



上海交通大学学位论文

双通道近藤模型的密度矩阵重整化群计算研究

姓 名：宣嘉乐

学 号：520072910009

导 师：许霄琰

学 院：致远学院

专业名称：物理学(致远荣誉计划)

申请学位层次：学士

2024 年 6 月

A Dissertation Submitted to
Shanghai Jiao Tong University for Bachelor's Degree

RESEARCH ON DENSITY MATRIX
RENORMALIZATION GROUP CALCULATION OF
TWO-CHANNEL KONDO MODEL

Author: Xuan Jiale

Supervisor: Xu Xiaoyan

Zhiyuan College
Shanghai Jiao Tong University
Shanghai, P.R. China
June, 2024

摘 要

在过去的几十年中，密度矩阵重整化群（DMRG）方法被认为是研究强关联量子多体问题的强大工具，尤其善于处理一维问题。本论文将 DMRG 方法应用在双通道近藤模型的研究中，通过改变近藤相互作用的大小，论文探讨了多种情况下双通道近藤模型基态的量子纠缠特性，发现了强近藤相互作用极限下纠缠熵的渐进行为。在具体的计算中，论文考虑了多种晶格大小，不同的边界条件，比较了双通道近藤模型和单通道近藤模型的纠缠熵特性，并考虑了纠缠的分配问题。这些结果为后续研究多通道近藤模型中可能存在的新奇物态打下了基础。

关键词：双通道近藤模型，密度矩阵重整化群，纠缠

ABSTRACT

Over the past few decades, the density matrix renormalization group (DMRG) method has been regarded as a powerful tool for studying strongly correlated quantum many-body problems, especially for one-dimensional problems. This paper applies the DMRG method to the study of the two-channel Kondo model. By changing the size of the Kondo interaction, the paper explores the quantum entanglement characteristics of the ground state of the two-channel Kondo model under various circumstances, and discovers the entanglement entropy under the strong Kondo interaction limit. In the specific calculation, the paper considered a variety of lattice sizes and different boundary conditions, compared the entanglement entropy characteristics of the two-channel Kondo model and the single-channel Kondo model and considered the distribution of entanglement. These results lay the foundation for subsequent research on novel physical states that may exist in the multi-channel Kondo model.

Key words: two-channel kondo model, density matrix renormalization group, entanglement

上海交通大学

学位论文原创性声明

本人郑重声明：所呈交的学位论文，是本人在导师的指导下，独立进行研究工作所取得的成果。除文中已经注明引用的内容外，本论文不包含任何其他个人或集体已经发表或撰写过的作品成果。对本文的研究做出重要贡献的个人和集体，均已在文中以明确方式标明。本人完全知晓本声明的法律后果由本人承担。

学位论文作者签名：

宣嘉乐

日期：2024 年 5 月 17 日

上海交通大学

学位论文使用授权书

本人同意学校保留并向国家有关部门或机构送交论文的复印件和电子版，允许论文被查阅和借阅。

本学位论文属于：

☒ 公开论文

☐ 内部论文，保密 ☐ 1 年/☐ 2 年/☐ 3 年，过保密期后适用本授权书。

☐ 秘密论文，保密 ____ 年（不超过 10 年），过保密期后适用本授权书。

☐ 机密论文，保密 ____ 年（不超过 20 年），过保密期后适用本授权书。

（请在以上方框内选择打“√”）

学位论文作者签名：

宣嘉乐

指导教师签名：

许霄瑞

日期：2024 年 5 月 17 日

日期：2024 年 5 月 17 日

目 录

摘 要	I
ABSTRACT	II
第一章 绪论	1
1.1 引言	1
1.2 近藤模型概述	1
1.3 双通道近藤模型概述	3
1.4 本文的研究对象	5
1.4.1 负性 (Negativity) 以及 Alkurtass 等人 ^[8] 的研究	6
1.5 本文研究主要内容	8
1.6 本文研究意义	9
1.7 本章小结	9
第二章 密度矩阵重整化群算法	10
2.1 数值重整化群思想	10
2.2 密度矩阵重整化群思想	11
2.2.1 基本算法	11
2.2.2 施密特分解求解约化密度矩阵	13
2.2.3 纠缠熵保证算法可靠性	14
2.3 矩阵乘积态	16
2.3.1 矩阵乘积态构造	16
2.3.2 张量网络处理密度矩阵重整化群算法	18
2.4 Itensor 算法	21
2.4.1 环境设置	21
2.4.2 建立模型	21
2.5 本章小结	27
第三章 计算过程与计算结果	28

3.1 少量格点时的严格求解	28
3.2 建立模型的相关讨论	31
3.3 计算结果与分析.....	32
3.3.1 纠缠熵的渐进行为	33
3.3.2 系统尺寸	34
3.3.3 边界条件	35
3.3.4 纠缠的分配	37
3.4 本章小结	38
第四章 全文总结	39
4.1 主要结论	39
4.2 研究展望	39
参 考 文 献.....	40
附 录.....	41
附 录.....	48
致 谢.....	51

第一章 绪论

1.1 引言

对强关联电子体系的性质和行为的研究一直是凝聚态方向的重点。在这方面，近藤模型作为一种代表性的理论模型，被广泛应用于描述具有局域磁性杂质的金属中的电子行为。然而，传统的近藤模型主要基于单通道的描述，仅适用于部分具有局域磁性杂质的金属体系。近年来，研究人员逐渐对双通道近藤模型产生了广泛兴趣。与传统的单通道近藤模型不同，双通道近藤模型考虑了两种不同自旋电子与磁性杂质之间的相互作用。双通道近藤模型具有一系列非平凡的物理现象，如近藤效应的抑制、自旋极化和磁性相变等。我们可以通过分析双通道近藤模型中纠缠的性质，确定模型中发生的相变规律，从而能更好的理解局域磁性杂质体系中的电子行为。

在过去的几十年中，密度矩阵重整化群（DMRG）方法已被证明是研究强关联电子体系的强大工具。密度矩阵重整化群方法通过对希尔伯特空间进行合理的截断，有效地处理了强关联系统中指数级增长的自由度问题。密度矩阵重整化群方法非常适用于处理一维体系，它在一维自旋链和玻色-爱因斯坦凝聚等系统上运行出色。近年来，矩阵乘积态方法的快速发展大大简化了 DMRG 方法的具体技术实现。利用 DMRG 方法可以快速而简便的分析系统中纠缠的性质。

1.2 近藤模型概述

近藤问题自上世纪六十年代以来一直是物理学相关的研究热点。这一类的量子杂质模型指的是低维的量子点处的磁性杂质与高维的外界环境间的相互作用。在早期的研究中，为了研究局域磁矩的输运性质，包括电阻随温度的极小值点，Anderson 于 1963 年提出了他的杂质模型，1964 年 Kondo^[1]关注于单占据态的情况，他计算了电导对于交换散射能量的三阶作用，并发现了存在关于温度的对数项，这个过程在下文中会作为一个例子。电导零温时的发散可以解释电阻极小的现象，然而这似乎与实际物理相悖。Abrikosov 尝试采用微扰论的方法研究近藤问题，他发现了一个非零温的极值点，称为近藤温度，这揭示了某种相变的存在。在近藤温度以上，传统的微扰论可以适用，而在近藤温度以下，量子场论中重整化的思想与传统的微扰结合起来可以很好的解释这个问题。目前，人们对近藤问题的关注更加集中于一些实际情况，

对于更高自由度的晶格需要发展超越重整化群的方法，一些合金中也发现了相关类似的机制；此外，近年来量子拓扑材料的研究与近藤模型结合，并且在相变对称性破缺，拓扑超导体方面有更多的研究前景。

k 空间中近藤模型的哈密顿量是：

$$H = \sum_{k\sigma} \epsilon_k c_{k\sigma}^\dagger c_{k\sigma} - J \sum_{k\sigma} \mathbf{S} \cdot \mathbf{s}_k \quad (1-1)$$

下面我介绍几个近藤单态的主要物理效应，这可以帮助理解下文对于极限情况下得到近藤单态的理解^[2]：

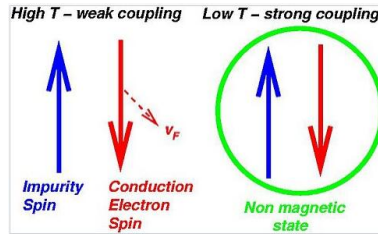


图 1-1 ^[2]近藤单态图示

如图 (1-1) 所示，在较高温情况下，传导电子仅在杂质附近出现轻微的反铁磁效应。相比之下，当温度趋近于零时，杂质磁矩和一个传导电子磁矩会强烈地结合在一起，形成一个整体上非磁性的状态，如果考虑电阻的话，电阻不会随着温度下降而趋于零，而是会出现一个反常的上升。这是因为，磁性杂质的散射 (scattering off magnetic impurities) 对低温电阻率有一个反常的影响，它会导致电阻率随着温度降低而增大。与此同时，存在近藤共振效应，体现为低温时电导率会存在若干周期性尖锐的峰值。为了计算电导率需要运用费米黄金规则计算态之间的跃迁，需要将近藤哈密顿量展开为更复杂的部分，其中导致近藤效应的是哈密顿量的二阶部分：

$$H_S^{(2)} = \sum_{\alpha, \beta=L,R} \sum_{\nu_\alpha \nu_\beta} J_{\alpha\beta} \mathbf{S}_d \cdot \mathbf{S}_{\nu_\alpha, \nu_\beta} + \sum_{\alpha, \beta=L,R} \sum_{\nu_\alpha \nu_\beta \sigma} W_{\alpha\beta} c_{\nu_\alpha \sigma}^\dagger c_{\nu_\beta \sigma} \quad (1-2)$$

$$\mathbf{S}_d = \frac{1}{2} \sum_{\sigma \sigma'} c_{d\sigma}^\dagger \boldsymbol{\tau}_{\sigma \sigma'} c_{d\sigma'}, \mathbf{S}_{\nu_\alpha, \nu_\beta} = \frac{1}{2} \sum_{\sigma_1 \sigma'_1} c_{\nu_\alpha, \sigma_1}^\dagger \boldsymbol{\tau}_{\sigma_1 \sigma'_1} c_{\nu_\beta \sigma'_1}$$

其中， α, β 为传导电子的状态， $\boldsymbol{\tau}$ 为泡利矩阵， d 代表了杂质自旋。 J 项代表了交换散射能量，观察哈密顿量发现 α 态传递到 β 态，经由局域自旋上的一个虚状态，通过反转局域自旋方向来传递电子，是近藤相互作用的关键； W 项对应着势能散射

能量，观察哈密顿量发现 α 态传递到 β 态，局域自旋并没有发生反转，电子只是经由局域自旋的势场进行传递。

计算电导率的方法是利用费米黄金规则：

$$\Gamma_{fi} = 2\pi |\langle f|T|i \rangle|^2 \delta(E_f - E_i) \quad (1-3)$$

$$T = H_S^{(2)} + H_S^{(2)} \frac{1}{E_i - (H_D + H_{LR}) + i\eta} T. \quad (1-4)$$

其中 Γ_{fi} 代表了系统从 f 态到 i 态跃迁的跃迁振幅。通过对 f 态以及对 i 态求和，可以得到系统自左向右跃迁的跃迁概率以及系统自右向左跃迁的跃迁概率，如果左右化学势的差非零的话，两跃迁概率之差也非零，净跃迁概率对于态密度求积分就是单位时间有多少个电子发生净流动，就得到了电导，从而得到电阻与温度的关系。(1-4) 式是跃迁矩阵 T 与哈密顿量的联系，其中包括了初态 i 的能量 E_i ，局域自旋与跃迁对应的哈密顿量，可以看到 (1-4) 可以按照 $H_S^{(2)}$ 进行分阶，比如一阶的 T 就是 $H_S^{(2)}$ 。一般的系统计算到跃迁矩阵的两阶就可以看到电导的奇异行为，对于近藤效应需要取到跃迁矩阵的三阶才能看到电导的奇异行为，最终求得：

$$G = \frac{3\pi^2 e^2}{2h} g_{LR}^2 (1 + 4g f(D/T)) \quad (1-5)$$

$$f(x) = \ln(x) + 0.568 \dots \approx \ln(x) \text{ for } x \ll 1$$

其中 $g_{LR}^2 = J_{LL} J_{RR} d_0^2$ 以及 $g = (J_{LL} + J_{RR}) d_0 / 2$ ， $J_{LL} J_{RR}$ 为近藤哈密顿量的参数 J ， d_0 是选取截断 D 之后假定的几乎不变的态密度。可以看到电导是温度的函数，当电导中的第二项与第一项可比时，得到了近藤转变温度，即：

$$T_K = D \exp(-1/4g) = \exp\left(-\frac{1}{2(J_{LL} + J_{RR}) d_0}\right) \quad (1-6)$$

在近藤温度以下，根据 (1-6) 式，电子电导做微扰的结果随温度对数发散，难以再求出电导的值，所以发展了重整化的思想与传统的微扰结合的方法来处理近藤模型难以微扰展开的问题，至今相关领域仍有广阔的研究前景。

1.3 双通道近藤模型概述

实空间中双通道近藤模型的哈密顿量如下：

$$H = -t \sum_{i(chain1, chain2)\sigma} (c_{i\sigma}^+ c_{i+1\sigma} + h.c) + J \sum_{i(chain1, chain2)} \mathbf{S} \cdot \mathbf{s}_i \quad (1-7)$$

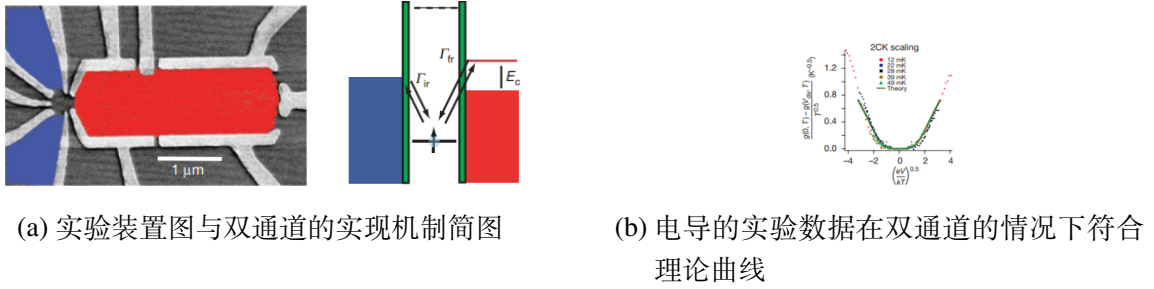
其中包括电子的跃迁相互作用部分，对应参数为 $-t$ ，以及近藤相互作用部分，对应参数为 J 。模型中选取一个局域自旋 S 与两条传导电子链 s_i 发生近藤相互作用。我的假设是对于不同的 J/t 参数系统会发生相变，从电子跃迁相互作用到近藤相互作用为主导从而形成近藤单态，系统在何时如何发生相变是尚不清楚的。

在二十世纪九十年代，人们开始研究双通道的近藤问题。1991 年，Affleck 和 Ludwig 的文章^[3] 提出即使是在零温下，该模型也会存在一个有限的熵，对应于额外的自由度。事实上，零温时的熵取决于基态简并度，在周期边界条件下对应了整数的量子数，简并能级在零温时归于基态；而作者推导出在双通道的情况下，当一维链无穷长时，会出现非整数的量子数，只有有限数量的边界条件组合对应于自由费米子，也就是经典情况，并且总简并度需要将两通道对应的边界条件相乘，在零温时的熵为 $1/2 \ln 2$ 。此外，如果某通道与磁性杂质的耦合强于另一通道时，它会表现出单通道的近藤效应。

1992 年，Emery 和 Kivelson^[4] 进一步的解释了这种奇异的双通道性质。一般我们求解的是正实轴上的传导电子，现在双通道是等价的看作是全实轴上的单项传导电子。作者关注于杂质散射的哈密顿量，应用玻色化处理哈密顿量，发现在反铁磁的情况下与传导电子耦合的不再是单一的杂质算符，而是产生与湮灭算符之和，这也正是马约拉纳算符的定义。因此我们可以看作是只有一半的杂质与传导电子发生了耦合，也就是量子点上确定的杂质自旋如何去应对双向传导电子的机制。两人的工作成功的在杂质量子点上找到了马约拉纳结构，说明了连续极限下对于确定的杂质交换散射振幅，各向异性的双通道近藤模型是可解的，这也为之后的工作做了理论铺垫。

双通道的近藤模型并不仅仅存在于理论与模拟中，它的存在以及物理性质已经被实验所证实。Potok, Rau^[5] 等在半导体框架中构建了强关联体系中的量子点。实验的难点在于必须使两个通道独立的与量子点交换自旋，而不能先对左向交换自旋后再对右向做出交换，那样的话就是单通道的量子隧穿情况了。解决的方法是利用近藤模型中的库仑屏蔽效应，即在低温下能量不允许从某一个通道中增减电子。

图 (1-2) 左边的尖端量子点包含有杂质电子，蓝色区域代表了无限通道，红色区域代表了有限通道，红色区域温度略高于 12mK，库仑屏蔽效应明显。如前所述，当交换散射势能某一通道占优时，体系是单通道情况；而实验中可以在 GaAs/AlGaAs 异质结中，对于低密度的电子气，严格调整相等，达到双通道情况。

