. *Physical Review B*, 39(13):9734. [20](#), [21](#), [32](#)
- [26] Corak, W. and Satterthwaite, C. (1956). Atomic heats of normal and superconducting tin between 1.2 and 4.5 k. *Physical Review*, 102(3):662. [14](#)

- 
- [27] Cornelius, A. and Schilling, J. (1994). High-pressure study of the anomalous ferromagnet cerh 3 b 2 to 7 gpa: Comparison with substitutional experiments. *Physical Review B*, 49(6):3955. 38
- [28] Cox, D. (1987). Quadrupolar kondo effect in uranium heavy-electron materials? *Physical review letters*, 59(11):1240. 21
- [29] Cox, D. and Zawadowski, A. (1998). Exotic kondo effects in metals: magnetic ions in a crystalline electric field and tunnelling centres. *Advances in Physics*, 47(5):599–942. 21
- [30] Custers, J., Gegenwart, P., Wilhelm, H., Neumaier, K., Tokiwa, Y., Trovarelli, O., Geibel, C., Steglich, F., Pépin, C., and Coleman, P. (2003). The break-up of heavy electrons at a quantum critical point. *Nature*, 424(6948):524–527. 22
- [31] Dagotto, E., Yunoki, S., Malvezzi, A., Moreo, A., Hu, J., Capponi, S., Poilblanc, D., and Furukawa, N. (1998). Ferromagnetic kondo model for manganites: Phase diagram, charge segregation, and influence of quantum localized spins. *Physical Review B*, 58(10):6414. 35
- [32] de Oliveira, N. A., Costa, M. V. T., Troper, A., Japiassú, G. M., and Continentino, M. A. (1999). Magnetic-field-driven metal-insulator transition in kondo insulators. *Physical Review B*, 60(3):1444. 25
- [33] Deguchi, K., Matsukawa, S., Sato, N. K., Hattori, T., Ishida, K., Takakura, H., and Ishimasa, T. (2012). Quantum critical state in a magnetic quasicrystal. *Nature materials*, 11(12):1013. 5, 25, 26, 60
- [34] DiTusa, J., Friemelt, K., Bucher, E., Aeppli, G., and Ramirez, A. (1997). Metal-insulator transitions in the kondo insulator fesi and classic semiconductors are similar. *Physical review letters*, 78(14):2831. 24
- [35] Doniach, S. (1977). The kondo lattice and weak antiferromagnetism. *Physica B+C*, 91:231–234. 5, 25, 32, 34, 36, 38
- [36] Doniach, S. and Fazekas, P. (1992). Magnetism in doped kondo insulators. *Philosophical Magazine B*, 65(6):1171–1183. 30
- [37] Fazekas, P. and Kee, H.-Y. (1992). Underscreened kondo necklace. *Modern Physics Letters B*, 6(26):1681–1690. 37
- [38] Fazekas, P. and Kee, H.-Y. (1993). Multichannel kondo necklace. *Physical Review B*, 48(10):7274. 37
- [39] Fisk, Z., Ott, H., Rice, T., and Smith, J. (1986). Heavy-electron metals. *Nature*, 320(6058):124. 29
- [40] Fisk, Z., Sarrao, J., Cooper, S., Nyhus, P., Boebinger, G., Passner, A., and Canfield, P. (1996). Kondo insulators. *Physica B: Condensed Matter*, 223:409–412. 30

