

Sistemas fortemente correlacionados.

Refs.: Cap. 16, Coleman,

Sec. 9.3, Bruus

Secs. 1.4.2, 6.1 e 6.2, Mahan

ideia: introdução modelos de Anderson e Rondo.

· Introdução:

· sistemas onde interação partícula-partícula \gg energia cinética;

Exemplos:

(1) cupratos: isolantes de Mott;

⊕ dopagem \rightarrow supercondutividade de alta temperatura crítica;

Ex.: $\text{La}_2\text{CuO}_4 \rightarrow \text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$

(2) férmions pesados: elétrons de condução

⊕ momentos magnéticos localizados

\rightarrow quasipartículas c/ massa efetiva \gg massa elétron;

Ex.: UBe_{13} , CeAl_3 , CeCu_2Si_2 , U_2Zn_{17}

- supercondutividade não-convencional;

(3) sistema Hall quântico fracionário:

- gás bidimensional de elétrons (2DEG) sob campo magnético externo;
- 2DEG: heteroestruturas semicondutoras;
- nível de Landau de mais baixa energia parcialmente preenchido: fator de preenchimento $\nu = 1/3$; $1/5$;
- quasipartículas c/ carga e energia fracionárias:

(4) quantum dots: átomos artificiais em materiais semicondutores;

controle externo "gate voltage"

↳ Coulomb blockade: elétrons adicionados one-by-one.

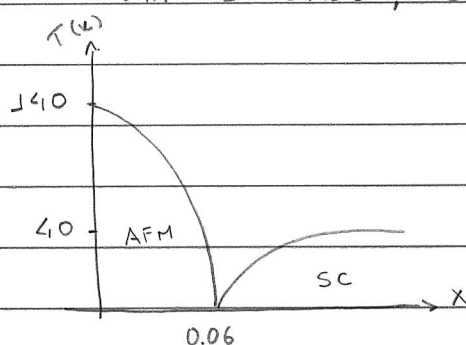
(5) átomos frios: interação partícula-partícula controlada via campo magnético externo;

possíveis fases: BEC

BEC-BCS crossover

(6) supercondutores a base de Fe:

Ex.: LaFeAsO ; BaFe_2As_2 ; NaFeAs ; FeSe ;



: diagrama de fases $\text{CeFeAsO}_{1-x}\text{F}_x$

notas: cupratos:

v.s.

Fe-SC:

modelo

plenos CuO_2

plenos FeAs

light binding

Cu^{+2} : $3d^9$

Fe^{+2} : $3d^6$ →

c/ vários

isolante: parent compound:

metal

orbitais

Refs.: Rev. Mod. Phys. 83, 1589 (2011);

Rep. Prog. Phys. 80, 014503 (2017).

· próxima etapa: breve introdução sistemas formados por elétrons de condução

⊕ momentos magnéticos locais;

· momentos magnéticos locais ~ átomos c/ orbitais eletrônicos tipo d ou f parcialmente preenchidos;

"grau de localização": $5d < 4d < 3d < 5f < 4f$

· característica materiais que apresentam momentos magnéticos locais: susceptibilidade magnética ~ Curie-Weiss:

$$\chi \sim n_i \frac{M^2}{3(T+\theta)} ; T \gg 1 \quad (367.1)$$

onde: n_i : concentração momentos magnéticos,

$$M^2 = g^2 \mu_B^2 J(J+1),$$

$$\vec{J} = \vec{L} + \vec{S},$$

μ_B : magneton de Bohr,

g : fator g magnético,

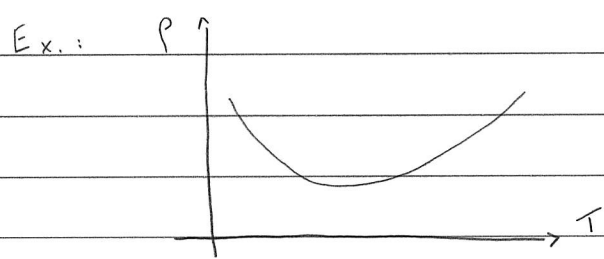
θ : temperatura de Curie-Weiss: $\theta > 0$: AFM

$\theta < 0$: FM

· 1ª observação experimental:

de Haas, de Boer, and van den Berg (1933):

∃ mínimo na resistividade de Cu, Au, Ag;



Mo_{0.8}Nb_{0.2} ⊕ 1% Fe : locais!
: Efeito Kondo!