图 1-2 ^[5]双通道近藤模型的实验实现

上文的叙述说明了双通道近藤模型可能寄寓的丰富物理图像。然而，当考虑实际的一维链时，多个量子点杂质之间的相互作用，诸如 RKKY 自旋-轨道耦合机制，可能破坏原有的马约拉纳结构。RKKY 自旋耦合机制指的是金属中的巡游电子传递与局域磁矩间的相互作用，是一种长程的震荡衰减的相互作用。通常稀土元素 f 轨道电子呈现较强的局域性，而其它轨道含有较多的巡游电子。巡游电子与一侧的局域磁矩交换散射并将结果以同样的方式传导至另一侧的磁矩上，体现为两局域磁矩间的作用，并以磁化率为表征。1986 年，Grünberg, Schreiber 等^[6]实验上观测到了 RKKY 机制。他们测试了不同厚度的不同材料三层结构，并最终发现在两层铁间嵌入一层铬出现的反铁磁效应。。

1.4 本文的研究对象

本文的研究对象主要是双通道近藤模型体系中的纠缠，比如说纠缠熵的性质。在强关联体系中，纠缠的出现和消失可以用作检测和描述量子相变的指标，通过研究纠缠的性质，我们可以深入理解量子相变的本质和机制。在本文的研究内容之外，在拓扑相态中也存在着特殊类型的纠缠，称为拓扑纠缠。拓扑纠缠在描述和分类拓扑相态中起着关键作用，例如拓扑绝缘体和拓扑超导体等。有不同的物理量可以描述系统的纠缠，比如纠缠熵、互信息、负性 (Negativity) 等等。

在杂质体系中对纠缠有着广泛的研究。2009 年，Affleck 等人^[7]计算了数个量子杂质体系以及具有边界系统的纠缠性质。该文章利用共形场论 (CFT) 的结论，处理几个典型的量子杂质体系比如自旋玻色子体系以及近藤杂质体系，并且考虑了维度对于纠缠的影响。文章还提出了在具有混合边界条件的系统中纠缠的新结果，讨论了使用费米液体理论获得的纠缠熵的解析结果，并介绍了几种杂质对纠缠熵贡献的最新定义。随后，Bedoor Alkurtass 等人^[8]同样应用共形场论方法，讨论双通道模型纠缠

熵，负性等物理量的性质。首先，该文章确认了 Affleck 和 Ludwig 文章^[3]的结论，即零温时会存在一个额外的熵为 $1/2 \ln 2$ ，代表了系统的额外简并。接着，通过对负性的讨论，该文章确认了在双通道近藤模型中杂质自旋与一条链之间的纠缠可以作为序参量，反映双通道近藤模型中的相变。

受到 Alkurtass 等人^[8]文章的启发，我准备计算双通道近藤模型中纠缠的性质。该文章利用的是共形场论的解析结果推导至双通道近藤模型纠缠上的形式。模拟的是纠缠熵与系统尺寸的关系。即选取包含局域自旋在内的系统中间几个格点作为子系统，以计算纠缠熵。该文章对纠缠熵的计算是通过改变子系统的大小，从仅仅包含局域自旋到整个双通道近藤模型，计算两个子系统之间的纠缠随着子系统尺寸的变化，这反映的是纠缠熵的结构。该文章还通过设置两条链之间不同的近藤相互作用强度来研究负性的影响。我将通过改变 J/t 的值，观察纠缠熵的变化，这可以判断相变的性质从而帮助掌握双通道近藤模型更多的物理。当然，从 Alkurtass 等人^[8]文章共形场论的结论出发，要想最准确的反映相变性质物理量是负性。纠缠熵可以反映局域自旋和一条链的子系统与另一条链之间的纠缠，而最精确的是计算该局域自旋与其中一条链的纠缠，它反映的是纠缠在两条链上面的分配问题。我可以假设对于电子跃迁相互作用主导的相局域自旋与传导电子之间的纠缠会在两条链之间平均分配，而在近藤相互作用主导的情况下系统趋向于形成近藤单态，从而使得纠缠大部分被分配到其中一条链上，从而负性可以作为序参量描述双通道近藤模型中的相变。而如果考虑纠缠上的话无法把自旋和一条链的子系统的一条链作为环境求偏迹求去，因为无法对三个子系统求约化密度矩阵。在本科阶段，我将主要讨论纠缠熵的性质，我希望在今后的研究中探讨负性的性质。

1.4.1 负性 (Negativity) 以及 Alkurtass 等人^[8]的研究

负性^{[9][10]}(Negativity) 是一个表征系统纠缠的物理量。如果分析纯态的纠缠的话，纠缠熵确实是一个合适的指标，而对于混合态纠缠的分析尚存在困难，就是因为纠缠中包含着经典与量子的部分。比如考虑一个传统的 Bell 态，可以说把这个态分为两个系统，考虑该两系统中的纠缠就可以了。但是也存在另一些量子态，比如 Greenberger-Horne-Zeilinger 态 (GHZ)，三个粒子时的形式为：

$$|\text{GHZ}\rangle = \frac{|000\rangle + |111\rangle}{\sqrt{2}} \quad (1-8)$$

有如下性质：

$$\text{Tr}_3 \left[\left(\frac{|000\rangle + |111\rangle}{\sqrt{2}} \right) \left(\frac{\langle 000| + \langle 111|}{\sqrt{2}} \right) \right] = \frac{(|00\rangle\langle 00| + |11\rangle\langle 11|)}{2} \quad (1-9)$$

在任意两个粒子之间不存在二粒子纠缠，即任意两个粒子的约化密度矩阵都是可分离的。但是三个粒子的全局纠缠度达到最大，即它们之间存在强烈的三粒子纠缠。可见系统中存在着经典与量子纠缠，难以拆分。在我所研究的双通道近藤模型中也存在着三部分共同纠缠的情况，对应着第一条传导电子链，局域自旋以及第二条传导电子链，此时仅仅考虑纠缠熵只能得到部分的纠缠物理。

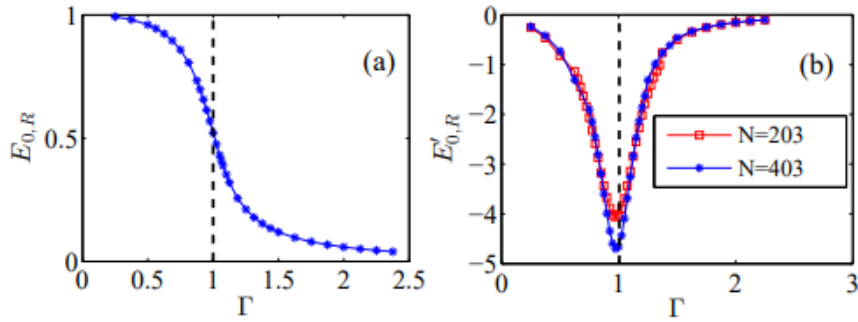
尽管表达纠缠是一个复杂的问题，纠缠的体系下至少存在着这样几条规律，第一，对于两个具有一定纠缠程度的特定态进行混合时，得到的混合态中的纠缠不能超过前两个态的纠缠程度的加权和。第二，纠缠永远是正定的，当且仅当系统可分离时没有纠缠。第三，局部操作，比如说测量某个子系统 A，得到约化密度矩阵，不会增加系统的纠缠程度。根据这些性质可以构造纠缠单调量（Entanglement Monotone）来描述纠缠，如果某些物理量满足这三个条件至少它是可以描述纠缠的。可以通过满足这三个条件绕开传统的基于熵定义下的系统纠缠与分离程度，从而适用于更为广泛的量子系统。纠缠负性（Entanglement Negativity）就是这么一个例子，它的定义为：

$$E_N(\sigma) = \|\sigma^{T_B}\| - 1 \quad (1-10)$$

其中 σ 可以看作为系统的密度矩阵，而 T_B 则表示需要对该密度矩阵对 B 子系统做部分转置，然后去求新的密度矩阵本征值的绝对值之和。利用第二条正定性，以及正定矩阵的转置依然是正定矩阵这个性质，如果转置矩阵存在负的本征值，那么一定说明子系统之间具有纠缠。反之，如果纠缠负性是零，利用密度矩阵本征值之和为一的性质，说明转置部分不提供负的绝对值，这说明不了什么，系统既可能有纠缠又可能没有。尽管如此，纠缠负性至少能够作为表示两系统纠缠的度量，而且可以对约化密度矩阵中的子系统再求一次转置，以考虑三部分纠缠的情况。对于我所研究的双通道近藤模型，求解的是某一条链与局域自旋之间的纠缠负性。

Alkurtass 等人^[8]的研究中，就试图把纠缠负性作为序参量，用来表征双通道近藤模型的相变，如图所示(图 1-3)。

其中，左图就反映了纠缠负性从一到零的变化，右图反映的是对于不同尺寸系统纠缠负性的变化速率。在该文章对于纠缠负性的讨论中，作者固定了近藤相互作用与电子跃迁相互作用的比值。而设置左右两条传导电子链与局域自旋间存在不同强度的近藤相互作用， Γ 指的是该强度之比。可以看到， $\Gamma = 1$ 就是一个相变点，在该点

图 1-3 ^[8]双通道近藤模型的纠缠负性

上系统局域自旋的纠缠平均分配到两条链上，而左右作用强度一旦有差异，局域自旋的纠缠快速的趋向于全部分配到某一条链上，形成近藤单态。对于不同的左右近藤相互作用发生这种相变是符合物理直觉的，也是作者利用共形场论的结果可以得到的。现在的问题是稍后在对于纠缠熵行为的模拟中看到同样的近藤单态，产生这个现象的原因不会是局域自旋同两条链的作用，大概率是局域自旋选择了一条链形成了近藤单态。这说明从 Néel 态到近藤单态的过程中，在一直保证左右两条链有相同的作用强度的情况下，也会存在这样的纠缠的重新分配。理论上，通过计算纠缠负性，就可以反映这样的一种相变，比纠缠熵能够看到更多的物理。

1.5 本文研究主要内容

本文旨在利用 DMRG 方法对双通道近藤模型进行全面的计算研究，以深入探索其中的物理现象和量子相变。本文的研究内容主要有以下几个：

一、理解和运用密度矩阵重整化群算法。了解密度矩阵重整化群算法的原理以及张量网络技术在该算法上的应用。使用相关程序包进行编程，得到对于双通道近藤模型可以运行的 DMRG 程序。

二、分析双通道近藤模型纠缠的性质。具体来说，考虑一个局域自旋，即杂质粒子，与两条传导电子链相互作用的模型。取局域自旋为子系统设计其有余下部分的纠缠熵。先通过少量格点解析求解的方法得到大致的纠缠规律，再通过密度矩阵重整化群算法得到基态能量以及纠缠熵性质。分析改变模型参数下的相变行为，并分析系统尺寸、系统边界条件、相互作用强度改变的条件下系统的纠缠性质。

1.6 本文研究意义

在强关联体系中，量子相变可以通过定义纠缠为序参量来描述，因而通过研究纠缠的性质，可以深入理解量子相变的本质和机制。目前对于双通道近藤模型研究的较少，主要集中在对其基态性质的描述上。而对其纠缠熵性质的研究主要只有 Alkurtass 等人^[8]的文章，它是用共形场论（CFT）的方法分析纠缠熵性质，得到了解析的结果，然后基于该结果模拟纠缠熵随着子系统尺寸的变化。我通过改变不同的系统条件，去看 J/t 变化的时双通道近藤模型的相变形式。本文作为笔者科研路上的第一步，可以促使我掌握和运用凝聚态计算方面的多种算法，加强我对数据的分析和处理能力。本文的研究结果也为后续研究多通道近藤模型中可能存在的新奇物性打下基础。

1.7 本章小结

本章介绍了研究所基于的模型——双通道近藤模型。从近藤模型出发，本章回顾了量子杂质问题的研究历史，介绍了近藤单态对应的物理实际，以近藤模型的进藤共振效应说明了量子杂质问题的广阔研究前景。随后转到对于双通道近藤模型的叙述中，介绍了双通道近藤模型的研究历史与研究进展，认为双通道近藤模型是一个有实验支撑的具有丰富基态物理性质的模型。随后基于前人对于纠缠的研究，提出了自己的研究想法，目的是研究双通道近藤模型纠缠熵随着模型参数改变的相变性质，并将在未来的研究中分析负性等更进一步能反映纠缠性质的物理量。最后，本文介绍了所依据文献的计算过程，介绍了纠缠的表示方法和纠缠负性的概念。认为纠缠负性可以作为双通道近藤模型最准确的序参量，并期望在将来可以研究从 Néel 态到近藤单态的过程中纠缠的重新分配模式。

第二章 密度矩阵重整化群算法

2.1 数值重整化群思想

数值重整化群 (Numerical Renormalization Group, NRG) 算法由 Wilson^[11] 于 20 世纪 70 年代提出, 用于解决自旋链模型的低能量物理性质。他在 1982 年获得诺贝尔奖, 以表彰其在重整化理论上的贡献, 这对于理解临界现象、相变、相变点的临界指数以及系统的尺度不变性等问题起到了关键作用。本文所研究的双通道近藤模型就是一类一维杂质自旋链模型, 而研究的对象正是其基态性质, 因此重整化群的思想适用于本文的研究对象。

重整化群基于对自相似性 (self-similarity) 的理解。根据 Kardar^[12] 的说法, 相变需要寻找标度变化下的不动点。在实空间利用相变时物理量只是关联长度的函数的性质, 可以通过反复将体系做粗粒化 (coarse-graining), 重标度 (rescaling), 重整化 (renormalization) 的过程, 以剔除系统中无关的自由度; 而在动量空间中对对应提出的动量较大的部分。本文处理的是哈密顿量对应的矩阵空间, 而且能量集中于基态附近, 这样剔除的就是矩阵中若干高能部分, 而保留低能部分的维度。在这样反复的操作中能量会收敛, 得到的不动点就是基态能量。

具体来说, 数值重整化群的步骤是:

- 1) 确定哈密顿量, 确定系统限制参数。
- 2) 选取包含杂质格点的若干格点, 写出其哈密顿量对应的矩阵。
- 3) 对角化该矩阵, 在得到的本征值中选取 m 个最低能量本征值。
- 4) 将哈密顿量截断至该 m 个最低能量本征值组成的态空间中。
- 5) 增加一个格点, 与截断之后的哈密顿量组成新的哈密顿量矩阵。
- 6) 重复上述过程 3 至 5, 直到能量收敛, 得到基态能量。

数值重整化群方法被广泛应用于模拟近藤杂质问题, 但其在引入晶格相互作用或选择特定边界条件时可能会引起较大误差。这是因为尽管基态能量在整个系统的矩阵维度中占据主导地位, 但在系统边界或引入晶格相互作用后的特定区域中, 基态能量并不占主导地位, 导致迭代收敛速度缓慢或无法收敛至基态。此外, 由于低能态本身的局限性, 截断高能态的处理能力有限, 无法处理大多数问题。因此, 在这些情况下, 数值重整化群的精确性和可靠性受到限制。

2.2 密度矩阵重整化群思想

2.2.1 基本算法

White^[13]发明的密度矩阵重整化群算法 (Density Matrix Renormalization Group, DMRG) 可以应用在更为广泛的问题上。如果想要能量准确的收敛, 可以考虑截断所带来的误差 (Truncation error)。误差来源于截去部分物理上的重要性, 如果格点体系涉及多种相互作用, 先取少量格点是不仅仅需要保留基态, 若干激发态也需要保留下来以反映全局的性质, 从而才能在增加格点时保留尽可能多的全局信息。然而, 截取哈密顿量矩阵对于激发态的保留是不足的, 我们可以考虑截取密度矩阵, 密度矩阵即使只保留其较大的几个本征值也能反映激发态的性质。并且, 如果考虑某个物理量 O 的期望值在截取前后的变化, 可以利用期望值公式:

$$\begin{aligned}\langle \hat{O} \rangle &= T_r(\rho \hat{O}) = \sum_{n=1}^M \omega_n \langle u_n | \hat{O} | u_n \rangle \\ T_r(\rho) &= \sum_{n=1}^M \omega_n = 1\end{aligned}\tag{2-1}$$

这样, 如果从第 k 号密度矩阵本征值开始截去至第 M 号, 那么可能误差的最大值就是:

$$Error_{Max} = \sum_{n=k}^M \omega_n O_{Max}\tag{2-2}$$

其中 O_{Max} 对应了物理量的最大本征值, 是一个有限值。在 DMRG 算法中, 截断是通过保留与最大本征值相关的本征态来实现的。DMRG 通过对密度矩阵进行下文中阐述的奇异值分解 (SVD), 将其表示为左右两个部分的乘积形式。通过保留与最大奇异值相关的本征态, 同时截断较小的奇异值, 可以有效地减少计算复杂度, 并保留系统的主要物理特征, 其可靠性由下文中阐述的纠缠熵决定。具体做法上来说, 其同样利用重整化的思想, 类比于截取哈密顿量矩阵的做法, 仍然是从少量格点出发, 通过增加格点扩大哈密顿量, 对角化后得到基态能量与本征值, 构造密度矩阵然后做截断, 重复上述过程。另外, 对于一个一维有限系统来说如果只选取一个系统块作为增长块的话, 会忽略其余部分带来的物理效应, 在增长的过程中无法有足够的迭代。而是要将系统分为系统和环境两个块, 分别做增长。在组成哈密顿量矩阵时需要组合两个块形成一个超块, 做对角化, 得到超块的密度矩阵, 从而得到系统块的约化密度矩阵, 截断约化密度矩阵, 再增长系统块与环境块, 重复上述过程。具体来说,

无限尺寸 DMRG(图 2-1a) 的步骤是:

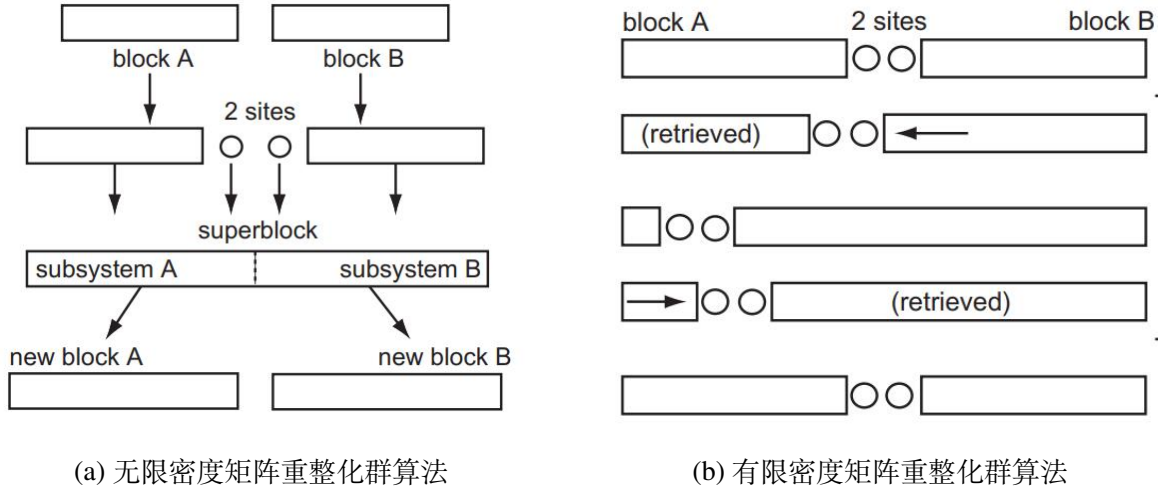


图 2-1 ^[14] 密度矩阵重整化群算法, (a) 无限格点时增长系统块与环境块。(b) 有限格点时增长系统块时减少环境块, 增长环境块时减少系统块, 做若干个循环。

- 1) 确定哈密顿量, 确定系统限制参数。
- 2) 选取包含杂质格点的若干格点, 同样的选取环境的若干格点组成超块, 写出哈密顿量对应矩阵。
- 3) 对角化该矩阵, 得到本征态与本征值, 构造密度矩阵。
- 4) 做偏迹, 得到系统快的约化密度矩阵。
- 5) 对角化该矩阵, 得到本征态与本征值。
- 6) 选取截断 k , 得到该截断下系统块的本征矢。
- 7) 增长系统块与环境块, 按照截断 k 下系统快的本征矢直积新格点构造新的系统块, 与新的环境块组成超块, 写出哈密顿量对应矩阵。
- 8) 重复上述过程, 直到截断所带来的误差极小。

对于有限尺寸下的 DMRG 算法, 应用无限长度的算法可以做到系统长度 L 处, 此时系统无法收敛到基态, 但是可以构造处经过一系列迭代之后的哈密顿量矩阵, 可以重新选取系统块与环境块, 增长一者的长度同时减少另一者的长度, 使得两者总长度为 L 。超块对应哈密顿量矩阵一开始就是无限过程至长度 L 得到的结果, 再对于重新选取的系统块求约化密度矩阵, 重复上述过程直至系统块增长至接近长度 L , 这时候再倒过来增长环境块接近 L , 称这样一个为一个循环 (sweep), 做若干个循环过后截断所带来的误差 (Truncation error) 极小即收敛, 具体过程 (图 2-1b) 为:

- 1) 利用无限尺寸 DMRG 算法直到增长到超块长度 L 。
- 2) 重新选取系统与环境块，求得约化密度矩阵。
- 3) 按照无限尺寸 DMRG 算法 3-7 步增长系统块，减少环境块，直至系统块接近长度 L 。
- 4) 反向增长环境块直至其接近长度 L 。
- 5) 重复上述 3-4 步若干循环，直至截断所带来的误差极小。

对于上述有限尺寸 DMRG 算法，如果应用数值计算，则需要确定算法的参数，其中主要的几个为：

- 1) 循环数 (sweep)，经过我测试在五个左右的循环次数已经可以使约化密度矩阵本征值收敛。
- 2) 键合维度 (bond dimension)，它表示了在两个子系统之间的连接中所允许的最大自由度数量，随着循环数应当越取越大，反映的时所截断的位置，其选取与下文纠缠熵的大小有关。
- 3) 截断误差 (truncation error)，代表了每一个循环过后算法所期望的本征值收敛程度。

2.2.2 施密特分解求解约化密度矩阵

在无限尺寸 DMRG 算法第四步需要求得约化密度矩阵，可以利用求偏迹 $\rho_B = \text{Tr}_A(\rho_{AB})$ ，也可以利用奇异值分解 (SVD) 实现，奇异值数量 i 可以选择 A、B 两系统较小维数的一方。

$$O(jk) = U(ji)\Sigma(ii)V(ik) \quad (2-3)$$

其中 Σ 是对角矩阵，对角元为 λ 。密度矩阵 ρ_{AB} 作用在 AB 组成的超块上，对应态 ψ 由 A、B 对应正交基张成，可以利用施密特正交化方法 (Schmidt orthogonalization)，求得 A、B 对应的正交基与系数：

定理：(Schmidt 分解) 设 ψ 是复合系统 AB 的一个纯态，则存在系统 A 的标准正交基 $|i_A\rangle$ 和系统 B 的标准正交基 $|i_B\rangle$ ，与系数 $\sum \lambda_i^2 = 1$ 使得：

$$|\psi\rangle = \sum_i \lambda_i |i_A\rangle |i_B\rangle \quad (2-4)$$

系统原本由 A、B 各自的正交基 j, k 直积而来：

$$|\psi\rangle = \sum_{jk} a_{jk} |j\rangle |k\rangle \quad (2-5)$$

A 系统对应的基 j 与 B 系统对应的基 k 内部是正交的，但是彼此不正交。原本的 ψ 由 j, k 张成，系数是 a_{jk} ，对该系数矩阵应用奇异值分解，使得： $a_{jk} = u_{ji} \lambda_i v_{ik}$ ，原本的 ψ 则可以分解为：

$$\begin{aligned} |i_A\rangle &\equiv \sum_j u_{ji} |j\rangle & |i_B\rangle &\equiv \sum_k v_{ik} |k\rangle \\ |\psi\rangle &= \sum_i \lambda_i |i_A\rangle |i_B\rangle \end{aligned} \quad (2-6)$$

而对于约化密度矩阵 ρ_A ，可以由原密度矩阵对 B 正交基求偏迹得到，即：

$$\rho_A = T_{rB} \rho = T_{rB} \left(\sum_i \lambda_i |i_A\rangle |i_B\rangle \sum_i \lambda_i \langle i_A| \langle i_B| \right) = \sum_i \lambda_i^2 |i_A\rangle \langle i_A| \quad (2-7)$$

因此得到了约化密度矩阵的特征值，只要将 SVD 分解原系统之后的奇异值做平方即可。

2.2.3 纠缠熵保证算法可靠性

密度矩阵重整化群算法之所以是可行的，一大因素是约化密度矩阵本征值 $\sum \omega_\alpha = 1$ 只需要少量的几项 ω 就可以接近一，而可以截断大量的无效的本征值，它们求和是一个小量。可以通过考察纠缠熵来表明约化密度矩阵这样一种本征值分布的物理含义，A、B 两系统之间纠缠熵 (Entanglement Entropy) 的定义为：

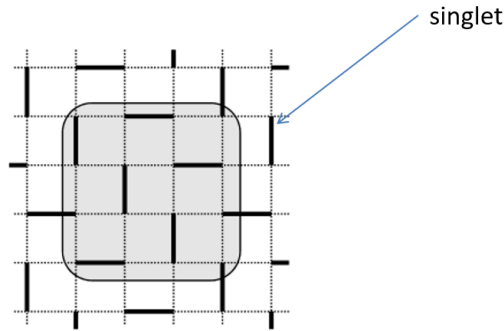
$$S_{AB} = -\rho_A \ln(\rho_A) = - \sum_{\alpha} \omega_{\alpha} \ln(\omega_{\alpha}) \quad (2-8)$$

纠缠熵可以反映两个子系统之间纠缠的性质。具体来说，纠缠指的是对系统中态的信息的了解程度，如果比如一个两格点系统，已知了第一个格点的情况，就可以推断出第二个格点的情况，我们说这两个格点是完全纠缠的；如果在已知第一个格点的情况，完全推断不出来第二个格点的情况，即一二两个格点的态之间完全没有联系，我们说这两个格点处于直积态。比如一个一维体系，对于一个正交基是 D 维的系统，如果系统是完全纠缠的，那么纠缠的度量会平均分配到每个维度上面，求解约化密度矩阵本征值会发现每个本征值是 $1/D$ ，而总的纠缠熵是 $\ln D$ 。对于一个完全处于直积态的系统，即对应的态可以完全分解为 $\psi = |\alpha_A\rangle |\alpha_B\rangle$ ，那么求得的约化密度矩阵只有

一个本征值是一，其它的本征值都是零，得到的纠缠熵是零。在下文的计算结果中会看到近藤单态完全纠缠的 $\ln 2$ 求解过程。

密度矩阵重整化群的核心思想是通过保留系统中最重要纠缠来减少系统的自由度，从而降低计算复杂度。如果系统的纠缠对于矩阵的维度序号确实衰减非常迅速，那么截断带来的误差就会非常小。现在考虑一维的体系，最大的纠缠熵是 $\ln D$ ，这也说明系统的纠缠熵随着系统尺寸是以 \ln 函数变化的。而对于二维情况，纠缠熵满足面积率，纠缠熵指的是 A、B 两系统的纠缠，反映在其边界上，而二维体系中 A、B 两系统的边界长度是与所选取 A 系统尺寸 L 成正比的一段周长。每个穿越 A 系统的直线交此周长于两点对应了一维情况。因此在离散的格点选择中二维的系统纠缠熵至少于系统尺寸 L 成正比。基于纠缠熵的定义： $S_{AB} = -\text{Tr} \rho_A \ln(\rho_A)$ ，定义：

$$m = e^S \quad (2-9)$$



$$S = \log 2 \times (\text{\# of bonds cut}) \approx L \log 2$$

图 2-2 ^[14]VBS 态的纠缠熵例子，系统边界与单态重合的部分提供了纠缠熵，在二维情况下总共正比于系统边界长度 L

选了 m 个密度矩阵本征值之后就可以使得本征值之和接近一，用这种判据来选取密度矩阵的截断 k 。如果对于一维情况， $m = L$ ；相较于随格点数指数增加的矩阵维度，可以截取少量的矩阵维度达到较小的误差；而对于二维情况 $m = e^L$ ，则需要选取指数级的矩阵维度才能达到较小的误差。所以密度矩阵重整化群算法可以很好的处理一维情况，而不太适合对于二维及以上情况的模拟。

2.3 矩阵乘积态

矩阵乘积态 (Matrix Product States, MPS) 是一种用于描述量子多体系统的态表示方法。矩阵乘积态是通过一系列张量的乘积构建的, 每个张量对应系统中的一个自由度, 并且通过特定的约束条件来描述量子态的纠缠结构。通过对纠缠指标限制, 以及利用张量的正交性, 矩阵乘积态能够有效地描述量子多体系统的纠缠结构, 并提供一种紧凑表示方式。对于处理较大的格点体系矩阵乘积态储存与运算的是张量, 而不是态矢量, 从而可以减少储存与运算的复杂度。本研究基于对 Itensor 程序 (<https://www.itensor.org/>) 的使用。Itensor 程序包提供了一种构造矩阵乘积态的方法, 它利用张量网络的快捷表示, 可以快速地表达哈密顿量在矩阵乘积态上的作用, 从而求解基态能量, 纠缠熵等关键物理量。

2.3.1 矩阵乘积态构造

利用施密特正交化, 已经可以把系统分成任意两个部分, 从而计算它们之间的纠缠熵, 分解的本征值可以看作在这两个特定系统作为记号下面的参数。为了利用矩阵乘积态, 需要再进一步做拆分, 把每个格点都拆分出来, 并赋予相应记号下的参数。第一种方法是通过构造虚拟态的方法, 利用投影算符来实现矩阵乘积态。或者^[15]可以再作若干遍施密特正交化, 直到确定每个格点直积态前面的系数。比如任意一个态 ψ , 可以由自旋表象下的态线性叠加而来 eg: $|\uparrow, \downarrow, \uparrow\downarrow, \text{empty}\rangle$, 线性叠加指标可以组成一个张量 A 。 A 张量中的每个元素取决于格点序号, 格点态, 应当有标记 $position, state$, 比如对于例子中的态 $|\uparrow, \downarrow, \uparrow\downarrow, \text{empty}\rangle$, 对应于 A 中的指标为 $A_{state1;state2;state3;state4}^{1234}$ 。确定了指标之后就可以写出张量 A 对应的矩阵了。对于一些简单的态 ψ 可以直接把这些系数写出来, 从而构造矩阵; 而对于复杂的态 ψ 就需要按照指标进行系数划分。而构造矩阵乘积态的目的就是通过施密特正交化过程确定这些对应矩阵的值, 然而由于 SVD 分解不唯一性, 所得到矩阵可以有多种符合的情况。

先对于 N 格点开放系统, 令第一个格点为系统 A, 余下格点为系统 B, 做施密特正交化过程, 得到 α 作为施密特正交基指标, $\lambda_{1,\alpha}$ 作为第一次正交化第 α 指标下的本征值:

$$|\psi\rangle = \sum_{\alpha_1} \lambda_{1,\alpha_1} |\psi(1)_{\alpha_1}\rangle |\psi(2-N)_{\alpha_1}\rangle \quad (2-10)$$

其中 $|\psi(1)_{\alpha_1}\rangle$ 指的是施密特正交基, $|\psi(1)_{\alpha_1}\rangle$ 与 $|\psi(2-N)_{\alpha_1}\rangle$ 尚可以正交, 而进

一步分解下不同施密特基之间就无法正交，而需要统一到彼此正交的自旋基中，这个分解系数通过左矢的作用就可以求得。得到了 s_i 表示第 i 格点处的自旋状态，对于第 α 个以第一个格点为子系统的施密特分解基的自旋基的分解系数是 M ，有指标 α, s_i 。

$$|\psi(1)_{\alpha_1}\rangle = \sum_{s_1} M_{1,\alpha_1}^{s_1} |s_1\rangle \quad (2-11)$$

$$|\psi\rangle = \sum_{\alpha_1, s_1} \lambda_{1,\alpha_1} M_{1,\alpha_1}^{s_1} |s_1\rangle |\psi(2-N)_{\alpha_1}\rangle \quad (2-12)$$

接下来分解 $|\psi(2-N)_{\alpha_1}\rangle$ ，将 1, 2 格点作为系统 A，余下格点作为系统 B 做施密特正交化，得到 λ_{2,α_2} 作为第二次正交化第 α 指标下的本征值：

$$|\psi\rangle = \sum_{\alpha_2} \lambda_{2,\alpha_2} |\psi(1,2)_{\alpha_2}\rangle |\psi(3-N)_{\alpha_2}\rangle \quad (2-13)$$

按如下过程分解 $|\psi(1,2)_{\alpha_2}\rangle$ ，先已知了 $|\psi(1)_{\alpha_1}\rangle$ 的分解形式，基于这个形式做左矢，得到基于第一次施密特分解指标 α_1 的分解，内积去除掉第一个格点的自旋基，剩下第二个格点的自旋基以及系数 M ，对于第 α 个以第 1, 2 个格点为子系统的施密特分解基的自旋基的分解系数是 M ，有指标 α_2, s_i ，又因为对第一个格点的内积过程，有指标 α_1 。

$$\begin{aligned} |\psi(1,2)_{\alpha_2}\rangle &= \sum_{\alpha_1} \lambda_{1,\alpha_1} |\psi(1)_{\alpha_1}\rangle |\psi(2)_{\alpha_1,\alpha_2}\rangle \\ &= \sum_{s_1, \alpha_1} \lambda_{1,\alpha_1} M_{1,\alpha_1}^{s_1} |s_1\rangle \sum_{s_2} M_{\alpha_1,\alpha_2}^{s_2} |s_2\rangle \end{aligned} \quad (2-14)$$

代入式 (2-13) 可以得到：

$$|\psi\rangle = \sum_{s_1, \alpha_1, s_2, \alpha_2} \lambda_{1,\alpha_1} M_{1,\alpha_1}^{s_1} \lambda_{2,\alpha_2} M_{\alpha_1,\alpha_2}^{s_2} |s_1, s_2\rangle |\psi(3-N)_{\alpha_2}\rangle \quad (2-15)$$

要注意这样分解而不是直接施密特分解 (2-12) 式的原因在于后者的 M 张量分量会出现多个指标 $M_{\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3}$ ，前者分解可以只出现两个分量，例如，对于 $|\psi(1,2,3)_{\alpha_3}\rangle$ ，分解到第一部分 $|\psi(1,2)_{\alpha_2}\rangle$ 只与指标 α_2 相关，后一部分的 M 应具有 $M_{\alpha_2, \alpha_3}^{s_3}$ 的形式。最终做若干遍上述过程直至所有的施密特正交基都被分解至自旋基上面，得到：

$$|\psi\rangle = \sum_{s_1 \dots s_N} \prod_{j=0}^{N-1} \lambda_{j, \alpha_j} M_{\alpha_j, \alpha_{j+1}}^{s_{j+1}} |s_1 \dots s_N\rangle \quad (2-16)$$