## BIBLIOGRAFÍA

---

- [41] Foss-Feig, M., Hermele, M., Gurarie, V., and Rey, A. M. (2010). Heavy fermions in an optical lattice. *Physical Review A*, 82(5):053624. [35](#)
- [42] Gegenwart, P., Langhammer, C., Helfrich, R., Oeschler, N., Lang, M., Kim, J., Stewart, G., and Steglich, F. (2004). Non-fermi liquid normal state of the heavy-fermion superconductor  $\text{UBe}_{13}$ . *Physica C: Superconductivity*, 408:157–160. [23](#)
- [43] Godart, C., Gupta, L., Tomy, C., Thompson, J., and Vijayaraghavan, R. (1989). Competition of kondo spin fluctuations and rky interactions in  $\text{CeRh}_2\text{Si}_2$ -xgex and  $\text{CeM}_2\text{X}_2$  compounds: a kondo necklace problem. *EPL (Europhysics Letters)*, 8(4):375. [38](#)
- [44] Gopalan, S., Rice, T., and Sigrist, M. (1994). Spin ladders with spin gaps: A description of a class of cuprates. *Physical Review B*, 49(13):8901. [45](#)
- [45] Hashimoto, K., Cho, K., Shibauchi, T., Kasahara, S., Mizukami, Y., Katsumata, R., Tsuruhara, Y., Terashima, T., Ikeda, H., Tanatar, M., et al. (2012). A sharp peak of the zero-temperature penetration depth at optimal composition in  $\text{BaFe}_2(\text{As}_{1-x}\text{P}_x)_2$ . *Science*, 336(6088):1554–1557. [23](#)
- [46] Haule, K., Bonča, J., and Prelovšek, P. (2000). Finite-temperature properties of the two-dimensional kondo lattice model. *Physical Review B*, 61(4):2482. [64](#)
- [47] Hertz, J. A. (1976). Quantum critical phenomena. *Physical Review B*, 14(3):1165. [4](#), [15](#), [22](#)
- [48] Hewson, A. C. (1997). *The Kondo problem to heavy fermions*, volume 2. Cambridge university press. [34](#)
- [49] Hida, K. (2004a). New universality class in spin-one-half fibonacci heisenberg chains. *Physical review letters*, 93(3):037205. [5](#)
- [50] Hida, K. (2004b). Real space renormalization group study of the  $s = 1/2$  xxz chains with fibonacci exchange modulation. *Journal of the Physical Society of Japan*, 73(8):2296–2304. [5](#)
- [51] Hundley, M., Canfield, P., Thompson, J., Fisk, Z., and Lawrence, J. (1990). Hybridization gap in  $\text{Ce}_3\text{Bi}_4\text{Pt}_3$ . *Physical Review B*, 42(10):6842. [24](#), [29](#)
- [52] Jaccard, D., Behnia, K., and Sierro, J. (1992). Pressure induced heavy fermion superconductivity of  $\text{CeCu}_2\text{Ge}_2$ . *Physics Letters A*, 163(5-6):475–480. [23](#)
- [53] Jaeger, G. (1998). The ehrenfest classification of phase transitions: introduction and evolution. *Archive for history of exact sciences*, 53(1):51–81. [4](#)
- [54] Jagannathan, A. (2005). Ground state of a two-dimensional quasiperiodic quantum antiferromagnet. *Physical Review B*, 71(11):115101. [5](#)
- [55] Jagannathan, A., Szallás, A., Wessel, S., and Duneau, M. (2007). Penrose quantum antiferromagnet. *Physical Review B*, 75(21):212407. [5](#)

- 
- [56] Janot, C. (1994). *Quasicrystals: A primer Second Edition*. Oxford Science Publication, Oxford. 5, 25, 42
- [57] Janssen, T., Chapuis, G., and De Boissieu, M. (2018). *Aperiodic Crystals: From Modulated Phases to Quasicrystals: Structure and Properties*. Oxford University Press. 5, 25, 42
- [58] Jesche, A., Caroca-Canales, N., Rosner, H., Borrmann, H., Ormeci, A., Kasinathan, D., Klauss, H., Luetkens, H., Khasanov, R., Amato, A., et al. (2008). Strong coupling between magnetic and structural order parameters in srfe 2 as 2. *Physical Review B*, 78(18):180504. 13
- [59] Jullien, R., Fields, J., and Doniach, S. (1977). Zero-temperature real-space renormalization-group method for a kondo-lattice model hamiltonian. *Physical Review B*, 16(11):4889. 5
- [60] Jurecka, C. and Brenig, W. (2001). Bond-operator mean-field theory of the half-filled kondo lattice model. *Physical Review B*, 64(9):092406. 36, 43
- [61] Kadanoff, L. P., Götze, W., Hamblen, D., Hecht, R., Lewis, E., Palciauskas, V. V., Rayl, M., Swift, J., Aspnes, D., and Kane, J. (1967). Static phenomena near critical points: theory and experiment. *Reviews of Modern Physics*, 39(2):395. 17
- [62] Kasuya, T. (1956). A theory of metallic ferro-and antiferromagnetism on zener's model. *Progress of theoretical physics*, 16(1):45–57. 21, 31
- [63] Kehrein, S. K. and Mielke, A. (1996). Theory of the anderson impurity model: The schrieffer–wolff transformation reexamined. *annals of physics*, 252(1):1–32. 34
- [64] Kiselev, M., Aristov, D., and Kikoin, K. (2005). Spin gap in chains with hidden symmetries. *Physical Review B*, 71(9):092404. 38
- [65] Kondo, J. (1964). Resistance minimum in dilute magnetic alloys. *Progress of theoretical physics*, 32(1):37–49. 21, 29
- [66] Kondo, J. (1969). J. kondo, solid state phys. 23, 183 (1969). *Solid State Phys.*, 23:183. 21, 31
- [67] Kotov, V., Sushkov, O., Weihong, Z., and Oitmaa, J. (1998). Novel approach to description of spin-liquid phases in low-dimensional quantum antiferromagnets. *Physical review letters*, 80(26):5790. 38
- [68] Krishna-Murthy, H., Wilkins, J., and Wilson, K. (1980). Renormalization-group approach to the anderson model of dilute magnetic alloys. i. static properties for the symmetric case. *Physical Review B*, 21(3):1003. 34
- [69] Lacroix, C. (1982). Density of states for the asymmetric anderson model. *Journal of Applied Physics*, 53(3):2131–2133. 30