对于张量累乘 $M_{\alpha_i \alpha_j} M_{\alpha_j \alpha_k}$ 可以通过矩阵求迹的方法进行缩并, 从而去掉元素 α_j , 最终, 矩阵乘积态的形式为:

$$|\psi\rangle = \sum_{s_1 \dots s_N} T_r(A_1^{s_1} \dots A_N^{s_N}) |s_1 \dots s_N\rangle \quad (2-17)$$

张量 A 可以由 λ, M 对于相邻的 α 缩并而来, A 就是这些自旋基的线性叠加指标所组成的一个张量, A 有两个指标。指标 s_i 与 i 代表了第 i 个格点以及它处于何种自旋态上面。确定了这两个指标就可以确定张量 A 对应某点某自旋的矩阵, 该矩阵是通过 M 自旋态分解参数与 λ 施密特分解参数组合而来。

2.3.2 张量网络处理密度矩阵重整化群算法

张量网络 (Tensor Network)^[16]是由一系列张量组成的网络, 其中每个张量代表系统中的一个自由度。常见的几种张量网络结构包括一维的环形张量网络和二维的平面张量网络。这些网络结构可以用于构造和表示矩阵乘积态, 从而描述量子多体系统的态。在凝聚态物理中, 对张量网络的研究在于其构造和优化上面。

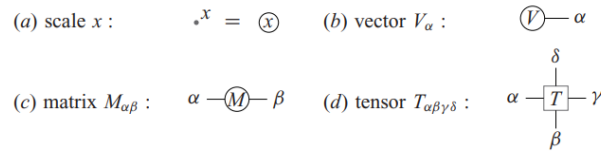


图 2-3 ^[17]张量网络构造规则

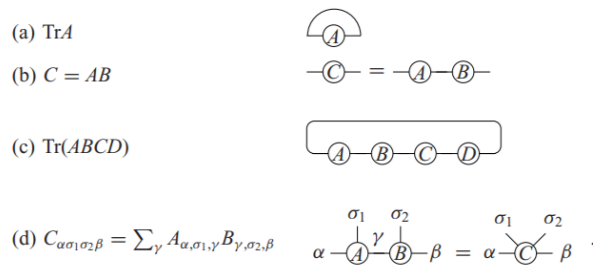


图 2-4 ^[17]张量网络构造规则

在张量网络中，可以用一套图形化的语言表述张量，量子态以及算符。数学上一个向量 [图 2-3,b] 表示为一个“圆”伸出一条“线”，一个矩阵元素 [图 2-3,c] 表示为一个“圆”伸出两条线，一个张量中的 $\alpha, \beta, \gamma, \delta$ [图 2-3,d] 指标表示为一个“圆”伸出四条“线”。事实上，每个张量网络中的“圆”都可以表示为一个某阶张量，伸出的“线”表示为确定的张量指标。比如说一个密度矩阵元素对应的二阶张量两个指标，之前提到密度矩阵可以做 SVD 分解为三个矩阵，这个过程用图形化的表达方式就是 $-\rho- = -U - \Sigma - V-$ 。

一、矩阵乘积态 (MPS) 的表示。对于 (2-17) 式确定的矩阵乘积态形式，可以看到有 N 个输入，对应于伸出的 N 条线，每一条线代表着一个输入，确定矩阵乘积态中每个格点处的自旋形式。可以表达为原本的态 ψ 伸出 N 条线。同时，也可以利用 (2-16) 式拆分矩阵乘积态，将它表示为 N 个张量 A 在指标 α_i, α_{i+1} 下乘积的形式。这时候张量 A^{s_i} 就变化为 $A_{\alpha_i, \alpha_{i+1}}^{s_i}$ ，对应了三个指标，其中的指标 s_i 仍然为输入，而指标 α_i, α_{i+1} 代表了张量之间可以连线，两个相邻张量的连线代表了张量的缩并过程，也就是从 (2-16) 式至 (2-17) 式的过程，用图表示则是 (图 2-5)。

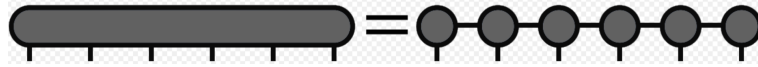


图 2-5 矩阵乘积态的构造方式

二、矩阵乘积算符 (MPO) 的表示。表示矩阵乘积算符需要构造类似于矩阵乘积态若干个张量缩并的形式。一个简单的情况是考虑算符对应的矩阵，则需要分解该矩阵为矩阵连乘的形式。类比矩阵乘积态从左至右代表了格点 1 至格点 N 的输入，这些矩阵连乘从左至右的矩阵也应当代表点 1 至格点 N 的算符对应矩阵，连乘代表了格点数的迭代增长过程，从一个格点增加至 N 个格点。^[17]有一个海森堡模型可以作为例子，其哈密顿量为：

$$H = J \sum_i \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_{i+1} - B \sum_i S_{iz}, \quad (2-18)$$

假设 $S_i = (S_{ix}, S_{iy}, S_{iz})$ 是第 i 个位置处的自旋算符， J 是海森堡交换相互作用常数，再施加一个沿着 z 轴的磁场。如果从左到右对位置进行计数，并使用 H_i 表示从左端到第 i 个位置的哈密顿量中的所有项，我们可以将公式 (2-18) 改写为一个递归公式：

$$H_i = H_{i-1} + JS_{i-1} \cdot S_i - BS_{iz}, \quad (2-19)$$

这个递归关系代表了格点增加一个时哈密顿量的变化，也可以用矩阵的形式表示它，这样的话这个递归矩阵就可以作为从左至右的连乘的矩阵。

$$\begin{pmatrix} H_i & S_i & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} H_{i-1} & S_{i-1} & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ JS_i^T & 0 & 0 \\ -BS_{iz} & S_i & 1 \end{pmatrix} \quad (2-20)$$

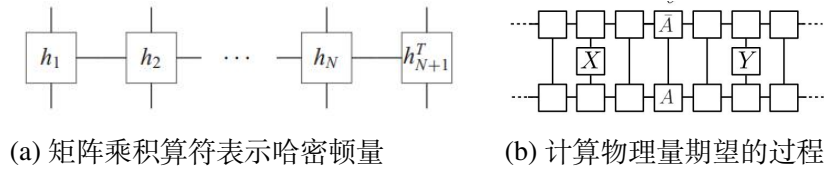
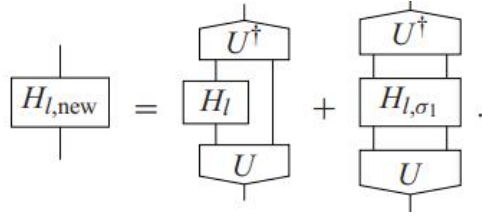


图 2-6 ^[17]张量网络构造过程

图 (2-6[a]) 表达了这种连乘对应的图表示。每个“块”，对应了每个递归矩阵，中间的递归矩阵伸出四条“线”。水平的两条用于矩阵累乘，上下的两条线代表了输入，比如要计算能量，需要计算哈密顿量算符在两个态矢量内积下的形式。观察递归矩阵，需要输入的参数是 i 格点处的自旋信息。而矩阵直积态作为一个态矢量也具备一条伸出的“线”，代表了 i 格点处的自旋信息。因此可以将哈密顿量对应的矩阵直积算符每条伸出的“线”，和两个矩阵直积态每条伸出的“线”相连，形成三条链，用来表示计算能量的过程。另外，如果想要计算的算符之作用在某几个格点上，如两点关联函数，图 (2-6[b])，可以直接对于没有作用的格点两个矩阵乘积态输出之间连线，代表了算符在该态上的作用是一个恒等算符。而在有作用的格点之间作用矩阵乘积算符对应矩阵，总之这样的三条链体系可以计算任意物理量的期望。

三、DMRG 算法的表示。现在已经有了矩阵乘积态的形式，并且假设所求的哈密顿量可以按照图 (2-6[a]) 的方式进行分解，这样就得到了图 (2-6[b]) 的哈密顿量期望。算法要求最小化这一期望从而得到基态本征态与本征能量。

回顾 2.2.1 节的 DMRG 算法。对于格点数为 L 的有限系统，将图 (2-6[b]) 在某处一分为二，左右称为系统块与环境块。利用无限密度矩阵重整化群增长至 L 得到的哈密顿量，求系统块的约化密度矩阵。利用矩阵乘积态的优势就在于，每个张量指标 A 都包含一次 SVD 分解。可以将 $A_1 - A_2 \dots$ 写作 $U_1 - \lambda_1 - V_1 - U_2 - \lambda_2 - V_2$ 的形

图 2-7 ^[17]密度矩阵重整化群算法增加格点的图表示

式，从而原本复杂的对角化操作可以通过张量指标上的缩并来解决。得到了约化密度矩阵的本征值之后就按照密度矩阵重整化群的过程进行截断，再按照截断后的正交基进行增长格点，增长格点时的图表示为图 (2-7)，前 l 个格点截断后的哈密顿量 H_l 不会作用到第 $l+1$ 格点上，新增格点会与其余格点发生作用，其哈密顿量 H_{l+1} 作用在所有格点上。相应的环境块减少一个格点，与系统块组成超块构建新的哈密顿量。重复 2.2.1 节有限尺寸下的 DMRG 算法步骤即可。

Itensor 程序包就利用了张量网络计算密度矩阵重整化群算法。其先定义了格点类型，按照这些格点类型组成系统的矩阵乘积态。再定义了对于不同格点类型上的算符形式，利用每个格点上的算符组成哈密顿量算符。这样图 (2-6[b]) 所求期望的所有条件都满足了，按照划分系统块、环境块，增减格点，反复截断的张量网络上的密度矩阵重整化群算法进行计算，从而得到基态与基态能量等物理量。

2.4 Itensor 算法

2.4.1 环境设置

本研究所使用的 DMRG 程序依赖于 Itensor 张量计算程序包，使用 Intel Mkl 数学库。程序运行平台一是本地的 Windows wsl2 虚拟环境；二是上海交通大学思源一号超算平台，本文的计算结果得到了上海交通大学高性能计算中心的支持和帮助。Itensor 程序包计算双通道近藤模型的 DMRG 程序可参见附录。

2.4.2 建立模型

双通道近藤模型的哈密顿量如下，如同理论所言，每一个局域自旋 S 会同时于多个传导电子 s_i 作用，指标 $i(\text{chain1}, \text{chain2})$ 对应于两条链，都采用开放边界条件。

$$H = -t \sum_{i(\text{chain1}, \text{chain2})\sigma} (c_{i\sigma}^\dagger c_{i+1\sigma} + h.c.) + J \sum_{i(\text{chain1}, \text{chain2})} \mathbf{S} \cdot \mathbf{s}_i \quad (2-21)$$

为了利用张量网络实现 DMRG 算法, 需要按照 2.3.2 节的算法构造矩阵乘积态, 定义哈密顿算符, 再按照 DMRG 算法求解基态波函数, 最后按照张量缩并的方式计算纠缠熵, 纠缠负性等物理量。

首先, 构造矩阵乘积态, 在 Itensor 中一个矩阵乘积态是由多个参数来描述的。比如下面的例子, 格点数为三, 体系全由 $1/2$ 自旋的格点组成, 代码为:

```
1 int N = 6;
2 auto sites = SpinHalf(N);
```

运行的结果如下 “SiteSet” 所示。

```
SiteSet:
site 1 = (dim=2|id=650|"n=1,Site,S=1/2") <Out>
  1: 1 QN({"Sz",1})
  2: 1 QN({"Sz",-1})
site 2 = (dim=2|id=262|"n=2,Site,S=1/2") <Out>
  1: 1 QN({"Sz",1})
  2: 1 QN({"Sz",-1})
site 3 = (dim=2|id=91|"n=3,Site,S=1/2") <Out>
  1: 1 QN({"Sz",1})
  2: 1 QN({"Sz",-1})
```

其中, “SpinHalf” 是在 “SiteSet” 类中定义的格点类型, 每个格点均为自旋 $1/2$, 如果要应用到双通道近藤模型中, 需要新定义 “SiteSet” 类, 由 “SpinHalf” 与 “Fermion” 组合而来, 具体定义可见 Appendix A2。在该例子中的 “SpinHalf” 中存在三个格点, 在 2.3.1 节中, 就体现为六个指标 $|\uparrow_1, \downarrow_1, \uparrow_2, \downarrow_2, \uparrow_3, \downarrow_3\rangle$ 组成的正交基, 而线性表示系数是张量 A 在这六个指标下的表示, 在 2.3.2 节中, 该矩阵乘积态就是图 (2-5) 伸出三个 “触手”。在 Itensor 中, 每个格点处的张量都有一个序号 “id”, 表示该处张量的类型 “ $n = 1, \text{Site}, S = 1/2$ ” 表示第一个格点处, 在 “Site” 处, 自旋 $1/2$ 格点对应的张量指标, 也就是下面的 “ S_z ” 自旋上或自旋下两个指标。当然这是最简单的 “SiteSet”, 较为复杂的格点定义中, 比如求解得到的基态波函数对应的矩阵乘积态, 1 号格点的自旋必然要与 2 号格点自旋纠缠, 要引入新的张量 “Link”。这个过程不引入新的指标, 而是体现为连接 1, 2 号格点图 (2-5) 中的那条线。下一步就是初始化这个 “SiteSet”, 就是往这些指标中填入具体的值, 就是初始化张量 A , 构造初始的波函数, 这样才可以代入 DMRG 中进行计算。这里我的初始化 Néel 态, 对应着每一条传导电子链的 “SiteSet” 中奇数的格点填入自旋上指标, 偶数的格点填入自旋下指标, 从而构造 Néel 态初始波函数。

在双通道近藤模型中，第一步也是需要建立正交基。Itensor 程序包提供了“SpinHalf”和“Fermion”作为矩阵乘积态的单元；以及相应的态上的算符。这里定义一个类，作为组合这两个矩阵直积态单元的“MixedSite”，使得前 $\frac{1}{2}(N-1)$ 个格点对应于传导电子态，第 $\frac{1}{2}(N+1)$ 号格点对应于局域自旋态，后 $\frac{1}{2}(N-1)$ 个格点对应于传导电子态。前 $\frac{1}{2}(N-1)$ 个格点之间存在电子跃迁相互作用，后 $\frac{1}{2}(N-1)$ 个格点之间存在电子跃迁相互作用，第 $\frac{1}{2}(N+1)$ 号格点与其它格点之间均存在近藤相互作用，用图展示如下：

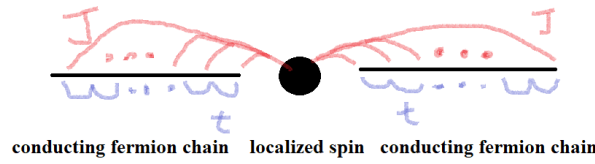


图 2-8 双通道近藤模型示例

第二步，构造哈密顿量。Itensor 提供了一组定义在“SiteSet”上面的算符。比如在“SpinHalf”中，提供了“ S_z ”等价于二次量子化后的自旋算符的 z 分量，比如在“Fermion”中，提供了“Cdagup”作为产生一个自旋向上的传导电子的算符。在双通道近藤模型中，调用在第一步中定义好的格点类型，利用上一步所选取态上面的算符，比如说 $-t, \text{Cdagup}, i+1, \text{Cup}, i$ ， i 与 $i+1$ 是相邻的两个格点，作用在“Fermion”格点中的产生湮灭算符上面，相互作用强度是 $-t$ ，代表了一种电子跃迁相互作用；而 $0.5 * J, S-, N, S+, i$ ， N 是我设置的自旋格点所在位置，作用“SpinHalf”算符，在传导电子 i 格点处作用“Fermion”格点中的算符“ $S+$ ”，相互作用强度为 J ，代表了近藤相互作用，组合这些算符可以构造所需的双通道近藤模型哈密顿量。

第三步，利用 DMRG 程序求解基态波函数。调用第二部中定义好的哈密顿算符，确定我所需要的 DMRG 参数，可以参见 2.2.1 节，比如我所选取的“sweep”为 5，我期望在循环了五遍之后最小化截断误差，“bond dimension”加到 100, 1000………必须要选取合适的截断误差区间计算效率才能最优。在这之后调用 Itensor 程序自带的 DMRG 函数求解，就可以得到基态波函数与基态能量。

第四步，求解关键物理量。我所要求的物理量有：

- 1) 基态能量的近藤部分的左通道部分与右通道部分
- 2) 纠缠熵

3) 纠缠负性

第一，基态能量的近藤部分的左通道部分，其定义为 $\sum_{ichain1} \langle S \cdot s_i \rangle$ 。在具体实现上，我已经得到了基态波函数，需要按照第二步的方法构造双通道近藤模型左通道的哈密顿量，就是双通道近藤模型哈密顿量去掉电子跃迁部分，再去掉右通道相互作用部分，再定义 $J = 1$ 。 $\sum_{ichain1} \langle S \cdot s_i \rangle$ 就是对于构造双通道近藤模型左通道的哈密顿量的能量期望，对于第三步中得到的基态波函数求期望即可。

第二，求解纠缠熵。根据上文的理论，基态对应的矩阵直积态可以经由 SVD 分解至不同子空间中 (Schmidt 正交化)。取局域自旋与其它的传导电子为两个子系统，这两个子系统之间的纠缠熵可以通过将系统边界定在 $\frac{1}{2}(N-1)$ 与 $\frac{1}{2}(N+1)$ 处，应用 SVD 分解得到奇异值，平方即为局域自旋约化密度矩阵的本征值，利用纠缠熵的冯诺伊曼公式 $S_{vN} = -\sum p_i \ln p_i$ 求值，在 Itensor 中，求解纠缠熵的过程可以由下面的代码来表示，假设已经有了基态波函数” *psi*”，局域自旋位于位置 “b”：

```

1  psi.position (b) ;
2  auto l = leftLinkIndex (psi , b) ;
3  auto s = siteIndex (psi , b) ;
4  auto [U,S,V] = svd (psi (b) , {l , s}) ;
5  auto u = commonIndex (U, S) ;
6
7  //Apply von Neumann formula
8  //to the squares of the singular values
9  Real SvN = 0.;
10 for(auto n : range1 (dim (u) ))
11 {
12     auto Sn = elt (S, n, n) ;
13     auto p = sqr (Sn) ;
14     if (p > 1E-12) SvN += -p*log (p) ;
15 }
16 printfln ("Across bond b=%d, SvN = %.10f", b, SvN) ;

```

在这个过程中选取了两个”触手”。触手”l”代表了传入局域自旋的张量信息，由于 psi.position 代码使得局域自旋左侧的张量达到了左正交，l 实际上传达了局域自旋左侧的所有信息，触手 “s” 代表了传入局域自旋的两个张量指标，结合”l,s”在 *psi(b)* 局域自旋处，做 svd 分解实际上就代表了将整个矩阵乘积态按照局域自旋为其中一个

子系统进行 svd 分解，即施密特正交化。代码的下半部分就是施密特正交化得到了奇异值，利用冯诺依曼公式求解纠缠熵的过程。

第三，求解纠缠负熵 (Negativity)。纠缠负熵的物理含义在 1.4.1 节介绍，其定义为：

$$E_N(\rho) = \|\rho_A^{T_C}\| - 1 \quad (2-22)$$

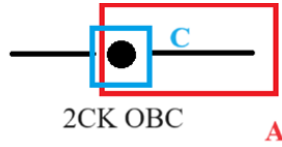


图 2-9 双通道近藤模型求解纠缠负熵图示

如同 1.4.1 节所言，如果要研究局域自旋与传导电子之间的纠缠在两条链之间的分配问题时，就需要计算局域自旋与其中一条链的纠缠。当存在三个子系统，以及存在经典和量子的纠缠是，纠缠负熵是更好的描述方式。这就需要先求得子系统 A 的约化密度矩阵，再对于该约化密度矩阵对于局域自旋的两个正交基做部分转置，再求得新的约化密度矩阵的特征值，将这些值取绝对值再与 1 做差可以取出部分转置带来的奇异纠缠，也就得到了纠缠负熵，Itensor 代码是求解局域自旋与右通道纠缠的过程：

```

1 //define reduced density matrix
2 psi.position(b);
3 auto rhoright = psi(b);
4 for(int k=b+1 ; k<=N ; ++k)
5 {
6     rhoright *= psi(k);
7 }
8 rhoright = prime(rhoright, "Site")*dag(rhoright);
9
10 //partial transpose
11 auto T= inds(rhoright);
12 auto R=T[0];
13 auto M=T[b];
14 auto W = M;
```



```

15 M=R ;
16 R=W ;
17 rhoright =replaceInds (rhoright , {R,M} , {M,R} ) ;
18
19 //eigenvalue
20 auto [U,V] =diagHermitian (rhoright) ;
21 auto u = commonIndex (V,U) ;
22 double Svv = 0.000000;
23 for(auto n : range1 (dim (u)) )
24 {
25     auto Sn = elt (V,n,n) ;
26     // Print(Sn) ;
27     Svv += abs (Sn) ;
28 }
29 Svv = Svv-1 ;
30 Print (Svv) ;

```

首先是构造约化密度矩阵，由 2.3.2 节，密度矩阵是一个矩阵乘积算符，需要做矩阵乘积态的外积，存在着 $2N$ 个“触手”。在约化密度矩阵中，通过 psi 的相乘完成这一个外积过程，从局域自旋处开始外积直到右侧传导电子链的末端。需要注意的是“ $psi*prime(psi)$ ”代码中需要对于第二个“ psi ”做“ $prime$ ”处理，就是使得第二个“ psi ”的指标向上提升一级，使之与第一个“ psi ”的指标不同，否则在 Itensor 语法中就是做张量指标缩并过程。第二步是做部分转置，假设约化密度矩阵可以由 i, i', j, j' 表示，那么做部分转置的过程为：

$$\begin{aligned}
 \rho_A &= \sum_{ii'jj'} |i\rangle |j\rangle \langle j'| \langle i'| \\
 \rho_A^i &= \sum_{ii'j'j} |i'\rangle |j\rangle \langle j'| \langle i| \\
 \rho_{(ij)(j'i')} &\rightarrow \rho_{(i'j)(j'i)}
 \end{aligned} \tag{2-23}$$

原本的矩阵元素 $\rho_{(ij)(j'i')}$ 现在被部分转置到了元素 $\rho_{(i'j)(j'i)}$ 上，对应于张量元素的交换。不过从指标的角度来看也可以是张量的元素没有发生变化，而是构成张量的指标发生了交换。因此，在所构造的约化密度矩阵中，第“0”项与第“b”项对应于局域自旋波函数与构造约化密度矩阵所需的它的“ $prime$ ”。做部分转置就是交换这两

个“触手”，使用 Itensor 中的“repalceInds”可以实现这一点。

得到了转置后的约化密度矩阵，就可以按照纠缠负熵的定义求解了，需要注意的是这里使用的“diagHermitian”函数仍然需要对角化月华密度矩阵这个矩阵乘积算符，在之前的 DMRG 计算中，以及纠缠熵 svd 分解矩阵乘积态的过程中，都可以通过张量缩并避免这一点，而这里提前构造了矩阵乘积算符，就不可避免要使用对角化才可以求得纠缠负熵。这就导致无法计算较大的格点，目前我的 Itensor 程序可以计算的最大格点数量为 13。

2.5 本章小结

本章介绍了研究的主要工具——密度矩阵重整化群算法。从数值重整化群算法开始，介绍算法的发展历史以及原理，其中穿插对于 Itensor 程序包使用上的说明，之后介绍施密特正交化与纠缠熵的计算以论证密度矩阵重整化群算法的精确性性和高效性。如今的密度矩阵重整化群算法依赖于张量网络的构造。从张量的表示出发，本章介绍了一步步推导出矩阵乘积态的表示，张量网络中矩阵乘积态以及矩阵乘积算符的表示，以最终说明利用张量网络方法实现的密度矩阵重整化群算法的可靠与高效。最后，本章介绍了 Itensor 程序包计算双通道近藤模型的具体过程，这个过程运用到了第二章的所有介绍内容，先定义 MPS, MPO, 再运用 DMRG 思想，最终程序实现求解基态能量，纠缠熵，纠缠负性等物理量。这些说明全部是来自于我学习 Itensor 算法原理的过程中，Itensor 作为张量网络计算包可以应用密度矩阵重整化群算法处理大量一维格点问题。

第三章 计算过程与计算结果

3.1 少量格点时的严格求解

在处理少量格点情况时，我们可以采用严格求解的方法。具体而言，我采用了两种方法来进行求解。首先是采用极端情况求解，我考虑了近藤相互作用参数 J 等于零或者传导电子跃迁参数 t 等于零的情况。其次，我还使用了严格对角化 (Exact Diagonalization, ED) 的程序包。这种方法能够通过精确计算系统的本征态和本征值得到准确的结果。对于少量格点严格求解的意义在于，首先它能够帮我建立初步的物理图景。通过分析极端情况和精确求解的结果，我能够揭示系统的基本行为和特征。其次，如果在少量格点情况下，数值求解方法与严格求解方法得到的结果一致，那么可以认定所采用的数值求解程序在处理更大规模格点时的可靠性。

在极端情况下的求解中，我考虑了两种情况。首先，我研究了由两个传导电子组成的体系，对应于近藤相互作用参数 J 等于零的情况。由于 J 为零，该情况相对较为简单，因此在此处我将略去详细讨论。其次，我着重考虑了由两个电子和一个杂质自旋组成的情况，其中传导电子之间的跃迁参数 t 等于零，即体系中只存在近藤相互作用。在这种情况下，体系的哈密顿量可以表示为：

$$H = JS_{\text{imp}} \cdot (\mathbf{s}_1 + \mathbf{s}_2) \quad (3-1)$$

在这个表达式中， J 代表近藤相互作用强度， S_{imp} 表示杂质自旋， \mathbf{s}_1 和 \mathbf{s}_2 分别表示两个电子的自旋算符。通过矩阵对角化严格求解的步骤应当为：

- 1) 确定参数限制，比如总量子数，总自旋等等。
- 2) 在给定参数限制下确定体系的正交基矢。
- 3) 对于所得正交基矢写出哈密顿量对应矩阵。
- 4) 对角化矩阵，得到本征态与本征值，最小本征值即基态能量。

为了确保严格求解的参数与数值计算一致，我在数值计算中选择了传导电子的反铁磁态（即 Néel 态）作为初始态，并且始终保持体系处于半填充状态。这意味着在严格求解的三格点体系中，我们限制总粒子数为三，传导电子的总自旋为零，并且局域自旋应处于半填充状态。这样的参数限制确保了我们在严格求解和数值计算中所研究的系统是相同的。此外，值得注意的是，在电子反铁磁态和近藤哈密顿量的限

制下，双占据的传导电子态无法从初始态演化而来。由于这些双占据态对我们的讨论结果没有影响，我们可以在讨论中忽略它们，将其视为平凡态。当不选取限制参数时，每一个传导电子格点可以空态，上自旋占据，下自旋占据，双占据；每一个局域近藤自旋可以上自旋或是下自旋，总计正交基矢最大三十二维。而在这样的限制下体系的正交基矢一共有八个，列举如下：

$$\text{State} = | \text{Fermion 1, Fermion 2, Spin} \rangle$$

$$\text{Orthogonal Basis} = \{ | \uparrow\uparrow\uparrow \rangle; | \uparrow\uparrow\downarrow \rangle; | \uparrow\downarrow\uparrow \rangle; | \uparrow\downarrow\downarrow \rangle; | \downarrow\uparrow\uparrow \rangle; | \downarrow\uparrow\downarrow \rangle; | \downarrow\downarrow\uparrow \rangle; | \downarrow\downarrow\downarrow \rangle \}$$

哈密顿量对应矩阵的元素即为：

$$H_{ij} = \langle \text{State } i | H | \text{State } j \rangle \quad (3-2)$$

哈密顿量由两个自旋算符的点积组成，把每个自旋算符展开为产生湮灭算符的二次量子化形式，先利用产生湮灭算符的运算规则，再利用所选取基矢正交归一的性质就可以求得哈密顿量所对应的矩阵了。

$$\begin{aligned} \hat{S}_{imp} \cdot \hat{S}_1 &= (\hat{S}_{impx}, \hat{S}_{impy}, \hat{S}_{impz}) \cdot (\hat{S}_{1x}, \hat{S}_{1y}, \hat{S}_{1z}) \\ \hat{S}_\alpha &= \begin{pmatrix} C_\uparrow^+ \\ C_\downarrow^+ \end{pmatrix} \sigma_\alpha \begin{pmatrix} C_\uparrow \\ C_\downarrow \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (3-3)$$

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

$$H = \begin{pmatrix} | \uparrow\uparrow\uparrow \rangle & | \uparrow\uparrow\downarrow \rangle & | \uparrow\downarrow\uparrow \rangle & | \uparrow\downarrow\downarrow \rangle & | \downarrow\uparrow\uparrow \rangle & | \downarrow\uparrow\downarrow \rangle & | \downarrow\downarrow\uparrow \rangle & | \downarrow\downarrow\downarrow \rangle \\ \hline 2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 2 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 2 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 2 \\ 0 & 0 & 0 & 2 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 2 & 0 & 0 & 0 \\ 2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 2 \end{pmatrix} \quad (3-4)$$

对角化该矩阵就可以求得本征态了，其中的基态可以写为：

$$\begin{aligned}
|\varphi_1\rangle &= (-|\uparrow\uparrow\uparrow\rangle + |\uparrow\downarrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\downarrow\rangle) \frac{1}{\sqrt{3}} \\
|\varphi_2\rangle &= (-|\uparrow\downarrow\uparrow\rangle - |\downarrow\uparrow\uparrow\rangle + |\downarrow\downarrow\downarrow\rangle) \frac{1}{\sqrt{3}}
\end{aligned} \tag{3-5}$$

对于基态纠缠熵的计算，根据上文的理论，有如下步骤：

- 1) 利用所求得的基态构造密度矩阵。
- 2) 对于所得到的密度矩阵关于传导电子求偏迹，得到关于局域自旋的约化密度矩阵。

$$\begin{aligned}
\{n_{\text{fermion}}\} &= \{|\uparrow\uparrow\rangle, |\uparrow\downarrow\rangle, |\downarrow\uparrow\rangle, |\downarrow\downarrow\rangle\} \\
\rho_{\text{spin}} &= T_{r_{\text{fermion}}} \rho = \langle \{n_{\text{fermion}}\} | \rho | \{n_{\text{fermion}}\} \rangle
\end{aligned} \tag{3-6}$$

- 3) 对角化该密度矩阵，得到本征值 p_i 。
- 4) 利用纠缠熵的冯诺伊曼公式 $S_{\text{vN}} = -\sum p_i \ln p_i$ 求值。

这样，对于原先的八维矩阵，求偏迹之后可以得到一个二维矩阵，对该约化密度矩阵求本征值，最终得到，当 $J = 1$ 时，纠缠熵的值为 0.636514。利用附录中的 DMRG 程序代入总格点数为三，忽略电子之间的耦合，取近藤相互作用参数为 $J = 1$ 时可以得到与此相同的结果。

可以通过类似的方法求解带电子跃迁相互作用的体系，不过双通道近藤模型对应至少五个格点。与上文的差异在于，此时在第二步：给定参数限制下确定体系的正交基矢时，双占据态可以由初始态演化而来，除了对应于上文情况所设置的五个格点对应三十二维矩阵。考虑每条链都是半填充状态，每条链总自旋都是零的情况下，还应当加入每条链两个维度，总计 $2 * 2 * 2$ (局域自旋正负) 总计八个维度，对角化该四十维矩阵。在电子跃迁相互作用主导的情况下系统是两个两粒子反铁磁基态的直积态，在近藤相互作用主导时系统不考虑额外八个维度的影响。这个例子也说明了格点个数带来计算量的指数增加，为了进一步增加格点格数需要利用计算机程序。

利用计算机程序，另一种方法是使用严格对角化的程序包 QuSpin, 相关代码可以参见附录。QuSpin 是一个开源的 Python 程序包，用于精确对角化和量子动力学研究任意玻色子、费米子和自旋多体系统。QuSpin 支持用户去定义在一维和多维晶格系统中的各种对称性，以及对各种体系随时间演化的情况的模拟。量子体系的矩阵的维度随着格点数增加指数增长。一维条件下，严格对角化程序包求解二十个格点以下的体系精确又迅速，而计算大量格点则显得算力不足了，在我们的双通道近藤模型中，

可以以九个格点严格求解基态能量。

为了利用 Quspin 程序包的严格对角化功能, 首先需要根据之前提到的方法确定特定参数下的正交基。quspin 程序包提供了多种正交基选项, 如“fermion basis”和“spin basis”, 我们需要设定这些正交基所对应的总粒子数和总自旋, 并将它们按照所研究的体系组合成“tensor basis”, 以构建所需的正交基。其次, 我们需要对哈密顿量进行分解, 将其分解为适用于“fermion basis”和“spin basis”的不同部分, 并使用分隔符将它们分开。这样, 我们就能够利用该程序包准确地计算基态能量。比如说, 对于我们求解的体系 (电子相互作用与近藤相互作用), 可以设置:

```
basis = tensor_basis(fermion_basis_1, fermion_basis_2, spin_basis)
```

这样, 用分隔符 “|” 隔开的几个子空间就对应于 “电子自旋上空间 | 电子自旋下空间 | 局域自旋空间”。比如说, 在格点指标 $[i, i]$ 下的算符 “+|-” 对应于算符 $c_{i\uparrow}^+ c_{i\downarrow}$; 在格点指标 $[i, i+1]$ 下的算符 “+|-” 对应于算符 $c_{i\uparrow}^+ c_{i+1\uparrow}$; 在格点指标 $[i, i, N]$ 下的算符 “+|-z” 对应于算符 $c_{i\uparrow}^+ c_{i\downarrow} S_N^z$ 。用这些记号就可以构造哈密顿量了, 并最终得到基态能量。比如说, 取九个格点, 从左至右是四个传导电子, 一个局域自旋, 四个传导电子; 双通道近藤模型哈密顿量; 电子跃迁参数 t 于近藤相互作用参数 J 均为 1; 总粒子数半填充且传导电子总自旋为零, 可以求得基态能量:

$$GS \quad Energy = -8.944272$$

3.2 建立模型的相关讨论

首先, 要明确最准确的双通道近藤模型是指一种能够涵盖更多物理现象的模型。当前的双通道近藤模型是一种简化形式, 其采用双通道结构, 使得局域自旋能够与多个传导电子同时发生近藤相互作用。然而, 如果局域自旋仅与两个传导电子发生近藤相互作用, 那么物理现象可能会更加清晰。在这种情况下, 仅考虑一个局域自旋是不足以进行计算的, 应当选择多个局域自旋, 并将它们组成一条链。相应地, 两个传导电子也应当组成两条链, 这样形成了一个由三条链构成的双通道近藤模型。然而, 困难在于, 在这种情况下, 不再仅仅是由 J 控制的近藤相互作用形成近藤单态与由 t 控制的电子跃迁相互作用形成反铁磁态之间的竞争, 局域自旋之间还可能存在海森堡相互作用, 并与传导电子链相耦合, 可能引起一个长程衰减的磁矩, 即 RKKY 相互作用, 其中的相变相当复杂。总之, 这样的模型涉及三个参数, 这些参数可能不是相互独立的, 如果我们希望计算上述竞争所导致的纠缠熵等物理量, 这个模型具有更