## BIBLIOGRAFÍA

---

- [70] Landau, L., Lifšic, E., Lifshitz, E., Pitaevskii, L., Sykes, J., and Kearsley, M. (1980). *Statistical Physics: Theory of the Condensed State*. Course of theoretical physics. Elsevier Science. 3, 4, 21, 23
- [71] Langari, A. and Thalmeier, P. (2006). Antiferromagnetic and spin-gap phases of the anisotropic kondo necklace model. *Physical Review B*, 74(2):024431. 6, 38, 45, 65
- [72] Lavagna, M., Lacroix, C., and Cyrot, M. (1982). Volume collapse in the kondo lattice. *Physics Letters A*, 90(4):210–212. 33
- [73] Lavagna, M., Lacroix, C., and Cyrot, M. (1983). The  $\gamma$ - $\alpha$  transition in cerium compounds. *Journal of Physics F: Metal Physics*, 13(5):1007. 33
- [74] Líbero, V. L. and Cox, D. (1993). Simple model for coupled magnetic and quadrupolar instabilities in uranium heavy-fermion materials. *Physical Review B*, 48(6):3783. 38
- [75] López, D. L. R. (2009). Comportamiento crítico cuántico del modelo collar de kondo aperiódico. Master's thesis, UNIVERSIDAD NACIONAL MAYOR DE SAN MARCOS. 6, 18, 38, 67, 68
- [76] Mathur, N., Grosche, F., Julian, S., Walker, I., Freye, D., Haselwimmer, R., and Lonzarich, G. (1998). Magnetically mediated superconductivity in heavy fermion compounds. *Nature*, 394(6688):39. 23
- [77] Matsuda, F., Tezuka, M., and Kawakami, N. (2015). Correlation effects in one-dimensional quasiperiodic anderson-lattice model. *Physics Procedia*, 75:245–251. 25
- [78] Matsukawa, S., Tanaka, K., Nakayama, M., Kunikata, S., Deguchi, K., Imura, K., Ishimasa, T., and Sato, N. (2014). Transport properties of the au-al-yb quasicrystal and approximant under hydrostatic pressure. *Acta Physica Polonica A*, 126(2):527–530. 5, 60
- [79] Matsushita, Y., P. Gelfand, M., and Ishii, C. (1997). Phase transitions in bilayer heisenberg model with general couplings. *Journal of the Physical Society of Japan*, 66(11):3648–3654. 38
- [80] Mermin, N. D. and Wagner, H. (1966). Absence of ferromagnetism or antiferromagnetism in one-or two-dimensional isotropic heisenberg models. *Physical Review Letters*, 17(22):1133. 17, 57, 58, 65
- [81] Miranda, E. and Dobrosavljević, V. (2001). Localization-induced griffiths phase of disordered anderson lattices. *Physical review letters*, 86(2):264. 21
- [82] Miranda, E., Dobrosavljevic, V., and Kotliar, G. (1996). Kondo disorder: a possible route towards non-fermi-liquid behaviour. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 8(48):9871. 21
- [83] Miranda, E., Dobrosavljević, V., and Kotliar, G. (1997). Disorder-driven non-fermi-liquid behavior in kondo alloys. *Physical review letters*, 78(2):290. 21