加丰富的物理现象。因此，我期待在未来的研究中对这个问题进行深入分析，以探究这个由三个参数构成的体系所蕴含的丰富物理现象。这将有助于我们对双通道近藤模型的理解。

在使用 Itensor 进行计算时，我们需要选择一个适当的初态。这个初态需要满足一些正交基参数的限制。为了符合物理规律，我们选择了具有传导电子总自旋为零的初态。在这种情况下，我选择了半填充时的正交基作为初态。如果我们观察没有任何参数限制的正交基所组成的哈密顿量矩阵，我们会发现可以根据不同的总粒子数对哈密顿量进行分块。这表明选择不同的总粒子数对于基态能量有巨大的影响。当系统处于半填充状态时，有两个主要原因使其成为一个合理的选择。首先，半填充状态具有完全对称的特性，这使得计算变得更加简单。其次，半填充状态在物理上具有丰富的性质，其中 Néel 态是一个常见的选择。在选择了这些限制条件之后，对于我所选的双通道近藤模型，选择其他初态的结果几乎是一致的，例如每个奇数格点双占据，每个偶数格点为空态作为初态。我还尝试过在三条链双通道近藤模型中选择这两种初态，发现基态能量存在微小差异。这可能表明潜在的某些相互作用会限制这两种初态之间的相互转化，但目前尚不清楚具体的机制。

3.3 计算结果与分析

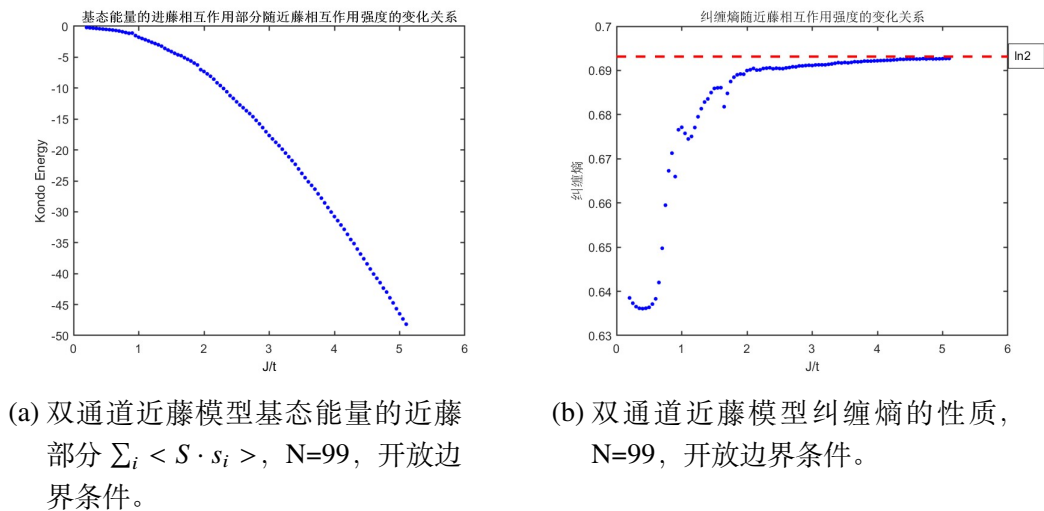


图 3-1 DMRG 得到的基态近藤部分能量以及纠缠熵

通过应用密度矩阵重整化群（DMRG）方法对双通道近藤模型进行计算，我们获

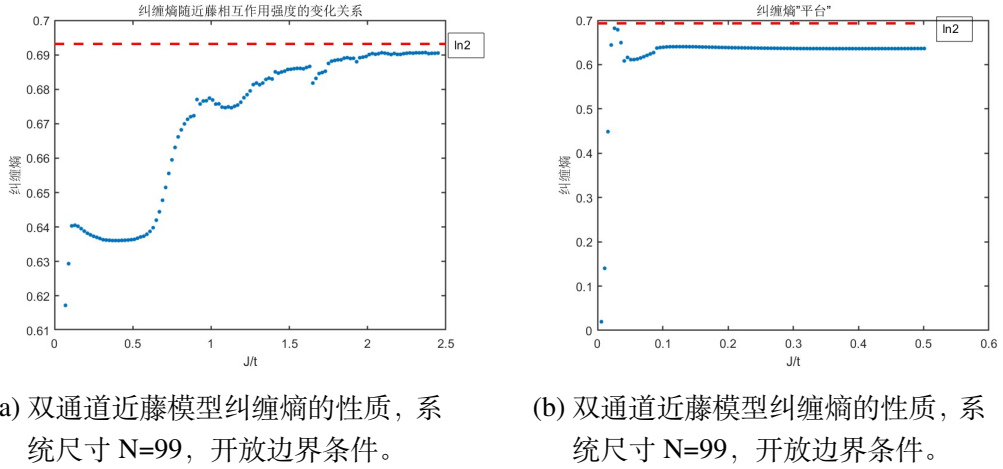


图 3-2 DMRG 得到的纠缠熵

得了基态近藤部分能量以及纠缠熵随近藤相互作用强度的变化关系。初步结果显示，近藤部分的基态能量呈现下降的趋势，可能近似于线性关系。同时，在近藤相互作用强度 J 趋于极限时，纠缠熵趋于饱和，存在一条渐近线。在 J 较小的情况下，纠缠熵从零开始逐渐增加，但并非一次性完成，而是经历了多个纠缠熵平台。

3.3.1 纠缠熵的渐进行为

先考察 J 趋于无穷时，纠缠熵的渐进行为。通过数值拟合，可以看到这条渐近线为 $\ln 2$ 。 $\ln 2$ 作为渐近线实际上是一个量子点所能拥有的最大信息，为了理解这一渐进行为可以考察一对由自旋所组成的体系。由于我初态的选取是总自旋为零的，这一对自旋所能处于的状态要么是 $|\downarrow\uparrow\rangle$ ，要么是 $|\uparrow\downarrow\rangle$ ，归一后的两自旋纠缠态可以写作：

$$\begin{aligned} |\varphi\rangle &= a|\uparrow, \downarrow\rangle + b|\downarrow, \uparrow\rangle \\ a^2 + b^2 &= 1 \end{aligned} \quad (3-7)$$

写出由该自旋纠缠态所组成的密度矩阵，对第一个自旋求偏迹得到关于第二个自旋的约化密度矩阵：

$$\begin{aligned}
\rho &= |\varphi\rangle\langle\varphi| \\
&= a^2 |\uparrow, \downarrow\rangle\langle\uparrow, \downarrow| + b^2 |\downarrow, \uparrow\rangle\langle\downarrow, \uparrow| + ab |\uparrow, \downarrow\rangle\langle\downarrow, \uparrow| + ab |\downarrow, \uparrow\rangle\langle\uparrow, \downarrow| \\
\rho_2 &= \text{Tr}_1 \rho \\
&= \langle\uparrow_1 | \rho | \uparrow_1\rangle + \langle\downarrow_1 | \rho | \downarrow_1\rangle \\
&= a^2 |\downarrow_2\rangle\langle\downarrow_2| + b^2 |\uparrow_1\rangle\langle\uparrow_1|
\end{aligned} \tag{3-8}$$

第二个自旋的约化密度矩阵有特征值 a^2 和 b^2 ，对其应用纠缠熵的冯诺依曼公式可以得到：

$$\begin{aligned}
S &= -a^2 \ln a^2 - b^2 \ln b^2 \\
a^2 + b^2 &= 1
\end{aligned} \tag{3-9}$$

取极值，当且仅当 $a^2 = b^2 = \frac{1}{2}$ 成立，对应于最大纠缠熵为 $\ln 2$ 。

在双通道近藤模型中，当 J 远大于 t 时，电子跃迁相互作用相对于近藤相互作用可以忽略。如果一个体系全部由近藤相互作用主导，基态会形成近藤单态 (Kondo Singlet)。和局域自旋耦合的传导电子自旋可以有多种方向，但是在近藤单态中，杂质原子的自旋与传导电子之间形成了一种强烈的耦合，导致它们的自旋方向相互抵消，形成一个总自旋为零的纠缠态。其由一个杂质自旋与一个反方向的传导电子自旋所组成，正好对应了一对自旋组成的体系。在第三章中提到了纠缠熵的面积率，近藤单态的维数是二，应当有最大 $\ln 2$ 的纠缠熵。

纠缠熵的上升模式是随着近藤相互作用增强，纠缠熵快速上升，达到饱和，对应近藤单态，随后纠缠熵就会缓慢变化，此时相变接近结束。对应于上升期的结束大概位置是 $J/t = 2.2$ 左右，说明在这个区间，发生了从 Néel 态到近藤单态的相变。这个近藤单态的存在并不一定意味着系统发生了对称性破缺，并不能解释纠缠的分配的问题。实际上，当近藤相互作用远大于电子跃迁相互作用时，可以类似于看作电子之间的跃迁相互作用不存在，也就是说局域自旋此时之和一条传导链，或者更为准确的自由电子气发生相互作用，这等价于单通道近藤模型，应当类似于单通道近藤模型具有 $\ln 2$ 的纠缠熵。

3.3.2 系统尺寸

图 (3-4) 表示的是系统尺寸对于纠缠熵行为的影响，选用开放边界条件，选取系统尺寸不等的 29 个格点 (即两条 10 格点传导电子链与 1 个局域自旋)，到 599 个格

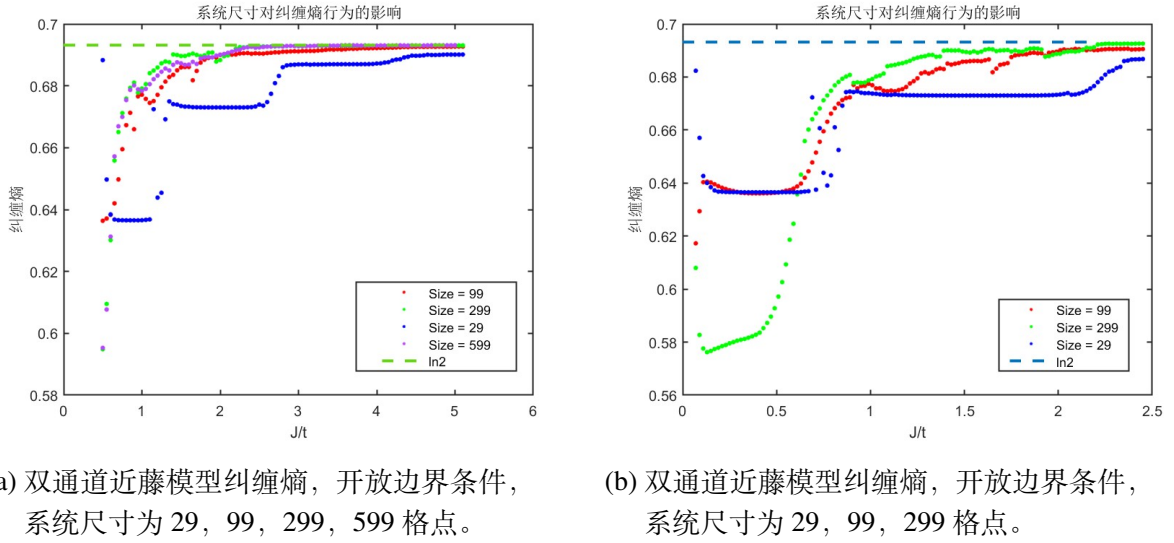


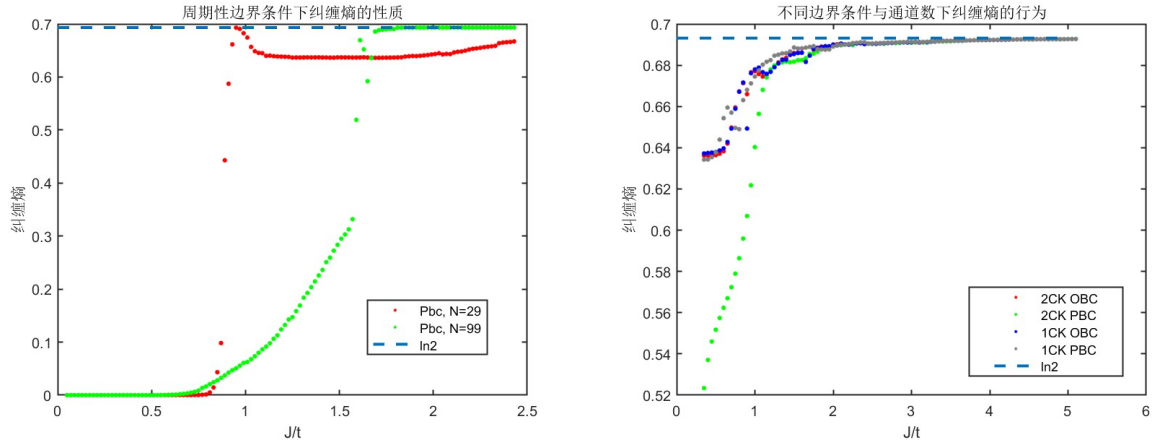
图 3-3 有限尺寸效应

点 (即两条 299 格点传导电子链与 1 个局域自旋), 观察以局域自旋为子系统, 局域自旋与其它两条链之间的纠缠熵。发现当系统尺寸较小时, 纠缠熵会出现一个“平台”, 而当系统尺寸接近热力学极限时, 此平台逐渐消失, 纠缠熵平滑上升。

这实际上体现的是有限尺寸效应。在凝聚态物理中, 有限尺寸效应是指当物质的尺寸减小到与其宏观特性相比较而言很小的情况下, 材料的性质发生明显改变的现象。比如三个格点时的情况在 3.1 节中已经解析计算过了, 三个格点的系统当近藤相互作用主导时, 纠缠熵应当为 0.636514, 并非 $\ln 2$, 不满足形成近藤单态的条件, 原因是格点的数目过于少了。图 3-4 所示的 29 格点体系中有限尺寸效应明显。在热力学极限下大量的本征态对应能量在基态附近, 却因为不同的自旋排列方式, 对应着不同的纠缠熵。随着近藤相互作用的增强, 基态在这些态中连续变化。由于基态也是由大量这些态简并而成, 对应基态纠缠熵也连续变化。而在有限格点的情况下随着近藤相互作用的增强, 基态在这些态中离散变化, 对应某个近藤相互作用区间中可能由某一类自旋排列模式主导, 对应基态纠缠熵也离散变化, 体现为这些“平台”。严格对角化给出相似的结果, 但是由于少量格点无法满足近藤单态, 无法通过少量格点解析求解。

3.3.3 边界条件

图 (3-5) 不同边界条件与不同通道数对纠缠熵行为的影响。边界条件为周期性边界条件 (Periodic Boundary Condition, PBC) 与开放边界条件 (Open Boundary Condition,



(a) 双通道近藤模型纠缠熵, 系统尺寸 $N=29$, 99; 周期性边界条件。

(b) 近藤模型纠缠熵, 系统尺寸 $N=99$; 选用开放边界条件与周期性边界条件, 选用单通道与双通道近藤模型。

图 3-4 DMRG 得到的纠缠熵, 不同边界条件

OBC)。系统为双通道近藤模型 (2CK), 与单通道近藤模型 (1CK)。从模型上看, 对应了如下的四种情况 (图 3-6), 其中环、链内部存在电子跃迁相互作用, 局域自旋与环、链间存在近藤相互作用。

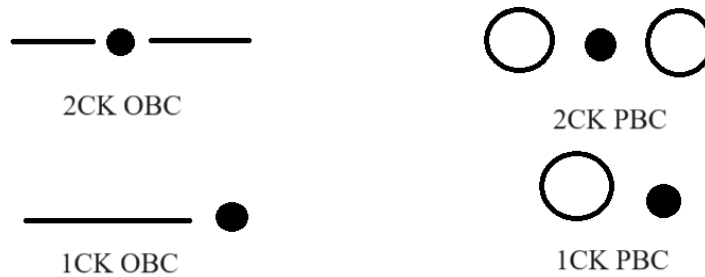
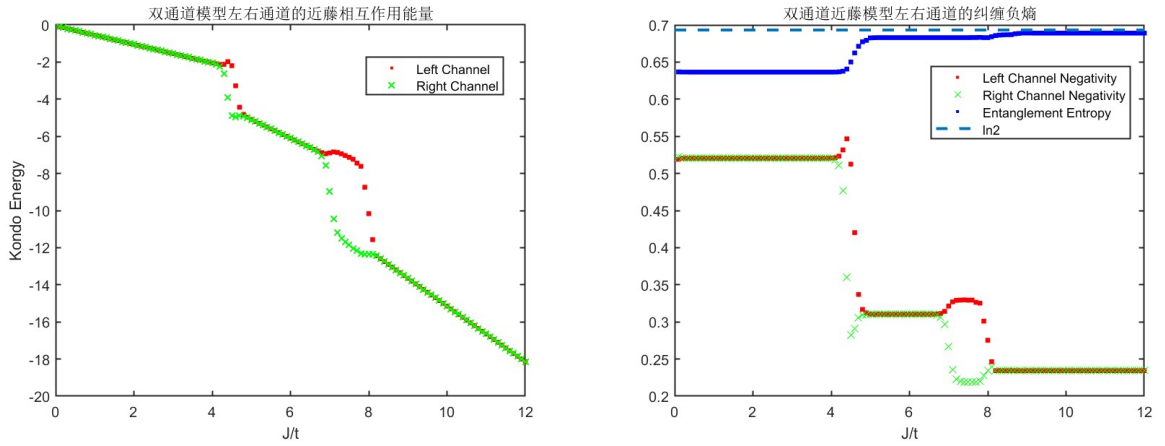