- 
- [84] Moukouri, S., Caron, L., Bourbonnais, C., and Hubert, L. (1995). Real-space density-matrix renormalization-group study of the kondo necklace. *Physical Review B*, 51(22):15920. 38
- [85] Nemkovski, K., Alekseev, P., Mignot, J.-M., Rybina, A., Iga, F., Takabatake, T., Shitsevalova, N. Y., Paderno, Y. B., Lazukov, V., Nefedova, E., et al. (2006). Lattice dynamics in the kondo insulator ybb12. *Journal of Solid State Chemistry*, 179(9):2895–2899. 24
- [86] Neto, A. C., Castilla, G., and Jones, B. (1998). Non-fermi liquid behavior and griffiths phase in f-electron compounds. *Physical review letters*, 81(16):3531. 21
- [87] Nogueira, F. S. and Bennemann, K.-H. (2004). Spin josephson effect in ferromagnet/ferromagnet tunnel junctions. *EPL (Europhysics Letters)*, 67(4):620. 4
- [88] Normand, B. and Rice, T. (1996). Electronic and magnetic structure of lacuo 2.5. *Physical Review B*, 54(10):7180. 45
- [89] Nozieres, P. and Blandin, A. (1980). Kondo effect in real metals. *Journal de Physique*, 41(3):193–211. 21
- [90] Otsuka, H. and Nishino, T. (1995). Gap-formation mechanism of the kondo-necklace model. *Physical Review B*, 52(21):15066. 38
- [91] Ott, H., Rudigier, H., Fisk, Z., and Smith, J. (1983). U be 13: An unconventional actinide superconductor. *Physical review letters*, 50(20):1595. 23
- [92] Paglione, J., Tanatar, M., Hawthorn, D., Boaknin, E., Hill, R., Ronning, F., Sutherland, M., Taillefer, L., Petrovic, C., and Canfield, P. (2003). Field-induced quantum critical point in c e c o i n 5. *Physical Review Letters*, 91(24):246405. 23
- [93] Park, T., Ronning, F., Yuan, H., Salamon, M., Movshovich, R., Sarrao, J., and Thompson, J. (2006). Hidden magnetism and quantum criticality in the heavy fermion superconductor cerhin 5. *Nature*, 440(7080):65. 23
- [94] Pope, A., Tritt, T., Gagnon, R., and Strom-Olsen, J. (2001). Electronic transport in cd-yb and y-mg-zn quasicrystals. *Applied Physics Letters*, 79(15):2345–2347. 60
- [95] Press, W. H., Teukolsky, S. A., Vetterling, W. T., and Flannery, B. P. (1997). *FORTRAN numerical recipes*. Cambridge University Press. 48
- [96] R K Pathria, P. D. B. (2011). *Statistical Mechanics, Third Edition*. Academic Press, 3 edition. 46
- [97] Rappoport, T. G. and Continentino, M. (2001). Phase diagram of the kondo necklace: a mean-field renormalization group approach. *Journal of Physics A: Mathematical and General*, 34(49):10829. 37, 38
- [98] Raymond, S. and Jaccard, D. (2000). Electronic properties of cepd 2 si 2 under pressure. *Physical Review B*, 61(13):8679. 23
-

## BIBLIOGRAFÍA

---

- [99] Reyes, D. and Continentino, M. (2007a). Dimensional crossover in anisotropic kondo lattices. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 19(40):406203. 6
- [100] Reyes, D. and Continentino, M. (2008). Crossover from 2d to 3d in anisotropic kondo lattices. *Physica B: Condensed Matter*, 403(5-9):829–830. 6, 25
- [101] Reyes, D., Continentino, M., and Wang, H.-T. (2009). Thermodynamic quantum critical behavior of the anisotropic kondo necklace model. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, 321(5):348–353. 6
- [102] Reyes, D. and Continentino, M. A. (2007b). Thermodynamic quantum critical behavior of the kondo necklace model. *Physical Review B*, 76(7):075114. 6, 45, 46, 48, 53, 55, 56, 61, 63, 65, 66, 68
- [103] Reyes, D., Continentino, M. A., Thomas, C., and Lacroix, C. (2016). s-and d-wave superconductivity in a two-band model. *Annals of Physics*, 373:257–272. 45
- [104] Reyes, D. and Landauro, C. (2010). Quantum critical behavior of the kondo necklace model with aperiodic exchange modulation. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, 322(21):3298–3302. 5, 6, 46, 48, 54, 55, 65
- [105] Reyes, D., Tarazona, H., Cuba-Supanta, G., Landauro, C., Espinoza, R., and Quispe-Marcotoma, J. (2017). Kondo necklace model in approximants of fibonacci chains. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, 441:85–87. 5
- [106] Reyes, D., Troper, A., Saguia, A., and Continentino, M. (2005). Phase diagram of the kondo necklace model at finite temperatures. *Physica B: Condensed Matter*, 359:714–716. 46
- [107] Rezanía, H., Langari, A., and Thalmeier, P. (2009). Green’s function approach to the thermodynamic properties of the anisotropic kondo necklace model. *Physical Review B*, 79(9):094401. 6, 60, 61, 64, 66
- [108] Riseborough, P. S. (1992). Theory of the dynamic magnetic response of ce 3 bi 4 pt 3: A heavy-fermion semiconductor. *Physical Review B*, 45(24):13984. 33, 34
- [109] Riseborough, P. S. (2000). Heavy fermion semiconductors. *Advances in Physics*, 49(3):257–320. 35
- [110] Ruderman, M. A. and Kittel, C. (1954). Indirect exchange coupling of nuclear magnetic moments by conduction electrons. *Physical Review*, 96(1):99. 21, 31
- [111] Sachdev, S. (2000). Quantum criticality: competing ground states in low dimensions. *Science*, 288(5465):475–480. 4
- [112] Sachdev, S. (2001). *Quantum Phase Transitions*. Cambridge University Press. 4
- [113] Sachdev, S. and Bhatt, R. N. (1990). Bond-operator representation of quantum spins: Mean-field theory of frustrated quantum heisenberg antiferromagnets. *Physical Review B*, 41(13):9323. 4, 67

- 
- [114] Saguia, A., Rappoport, T., Boechat, B., and Continentino, M. (2004). The anisotropic kondo necklace model. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, 344(3-4):644–648. 6
- [115] Saguia, A. and Sarandy, M. (2003). Entanglement in the one-dimensional kondo necklace model. *Physical Review A*, 67(1):012315. 6, 37
- [116] Saito, Y., Koga, A., and Kawakami, N. (2003). Hole-doping effects on a two-dimensional kondo insulator. *Journal of the Physical Society of Japan*, 72(5):1208–1215. 36
- [117] Sanchez-Castro, C., Bedell, K. S., and Cooper, B. R. (1993). Hybridization gap insulating behavior of ce 3 bi 4 pt 3. *Physical Review B*, 47(12):6879. 34
- [118] Sato, T., Assaad, F. F., and Grover, T. (2018). Quantum monte carlo simulation of frustrated kondo lattice models. *Physical review letters*, 120(10):107201. 66
- [119] Scalettar, R., Scalapino, D., and Sugar, R. (1985). Monte carlo simulation of the “kondo necklace”. *Physical Review B*, 31(11):7316. 5, 38
- [120] Schlabitz, W., Baumann, J., Pollit, B., Rauchschalbe, U., Mayer, H., Ahlheim, U., and Bredl, C. (1986). Superconductivity and magnetic order in a strongly interacting fermi-system: Uru 2 si 2. *Zeitschrift für Physik B Condensed Matter*, 62(2):171–177. 23
- [121] Schrieffer, J. R. and Wolff, P. A. (1966). Relation between the anderson and kondo hamiltonians. *Physical Review*, 149(2):491. 34, 35
- [122] Schröder, A., Aeppli, G., Coldea, R., Adams, M., Stockert, O., Löhneysen, H., Bucher, E., Ramazashvili, R., and Coleman, P. (2000). Onset of antiferromagnetism in heavy-fermion metals. *Nature*, 407(6802):351–355. 23, 24
- [123] Shaginyan, V., Msezane, A., Popov, K., Japaridze, G., and Khodel, V. (2013). Common quantum phase transition in quasicrystals and heavy-fermion metals. *Physical Review B*, 87(24):245122. 5, 25, 26, 60
- [124] Shechtman, D., Blech, I., Gratias, D., and Cahn, J. W. (1984). Metallic phase with long-range orientational order and no translational symmetry. *Physical review letters*, 53(20):1951. 5, 41
- [125] Singh, S., Capan, C., Nicklas, M., Rams, M., Gladun, A., Lee, H., DiTusa, J., Fisk, Z., Steglich, F., and Wirth, S. (2007). Probing the quantum critical behavior of cecoin 5 via hall effect measurements. *Physical review letters*, 98(5):057001. 23
- [126] Sinjukow, P. and Nolting, W. (2002). Exact mapping of periodic anderson model to kondo lattice model. *Physical Review B*, 65(21):212303. 35
- [127] Steglich, F., Aarts, J., Bredl, C., Lieke, W., Meschede, D., Franz, W., and Schäfer, H. (1979). Superconductivity in the presence of strong pauli paramagnetism: Ce cu 2 si 2. *Physical Review Letters*, 43(25):1892. 23