图 3-5 通道数与边界条件示例

从图 (3-5b) 中可以看出, 以及对比图 (3-5a) 和图 (3-4b) 可以看出, 双通道近藤模型周期性边界条件纠缠熵存在连续的上升行为, 并且不论双通道还是单通道周期性边界条件都比开放边界条件纠缠熵有更多的连续上升区间。纠缠熵上升会出现不同程度的有限尺寸“平台”, 而周期性边界条件可以减弱这种效应。周期性边界条件相比于开放边界条件将系统的首尾相连, 原本传导电子在两个链的首尾部分无法进一步的传导, 在链首尾湮灭的传导电子除了和局域自旋交换之外只能向链内部传导, 这实际上是一维链的零维边界态, 会带来一个较强的有限尺寸效应。而周期性边界条件

保证了系统的离散平移对称性,使得首尾电子可以相互传导,这实际上减弱了系统的有限尺寸效应,使得在周期性边界条件下系统纠缠熵有最明显的连续上升行为。

3.3.4 纠缠的分配



(a) 双通道近藤模型近藤部分能量在左右通道的分配,系统尺寸 $N=11$; 周期性边界条件。

(b) 双通道近藤模型左右通道的纠缠负熵 (Negativity) 与纠缠熵,系统尺寸 $N=11$; 周期性边界条件。

图 3-6 纠缠在左右通道的分配问题

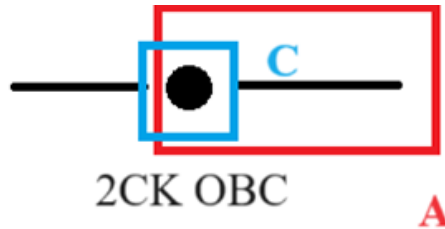


图 3-7 双通道近藤模型右通道的纠缠: 局域自旋与右传导电子链的纠缠负性。

观察图 (3-6) 可以得到结论: 在双通道近藤模型相变的过程中, 并没有发生对称性的破缺, 纠缠的两条链之间的分配是均匀的。这个结论与论文^[8]中的结论不同。在论文^[8]中, 改变局域自旋与两条链之间分别的相互作用强度 J_1, J_2 会带来对称性破缺, 看来至少在我定义的双通道近藤模型中在相变过程中不会出现类似的对称性破缺。

我计算了双通道近藤模型近藤部分能量在左右通道的分配与左右通道的纠缠负性 (Negativity), 相关理论在 1.4.1 与 2.4.2 节。通过与纠缠熵行为的对比, 可以验证计算的可靠性。从第 3.3.2 节可以知道, 近藤部分线性下降的区间, 以及纠缠负性的平

台，都对应了有限尺寸效应，因为这里系统尺寸最大计算到 11 个格点，所以有限尺寸效应较为强烈。在两相之间系统的物理参数会发生跳变，这实际上是对应于某个近藤相互作用区间中可能由某一类自旋排列模式主导，系统在几类自旋排列模式中发生了改变。如果系统趋向于热力学极限，可以预料离散的平台会连续的变化。

在纠缠的分配问题上，近藤部分能量在左右通道的分配与左右通道的纠缠负性不论那个物理量，在稳定相中两者都完全一致，这实际上就说明了在双通道近藤模型相变的过程中，并没有发生对称性的破缺，纠缠的两条链之间的分配是均匀的。只是在不稳定相会出现左右通道的不同，但是不稳定相的出现正是因为有限尺寸效应，如果研究实际接近热力学极限的体系的话，不会看到这种差异。随着近藤相互作用增强，纠缠负熵逐渐趋于零，这实际上是符合物理实际的，这说明了做部分转置的过程中不会引入新的奇异特征值，纠缠全是平凡的。这就是说，在我定义的双通道近藤模型中，所有纠缠都可以由纠缠熵来描述，纠缠熵带来的纠缠也就是局域自旋与系统的其他部分之间的纠缠是纠缠的主体，不能将两条链各自讨论，因为这不会引入新的奇异纠缠。

3.4 本章小结

本章着重于求解双通道近藤模型的基态以及纠缠熵性质。先对于少量格点时做解析求解，利用两种方法，一是极限参数条件下求解，第二种是利用严格对角化程序包求解，从中可以初步了解系统基态和纠缠熵的规律。接下来利用 Itensor 张量计算程序包搭建模拟双通道近藤模型，本节还对模型的物理实际做了讨论，认为三条链构成的双通道近藤模型是更为准确的情况，即 Kondo Lattice 的情况，以及为何选用 Néel 态作为初态的原因以及不同初态可能的影响。通过 Itensor 应用密度矩阵重整化群程序演算，得到了系统纠缠熵的行为，本节考察了纠缠熵的渐进行为会趋于单通道的情况形成近藤单态，不同系统尺寸对于纠缠熵带来的有限尺寸效应，以及单、双通道和不同边界条件下纠缠熵的特性。在此基础上，还研究了系统纠缠的分配的问题，最终认为在我定义的双通道近藤模型中不会出现对称性的破缺，纠缠的两条链之间的分配是均匀的。

第四章 全文总结

4.1 主要结论

双通道近藤模型有着奇特的基态以及纠缠性质。通过对密度矩阵重整化群算法的研究，我成功构建了矩阵乘积算符以及矩阵乘积态，并且在此之上运用密度矩阵重整化群算法处理一维双通道近藤模型的纠缠性质。我着重于 Itensor 程序包的使用，理解了张量网络的原理并以此进行双通道近藤模型的编程。我先利用解析方法得到了少量格点体系下双通道近藤模型的基态和纠缠熵，从而验证了我编写的密度矩阵重整化群算法的正确性。再对不同的参数 J/t ，不同系统尺寸，不同边界条件应用程序得到纠缠熵的性质，最后研究了纠缠的分配问题。我认为纠缠熵的渐进行为对应了近藤单态，纠缠熵的平台对应了有限尺寸效应，应用周期边界条件相较于开放边界条件结果更优秀。随着相变的发生，在我定义的双通道近藤模型中不会出现对称性的破缺，纠缠的两条链之间的分配是均匀的。

4.2 研究展望

本文只是得到了纠缠的初步结论，在今后的研究中有两大方向可以深入研究：

一是考虑由两条传导电子链以及一条局域自旋链组成了双通道近藤模型。这个模型不仅仅考虑了电子与电子之间的跃迁相互作用，电子与局域自旋的近藤相互作用，还考虑了局域自旋间的海森堡相互作用，这可能会诱导一个长程衰减的磁性相互作用。总之，该模型中会有更多的参数选择，也会带来在相变问题上更为丰富的物理图像，值得我下一步研究。

二是考虑计算更多的纠缠指标，比如子系统的尺寸。纠缠熵是反映两系统之间纠缠的物理量，但它不能很好地反映多个子系统之间的相互纠缠，在下一步的研究中我要着重于以 Negativity 作为参考指标。对于纠缠结构的研究可以作为我的下一步研究方向。所谓纠缠结构 (Entanglement Structure) 在我的模型中就是考虑局域自旋，以及它周围的若干传导电子组成的子系统，该子系统的大小改变，对于该子系统的纠缠的影响。

参 考 文 献

- [1] KONDO J. Resistance Minimum in Dilute Magnetic Alloys[J]. Progress of Theoretical Physics, 1964, 32(1): 37-49.
- [2] BRUUS H, FLENSBERG K. Many-Body Quantum Theory in Condensed Matter Physics – An Introduction[M]. UK: Oxford University Press, 2004: 168-183.
- [3] AFFLECK I, LUDWIG A. Universal noninteger ‘ground-state degeneracy’ in critical quantum systems[J]. Physical Review Letters, 1991, 67(2): 161-164.
- [4] EMERY V J, KIVELSON S. Mapping of the two-channel Kondo problem to a resonant-level model[J]. Physical Review B, 1992, 46(17): 10812-10817.
- [5] POTOK R M, RAU I, SHTRIKMAN H, et al. Observation of the two-channel Kondo effect[J]. Nature, 2007, 446: 167-171.
- [6] GRÜNBERG P, SCHREIBER R, PANG Y, et al. Layered Magnetic Structures: Evidence for Anti-ferromagnetic Coupling of Fe Layers across Cr Interlayers[J]. Physics Review Letter, 1986, 57(19): 2442-2445.
- [7] AFFLECK I, LAFLORENCIE N, SORENSEN E. Entanglement entropy in quantum impurity systems and systems with boundaries[J]. Journal of Physics A, 2009, 42(50): 504009.
- [8] ALKURTASS B, BAYAT A, AFFLECK I, et al. Entanglement structure of the two-channel Kondo model[J]. Physics Review B, 2016, 93: 081106.
- [9] PLENIO M B, VEDRAL V. Teleportation, entanglement and thermodynamics in the quantum world[J]. Contemporary Physics, 1998, 39(6): 431-446.
- [10] VIDAL G, WERNER R F. Computable measure of entanglement[J]. Physics Review A, 2002, 65(3): 032314.
- [11] WILSON K G. The renormalization group: Critical phenomena and the Kondo problem[J]. Reviews of Modern Physics, 1975, 47(4): 773-840.
- [12] KARDAR M. Statistical Physics of Fields[M]. Cambridge: Cambridge University Press, 2007: 63-72.
- [13] WHITE S R. Density matrix formulation for quantum renormalization groups[J]. Physics Review Letter, 1992, 69(19): 2863-2866.
- [14] SCHOLLWÖCK U. The density-matrix renormalization group in the age of matrix product states [J]. Annals of Physics, 2011, 326(1): 96-192.
- [15] PEREZ-GARCIA D, VERSTRAETE F, WOLF M, et al. Matrix Product State Representations[J]. Quantum Information and Computation, 2007, 7(5): 401-430.
- [16] ORÚS R. Matrix Product State Representations[J]. Nature Review Physics, 2019, 1(9): 538-550.
- [17] XIANG T. Density Matrix and Tensor Network Renormalization[M]. Cambridge: Cambridge University Press, 2023: 154-161.

密度矩阵重整化群程序（附录 1）

Appendix 1 DMRG 程序

该计算采用了 Itensor 程序包，程序包来源于：<https://www.itensor.org/>。我自己编写的双通道近藤模型计算的程序代码如下所示：

```

1  #include "itensor/all.h"
2  #include "itensor/util/print_macro.h"
3  #include "kondositeset.h"
4  using namespace itensor;
5
6  // using self-defined class "twochannelkondosimple"
7  using channelkondo= twochannelkondosimple<ElectronSite,SpinHalfSite>;
8
9  int
10 main()
11 {
12     // N must be 2Z+1
13     int N = 101;
14     channelkondo sites;
15     MPO H;
16     MPS psi0;
17     sites = channelkondo(N);
18
19     auto t=1;
20     auto Jk=0.05;
21     for( int cycle= 1 ;cycle <= 120 ; cycle += 1 )
22     {
23         Jk += 0.02 ;
24
25         auto ampo = AutoMPO(sites);
26         for (int j = 1; j <= (N-3)/2 ; j += 1) //electron hopping
27         {
28             ampo += -t, "Cdagup", j+1, "Cup", j;

```



```

29     ampo += -t, "Cdagup", j, "Cup", j+1;
30     ampo += -t, "Cdagdn", j+1, "Cdn", j;
31     ampo += -t, "Cdagdn", j, "Cdn", j+1;
32 }
33 for(int j = 1; j <= (N-1)/2; j += 1) //2channel kondo hopping
34 {
35     ampo += 0.5 * Jk, "S+", (N+1)/2, "S-", j;
36     ampo += 0.5 * Jk, "S-", (N+1)/2, "S+", j;
37     ampo += Jk, "Sz", (N+1)/2, "Sz", j;
38 }
39 for(int j = (N+3)/2; j <= N; j += 1) //2channel kondo hopping
40 {
41     ampo += 0.5 * Jk, "S+", (N+1)/2, "S-", j;
42     ampo += 0.5 * Jk, "S-", (N+1)/2, "S+", j;
43     ampo += Jk, "Sz", (N+1)/2, "Sz", j;
44 }
45 for (int j = (N+3)/2; j <= N-1 ; j += 1) //electron hopping
46 {
47     ampo += -t, "Cdagup", j+1, "Cup", j;
48     ampo += -t, "Cdagup", j, "Cup", j+1;
49     ampo += -t, "Cdagdn", j+1, "Cdn", j;
50     ampo += -t, "Cdagdn", j, "Cdn", j+1;
51 }
52
53 // PBC 1
54     ampo += -t, "Cdagup", (N-1)/2, "Cup", 1;
55     ampo += -t, "Cdagup", 1, "Cup", (N-1)/2;
56     ampo += -t, "Cdagdn", (N-1)/2, "Cdn", 1;
57     ampo += -t, "Cdagdn", 1, "Cdn", (N-1)/2;
58     ampo += -t, "Cdagup", N, "Cup", (N+3)/2;
59     ampo += -t, "Cdagup", (N+3)/2, "Cup", N;
60     ampo += -t, "Cdagdn", N, "Cdn", (N+3)/2;
61     ampo += -t, "Cdagdn", (N+3)/2, "Cdn", N;
62
63 H = toMPO(ampo);

```

```
64
65 // Several tries to the occupation of initial state
66 //
67 auto state = InitState(sites);
68 for(auto i : range1(N))
69 {
70     if(i%2 == 1) state.set(i,"Up");
71     else         state.set(i,"Dn");
72 }
73 psi0 = MPS(state);
74
75 // inner calculates matrix elements of MPO's with respect to MPS's
76 // inner(psi,H,psi) = <psi|H|psi>
77 //
78 printfln("Initial energy = %.5f", inner(psi0,H,psi0) );
79
80 // Set the parameters controlling the accuracy of the DMRG
81 // calculation for each DMRG sweep.
82 // Here less than 5 cutoff values are provided, for example,
83 // so all remaining sweeps will use the last one given (= 1E-10).
84
85     auto sweeps = Sweeps(5);
86     sweeps.maxdim() = 10,20,100,100,200;
87     sweeps.cutoff() = 1E-10;
88     sweeps.niter() = 2;
89     sweeps.noise() = 1E-7,1E-8,0.0;
90     //println(sweeps);
91
92 // Begin the DMRG calculation
93 auto [energy,psi] = dmrg(H,psi0,sweeps,"Quiet");
94 // Print the final energy reported by DMRG
95 printfln("\nGround State Energy = %.10f",energy);
96 printfln("\nUsing inner = %.10f", inner(psi,H,psi) );
97
98 // calculate Entanglment Entropy
```

```

99  int b=(N-1)/2 ;
100  // "Gauge" the MPS to site b
101  psi.position(b);
102
103  //SVD this wavefunction to get the spectrum
104  //of density-matrix eigenvalues
105  auto l = leftLinkIndex(psi,b);
106  auto s = siteIndex(psi,b);
107  auto [U,S,V] = svd(psi(b),{l,s});
108  auto u = commonIndex(U,S);
109
110  //Apply von Neumann formula
111  //to the squares of the singular values
112  Real SvN = 0.;
113  for(auto n : range1(dim(u)))
114  {
115      auto Sn = elt(S,n,n);
116      auto p = sqr(Sn);
117      if(p > 1E-12) SvN += -p*log(p);
118  }
119  printfln("Across bond b=%d, SvN = %.10f",b,SvN);
120
121  psi.position(b);
122  auto rhoright = psi(b) ;
123  for(int k=b+1 ; k<=N ; ++k)
124  {
125      rhoright *= psi(k) ;
126  }
127  rhoright = prime(rhoright, "Site")*dag(rhoright) ;
128
129
130  auto T= inds(rhoright) ;
131  auto R=T[0] ;
132  auto M=T[b] ;
133  auto W = M ;

```

```

134   M=R ;
135   R=W ;
136   rhoright =replaceInds(rhoright,{R,M},{M,R}) ;
137
138   auto [U,V] =diagHermitian(rhoright) ;
139   auto u = commonIndex(V,U);
140   double SvV = 0.000000;
141   for(auto n : range1(dim(u)))
142       {
143           auto Sn = elt(V,n,n);
144           // Print(Sn) ;
145           SvV += abs(Sn) ;
146       }
147   SvV = SvV-1 ;
148   Print(SvV) ;
149
150   print(cycle);
151   }
152   return 0;
153   }

```

Appendix 2 定义 MPS 类

```

1   template<typename ASiteType, typename BSiteType>
2   class twochannelkondosimple : public SiteSet
3   {
4   public:
5
6   twochannelkondosimple() { }
7
8   twochannelkondosimple(int N,
9       Args const& args = Args::global())
10  {
11      auto sites = SiteStore(N);
12      for(int j = 1; j <= N; ++j)
13      {
14          if(j != (N+1)/2) sites.set(j,ASiteType({args,"SiteNumber=",j