## BIBLIOGRAFÍA

---

- [128] Steglich, F., Geibel, C., Helfrich, R., Kromer, F., Lang, M., Sparn, G., Gegenwart, P., Donnevert, L., Langhammer, C., Link, A., et al. (1998). Ceu2si2 and ube13: New questions—old answers? *Journal of Physics and Chemistry of Solids*, 59(10-12):2190–2195. [20](#)
- [129] Steglich, F., Geibel, C., Modler, R., Lang, M., Hellmann, P., and Gegenwart, P. (1995). Classification of strongly correlated f-electron systems. *Journal of low temperature physics*, 99(3-4):267–281. [20](#)
- [130] Stewart, G. (2001). Non-fermi-liquid behavior in d-and f-electron metals. *Reviews of modern Physics*, 73(4):797. [20](#), [21](#), [22](#), [60](#)
- [131] Stewart, G. (2006). Addendum: Non-fermi-liquid behavior in d-and f-electron metals. *Reviews of Modern Physics*, 78(3):743. [21](#)
- [132] Stewart, G., Fisk, Z., Willis, J., and Smith, J. (1984). Possibility of coexistence of bulk superconductivity and spin fluctuations in upt3. *Physical Review Letters*, 52:679–682. [23](#)
- [133] Strong, S. and Millis, A. (1994). Competition between singlet formation and magnetic ordering in one-dimensional spin systems. *Physical Review B*, 50(14):9911. [38](#)
- [134] Süllow, S., Aronson, M., Rainford, B., and Haen, P. (1999). Doniach phase diagram, revisited: From ferromagnet to fermi liquid in pressurized ceru 2 ge 2. *Physical review letters*, 82(14):2963. [24](#)
- [135] Takemura, S., Takemori, N., and Koga, A. (2015). Valence fluctuations and electric reconstruction in the extended anderson model on the two-dimensional penrose lattice. *Physical Review B*, 91(16):165114. [25](#)
- [136] Townsend, P. and Sutton, J. (1962). Investigation by electron tunneling of the superconducting energy gaps in nb, ta, sn, and pb. *Physical Review*, 128(2):591. [14](#)
- [137] Tsunetsugu, H., Sigrist, M., and Ueda, K. (1997). The ground-state phase diagram of the one-dimensional kondo lattice model. *Reviews of Modern Physics*, 69(3):809. [36](#)
- [138] Tsvetlik, A. and Reizer, M. (1993). Phenomenological theory of non-fermi-liquid heavy-fermion alloys. *Physical Review B*, 48(13):9887. [21](#)
- [139] Tsvetlik, A. and Zaliznyak, I. (2016). Heisenberg necklace model in a magnetic field. *Physical Review B*, 94(7):075152. [6](#)
- [140] Vojta, M. (2003). Quantum phase transitions. *Reports on Progress in Physics*, 66(12):2069. [16](#)
- [141] von Löhneysen, H. (1996). Non-fermi-liquid behaviour in the heavy-fermion system. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 8(48):9689. [4](#)