```

```

    }));
15     else          sites.set(j,BSiteType({args,"SiteNumber=",j}));
16 }
17     SiteSet::init(std::move(sites));
18 }
19
20 twochannelkondosimple(IndexSet const& is)
21 {
22     int N = is.length();
23     auto sites = SiteStore(N);
24     for(auto j : range1(N))
25     {
26         if(j != (N+1)/2) sites.set(j,ASiteType(is(j)));
27         else          sites.set(j,BSiteType(is(j)));
28     }
29     SiteSet::init(std::move(sites));
30 }
31
32 void
33 read(std::istream& s)
34 {
35     int N = itensor::read<int>(s);
36     if(N > 0)
37     {
38         auto store = SiteStore(N);
39         for(int j = 1; j <= N; ++j)
40         {
41             auto I = Index{};
42             I.read(s);
43             if(j != (N+1)/2) store.set(j,ASiteType(I));
44             else          store.set(j,BSiteType(I));
45         }
46         init(std::move(store));
47     }
48 }

```

49

}

;

严格对角化程序（附录 2）

Appendix 严格对角化程序

该计算采用了 Quspin 严格对角化程序包，程序包来源于：

<https://quspin.github.io/QuSpin/>。我自己编写的少量格点时双通道近藤模型计算的程序代码如下所示：

```

1 from __future__ import print_function, division
2 import sys,os
3 # line 4 and line 5 below can be removed
4 qspin_path = os.path.join(os.getcwd(),"../..")
5 sys.path.insert(0,qspin_path)
6 # Hamiltonians and operators
7 from quspin.operators import hamiltonian
8 from quspin.basis import spinless_fermion_basis_1d, tensor_basis,
   spinless_fermion_basis_general, spin_basis_general, spin_basis_1d
9 # Hilbert space fermion and tensor bases
10 import numpy as np
11
12 ##### define model parameters #####
13 L=6 # fermion size
14 t=1 # fermion hopping
15 M=1 # spin size
16 J=1 # kondo hopping
17
18 # twochannelkondo consists of fermion and spin sites 2 spin chain and
   1 conducting fermion chain
19 # use 2*L spinless chain to represent L spinful chain
20 basis_1 = spinless_fermion_basis_1d(2*L,Nf=L)
21 basis_2= spinless_fermion_basis_1d(2*L,Nf=L)
22 basis_3 = spin_basis_1d(M,pauli=0)
23 basis = tensor_basis(basis_1, basis_2, basis_3)
24
25 # basis: |1100>|0101>|1001> fermionspinless(spinup)+fermionspinless(

```

```

    spindown)+spin0.5
26 # Now: kondo coupling S_i s_j j belongs to subspace basis_3
27 #     for operator S_i = (i)[cdagup*cdn+cdagdn*cup ; i*(cdagdn*cup-
    cdagupcdn) ; cdagup*cup-cdagdn*cdn]
28 #     subspace of up becomes basis_1(A) and subspace of dn becomes
    basis_2(B)
29 #     so we put S_i from (xyz) to (S_+ ,S_-, S_z,S_z) space
30 #     S_i = (subspace basis_1) (cdag ; c ; cdag*c(N(A)) ; I) * (
    subspace basis_2) (c ; cdag ; I ; cdag*c(N(B))) * (subspace
    basis_3)(S_x-iS_y ; S_x+iS_y ; S_z ;S_z )
31 # Now we can reconstruct kondo coupling through the four elements.
32 # print(basis)
33
34 # define site-coupling lists
35 # H= -t* sigma C_i*C_j <i,j> +J* S_i(fermion)* s_(1,2)(spin)
36 # hopping to the right
37 hop_right1 = [[-t,i,i+1] for i in range(L-1)]
38 # hopping to the left
39 hop_left1 = [[ t,i,i+1] for i in range(L-1)]
40 # hopping to the right
41 hop_right2 = [[-t,i+L,i+L+1] for i in range(L-1)]
42 # hopping to the left
43 hop_left2 = [[ t,i+L,i+L+1] for i in range(L-1)]
44 # Kondo coupling
45 kondo_list1 = [[ J,i,i,j] for i in range(2*L) for j in range(M)]
46 kondo_list2 = [[ -J,i,i,j] for i in range(2*L) for j in range(M)]
47
48 # create static lists
49 kin_static = [
50     ["+-||", hop_left1], # up hop left
51     ["-+||", hop_right1], # up hop right
52     ["|+-|", hop_left1], # down hop left
53     ["|-+|", hop_right1], # down hop right
54     ["+-||", hop_left2], # up hop left
55     ["-+||", hop_right2], # up hop right

```



```
56         ["|+-|", hop_left2], # down hop left
57         ["|-+|", hop_right2], # down hop right
58     ]
59 # Kondo coupling consists of the four elements mentioned earlier
60 jk_static_1 = [
61     ["+|-|-", kondo_list1], # Kondo coupling 1
62     ["-|+|+", kondo_list2], # Kondo coupling 1
63     ["n|I|z", kondo_list1], # Kondo coupling 1
64     ["I|n|z", kondo_list2], # Kondo coupling 1
65 ]
66 static = kin_static + jk_static_1
67
68 # set up hamiltonian dictionary and observable (imbalance I)
69 no_checks = dict(check_pcon=False, check_symm=False, check_herm=False)
70 H = hamiltonian(static, [], basis=basis, **no_checks)
71
72 # find ground state
73 [E], psi = H.eigsh(k=1, which="SA")
74 print( "Ground state energy = ", E )
75 print(psi)
```

致 谢

对于这次毕业论文的撰写，最需要感谢的是许霄琰老师，他在整个过程中都给予了我充分的帮助和支持，不仅耐心地为讲解物理上和程序上的不足，还对论文的改进提出宝贵的建议，而且还在我遇到困难时尽心地进行指点与解答。在此借毕业论文完成之际，表示由衷的感谢和敬意。同组的学长们向我介绍了纠缠的相关概念，为我编写程序提供了很多帮助，在此感谢他们。

本论文的计算结果得到了上海交通大学高性能计算中心的支持和帮助，在此还要感谢 Itensor 程序包与 Quspin 程序包相关开发者所提供的技术支持。

我是 2020 年加入的致远学院，当时的我对物理是完全的无知，完全的充满兴趣。看到那时致远学院录取的一批十人名单，我侥幸位列第八，顿感物理大门向我打开前方是一片坦途。回忆如过眼云烟，恍如隔世。我这四年在这样一个强大的集体中度过，我不时的因为能力不足而失落，我在无尽的物理海洋中沉浮，而我的未来逐渐的模糊却又逐渐的清晰起来。我必须要感谢年级主任吴晓玲老师以及致远学院的其它教务老师们，不仅减轻了我课业上的负担，还和我谈人生，谈远大前程。我逐渐认识到了学海无涯苦作舟，对物理更是如此。现在我预录取为交大的研究生，我在和凝聚态所的许老师做强关联体系的理论与计算研究，这是一个非常大的领域。我将来要深入我的课题，以及遍历我这个方向所有的知识，因为我认为做物理的人生目标应当是终身学习。

RESEARCH ON DENSITY MATRIX RENORMALIZATION GROUP CALCULATION OF TWO-CHANNEL KONDO MODEL

The Kondo problem has been a hot research topic in physics since the 1960s. This type of quantum impurity model refers to the interaction between magnetic impurities at low-dimensional quantum dots and the high-dimensional external environment. For example, the Kondo effect refers to conduction electrons exhibiting only a slight antiferromagnetic effect near the impurities at higher temperatures, and in contrast, as the temperature approaches zero, the impurity magnetic moment and a conduction electron magnetic moment strongly combine to form an overall nonmagnetic state. Moreover, there is a Kondo resonance effect, which is reflected in the presence of several periodic sharp peaks in conductivity at low temperatures.

The Hamiltonian of the two-channel Kondo model is as follows:

$$H = -t \sum_{i(chain1,chain2)\sigma} (c_{i\sigma}^+ c_{i+1\sigma} + h.c) + J \sum_{i(chain1,chain2)} S \cdot s_i \quad (1)$$

Two-channel Kondo model has various interesting physics,. For example, at the early stage of research people found that even at zero temperature, the model would have a finite entropy, corresponding to additional degrees of freedom. Later, this effect was found to be a result of the Majorana fermion .What conduction electrons couple is no longer a single impurity operator, but the sum of production and annihilation operators. This is also the definition of the Majorana operator. The two-channel Kondo model does not only exist in theory and simulation, its existence and physical properties have been confirmed by experiments. More physics comes from the two-channel kondo effect coupling with other interactions. For instance, when considering actual one-dimensional chains, interactions between multiple quantum dot impurities, such as the RKKY spin-orbit coupling mechanism, may destroy the original Majorana structure.

I'm going to calculate the properties of entanglement in a two-channel Kondo model. There' s article using the analytical results of conformal field theory to derive the form on the entanglement of the two-channel Kondo model. What is simulated is the relationship

between entanglement entropy and the system size. That is, several grid points in the middle of the system including local spin are selected as subsystems to calculate the entanglement entropy. By changing the size of the subsystem, from only containing local spins to the entire two-channel Kondo model, the entanglement between the two subsystems is calculated as the size of the subsystem changes, which reflects the structure of the entanglement entropy. I will observe the change of entanglement entropy by changing the value of kondo interaction, which can determine the nature of the phase transition and help master more physics of the two-channel Kondo model.

The method I use is the density matrix renormalization group (DMRG) method. The Numerical Renormalization Group (NRG) algorithm was proposed by Wilson in the 1970s to solve the low-energy physical properties of the spin chain model. By applying the renormalization group ideas, the NRG eliminates some high-energy parts in the Hamiltonian matrix, while retaining the dimensions of the low-energy parts. During such repeated operations, the energy will converge, and the obtained fixed point is the ground state energy. Later, White introduced the DMRG approach to solve the large errors of NRG when introducing lattice interactions or selecting specific boundary conditions. The idea of DMRG is that since the sum of the density matrix eigenvalues is one, the value of k can be chosen cleverly so that the sum of the first k eigenvalues is close to one, and there will always be some states close to zero. This situation occurs frequently in condensed matter physics, especially in systems at zero temperature. In the case where the ground state is non-degenerate, some eigenvalues of the density matrix may be zero, corresponding to pure states of the ground state. To conclude, DMRG cutoff density matrix instead of Hamiltonian matrix to decrease the error. The basic approach of DMRG also uses the idea of renormalization, analogous to the method of intercepting the Hamiltonian matrix, we still start from a small number of grid points, expand the Hamiltonian by adding points, and obtain the ground state energy and eigenvalues after diagonalization to construct a density matrix. Then do the truncation and repeat the process. In addition, for a one-dimensional finite system, if only one system block is selected as the growth block, the physical effects brought by the remaining parts will be ignored, and there will not be enough iterations during the growth process. Instead, the system should be divided into two blocks: system and environment, and growth should be done separately. When forming the Hamiltonian matrix, it is necessary to combine two blocks to form a super

block, perform diagonalization, and obtain the density matrix of the super block, thereby obtaining the reduced density matrix of the system block, truncate the reduced density matrix, and then grow the system block and environment block, repeat the above process and we will have the ground state energy for infinite systems. The approach for finite systems is similar after considering sweeps of the two blocks. The entanglement entropy plays an important role in the error of the DMRG approach. The core idea of the DMRG approach is to reduce the degrees of freedom of the system by retaining the most important entanglements in the system, thereby reducing the computational complexity. If the entanglement of the system does decay very quickly with respect to the dimension number of the matrix, then the error caused by truncation will be very small.

Matrix Product States (MPS) are a state representation method used to describe quantum many-body systems. Matrix product states are constructed through the product of a series of tensors, each tensor corresponding to a degree of freedom in the system, and describe the entangled structure of the quantum state through specific constraints. By limiting the entanglement index and utilizing the orthogonality of tensors, matrix product states can effectively describe the entangled structure of quantum many-body systems and provide a compact representation. For processing larger lattice system matrix product states, the tensor is stored in the operation instead of the state vector, which can reduce the complexity of the storage in the operation. This study is based on the use of the Itensor program (<https://www.itensor.org/>). The Itensor package provides a method for constructing matrix product states. It uses the fast representation of tensor networks to quickly express the role of the Hamiltonian on the matrix product state, thereby solving key physical quantities such as ground state energy and entanglement entropy.

Before using Itensor package to of the 2CK problem, I start from considering a limited number of particles to find an analytical solution. Specifically, I used two methods to solve it. The first is to use extreme cases to solve. I considered the situation where the Kondo interaction parameter J is equal to zero or the conduction electron transition parameter t is equal to zero. Secondly, I also used the Exact Diagonalization (ED) package Quspin. This method can obtain accurate results by accurately calculating the eigenstates and eigenvalues of the system. Following the ED approach, the eigenvalue of the reduced density matrix is calculated. For example, solving the Hamiltonian matrix at 8 dimensions, when $J=1, t=0$, the

value of entanglement entropy for three sites is 0.636514. The same result can be obtained by using the DMRG program in the appendix to substitute the total number of grid points as three, ignoring the coupling between electrons, and setting the Kondo interaction parameter to $J=1$.

Next I used the Itensor package. The DMRG program used in this study relies on the Itensor tensor calculation package, using the Intel Mkl math library. The first program running platform is the local Windows wsl2 virtual environment; the second is the Siyuan No. 1 supercomputing platform of Shanghai Jiao Tong University. The calculation results of this article have received support and help from the High Performance Computing Center of Shanghai Jiao Tong University. The initial state may play a role in the calculation. This initial state needs to satisfy some restrictions on orthogonal basis parameters. In order to comply with the laws of physics, we chose the initial state with the total spin of the conduction electron being zero. In this case, I chose the half-filled orthogonal basis as the initial state. If we look at the Hamiltonian matrix composed of an orthogonal basis without any parameter restrictions, we see that the Hamiltonian can be partitioned according to different total number of particles. This shows that choosing different total particle numbers has a huge impact on the ground state energy. There are two main reasons why this is a reasonable choice when the system is half-filled. First, the half-filled state has completely symmetrical properties, which makes calculations much simpler. Secondly, the half-filled state has rich properties in physics, among which the Neel state is a common choice.

By applying the density matrix renormalization group (DMRG) method to calculate the two-channel Kondo model, we obtain the relationship between the ground state Kondo partial energy and the entanglement entropy as a function of Kondo interaction strength. Preliminary results show that the ground state energy of the Kondo part shows a decreasing trend, which may be approximately a linear relationship. At the same time, when the Kondo interaction strength J approaches the limit, the entanglement entropy tends to be saturated, and there is an asymptote. When J is small, the entanglement entropy gradually increases from zero, but it does not complete it all at once, but goes through multiple entanglement entropy platforms.

Considering the Asymptotic behavior of entanglement entropy. The rising pattern of entanglement entropy is that as the Kondo interaction increases, the entanglement entropy rises rapidly and reaches saturation, corresponding to the Kondo singlet state, of which the entan-

glement entropy is $\ln 2$, just as the kondo singlet predicts. Then the entanglement entropy will slowly change, and at this time the phase transition is approaching the end. The approximate position corresponding to the end of the rising period is around $J/t=2.2$, indicating that a phase transition from the antiferromagnetic Neel state to the Kondo singlet state occurred in this interval of 0 to 2.2.

Considering the effect of system size, it was found that when the system size is small, the entanglement entropy will appear a "platform". When the system size approaches the thermodynamic limit, this platform gradually disappears and the entanglement entropy rises smoothly, which is result of finite size effect. Under the thermodynamic limit, a large number of eigenstates correspond to energies near the ground state, but due to different spin arrangements, they correspond to different entanglement entropies. The ground state changes continuously among these states as the Kondo interaction increases. Since the ground state is also formed by the degeneracy of a large number of these states, the corresponding entanglement entropy of the ground state also changes continuously. In the case of finite grid points, as the Kondo interaction increases, the ground state changes discretely in these states. Corresponding to a certain Kondo interaction interval, a certain type of spin arrangement mode may be dominant, and the corresponding ground state entanglement entropy also changes discretely., embodied in these "platforms".

Considering the effect of boundary condition, the rising behavior of the entanglement entropy of the periodic boundary condition of the two-channel Kondo model is the smoothest, and the entanglement entropy of the periodic boundary condition of the double-channel or single-channel model rises more smoothly than that of the open boundary condition. The periodic boundary conditions ensure the discrete translational symmetry of the system, allowing the head and tail electrons to conduct each other, which actually weakens the finite size effect of the system, making the system's entanglement entropy rise most smoothly under periodic boundary conditions. Considering the distribution of entanglement. I calculated negativity. There is no symmetry breaking during the phase transition in the two-channel Kondo model, and the entanglement distribution between the two chains is uniform. Regarding the distribution of entanglement, both the distribution of Kondo energy in the left and right channels and the negativity of entanglement between the two channels are consistent in the stable phase. This is actually consistent with physical reality and indicates that the partial

transposition process does not introduce new singular eigenvalues, and all entanglement can be described by entanglement entropy. The entanglement brought by entanglement entropy is the main form of entanglement between the local spins and other parts of the system. It is not appropriate to discuss the two chains separately because it will not introduce new singular entanglement.

To conclude, the two-channel Kondo model has unique ground state and entangled properties. Through research on the density matrix renormalization group algorithm, I successfully constructed a matrix product operator and a matrix product state composed of tensor network states, and used the density matrix renormalization group algorithm to process one-dimensional two-channel Kondo The entangled nature of the model. I first used analytical methods to obtain the ground state and entanglement entropy of the two-channel Kondo model under a small number of lattice points, thus verifying the correctness of the density matrix renormalization group algorithm I wrote. Then apply the program to different parameters J/t , different system sizes, and different boundary conditions to obtain the properties of entanglement entropy. I think that the asymptotic behavior of entanglement entropy corresponds to Kondo singlets, the platform of entanglement entropy corresponds to the finite size effect, the results of applying periodic boundary conditions are better than open boundary conditions and the distribution of entanglement between two chains.