- 
- [142] Watanabe, S. and Miyake, K. (2013). Robustness of quantum criticality of valence fluctuations. *Journal of the Physical Society of Japan*, 82(8):083704. 5, 60
- [143] Watanabe, S. and Miyake, K. (2015). Wide quantum critical region of valence fluctuations: Origin of robust quantum criticality in quasicrystal yb15al34au51 under pressure. *Journal of Physics: Conference Series*, 592. 25
- [144] Watanabe, S. and Miyake, K. (2016). Origin of quantum criticality in yb–al–au approximant crystal and quasicrystal. *Journal of the Physical Society of Japan*, 85(6):063703. 5, 25, 60
- [145] Watanuki, T., Kashimoto, S., Ishimasa, T., Machida, A., Yamamoto, S., Tanaka, Y., Mizumaki, M., Kawamura, N., and Watanabe, S. (2015). Thermal expansion of a au–al–yb intermediate valence quasicrystal. *Solid State Communications*, 211:19–22. 5, 25, 60
- [146] Watanuki, T., Kashimoto, S., Kawana, D., Yamazaki, T., Machida, A., Tanaka, Y., and Sato, T. J. (2012). Intermediate-valence icosahedral au–al–yb quasicrystal. *Physical Review B*, 86(9):094201. 5, 60
- [147] Wegner, F. (1994). Flow-equations for hamiltonians. *Annalen der physik*, 506(2):77–91. 34
- [148] Wessel, S. and Milat, I. (2005). Quantum fluctuations and excitations in antiferromagnetic quasicrystals. *Physical Review B*, 71(10):104427. 5
- [149] Wilson, K. G. (1975). The renormalization group: Critical phenomena and the kondo problem. *Reviews of modern physics*, 47(4):773. 20, 21, 31, 34
- [150] Wolgast, S., Kurdak, Ç., Sun, K., Allen, J., Kim, D.-J., and Fisk, Z. (2013). Low-temperature surface conduction in the kondo insulator smb 6. *Physical Review B*, 88(18):180405. 24
- [151] Yamamoto, T., Asano, M., and Ishii, C. (2001). Magnetization process of one-dimensional kondo necklace model with next-nearest-neighbor interaction. *Journal of the Physical Society of Japan*, 70(12):3678–3682. 38
- [152] Yamamoto, T., Ide, K., and Ishii, C. (2002). Phase diagram and critical properties of the frustrated kondo necklace model in a magnetic field. *Physical Review B*, 66(10):104408. 38
- [153] Yosida, K. (1957). Magnetic properties of cu–mn alloys. *Physical Review*, 106(5):893. 21, 31
- [154] Yuan, H., Grosche, F., Deppe, M., Geibel, C., Sparn, G., and Steglich, F. (2003). Observation of two distinct superconducting phases in cecu2si2. *Science*, 302(5653):2104–2107. 23
- [155] Zerec, I., Schmidt, B., and Thalmeier, P. (2006). Kondo lattice model studied with the finite temperature lanczos method. *Physical Review B*, 73(24):245108. 60
-

## BIBLIOGRAFÍA

---

- [156] Zhang, G.-M., Gu, Q., and Yu, L. (2000). Kondo spin liquid and magnetically long-range ordered states in the kondo necklace model. *Physical Review B*, 62(1):69. [47](#), [48](#), [55](#), [56](#), [65](#)
- [157] Zhang, G.-M. and Yu, L. (2000). Kondo singlet state coexisting with antiferromagnetic long-range order: A possible ground state for kondo insulators. *Physical Review B*, 62(1):76. [6](#), [38](#), [43](#)
- [158] Zheng, W. and Oitmaa, J. (2003). Zero-temperature series expansions for the kondo lattice model at half filling. *Physical Review B*, 67(21):214406. [36](#)
- [159] Zubarev, D. (1960). Double-time green functions in statistical physics. *Sov. Phys. Usp*, 3(3):320–345. [46](#), [71](#)