(367.2)

: Phys. Rev. 135, A1041 (1964)

• modelo de Anderson (1961): acoplamento momento magnético local e elétrons de condução: AFM;

• Kondo (1964):

- confirmação resultado Anderson: acoplamento AFM;

- determinação taxa de espalhamento elétrons de condução, ordem superior aproximação de Born

↳ T mínimo na resistividade!

temperatura característica:

$$T_K \sim D^{-1/2} J \rho \quad (368.1)$$

onde: $D = 1/2$ largura banda elétrons de condução,

J : acoplamento spin mom. mag. local -

- " elétrons condução,

ρ : densidade de estados " " ;

$T > T_K$: mom. mag. locais livres

(368.2)

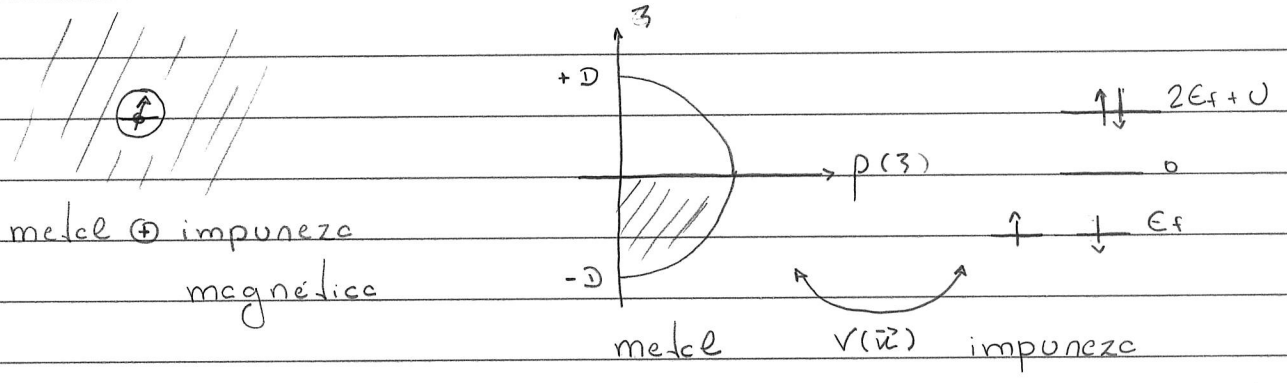
$T < T_K$: " " " : estado de singleto;

Obs.: $T = T_K$: crossover, NOT transição de fase!

Obs.: Coleman: Eq. (368.2): similar liberdade assintótica ρ / quarks!

• Modelo de Anderson (1961):

ideia: descrição (host) metal \oplus impureza (ion isolado) magnético;



(370.1)

· "parâmetros" do modelo:

D : $1/2$ largura banda elétrons de condução,

$p(\epsilon)$: densidade de estados " " " ,

$E_f < 0$: nível energia impureza,

$U > 0$: energia repulsão local,

$$\Gamma(\epsilon) = \pi \sum_{\vec{r}, \alpha} |V(\vec{r})|^2 \delta(\epsilon - \epsilon_{\vec{r}}) = 2\pi \int_{-D}^{+D} dz p(z) |V(z)|^2 \delta(\epsilon - z) \quad (370.2)$$

$$= 2\pi p(\epsilon) |V(\epsilon)|^2 \theta(D - |\epsilon|) : \text{função de hibridização}$$

· próxima etapa: consideren 2 limites (369.4):

(1) limite atômico: $V(\vec{r}) \rightarrow 0$

(2) formação estados ligados virtuais: $U \rightarrow 0$!

(1) limite atômico:

nesse caso:

$$H_{\text{atômico}} = H_f + H_u$$

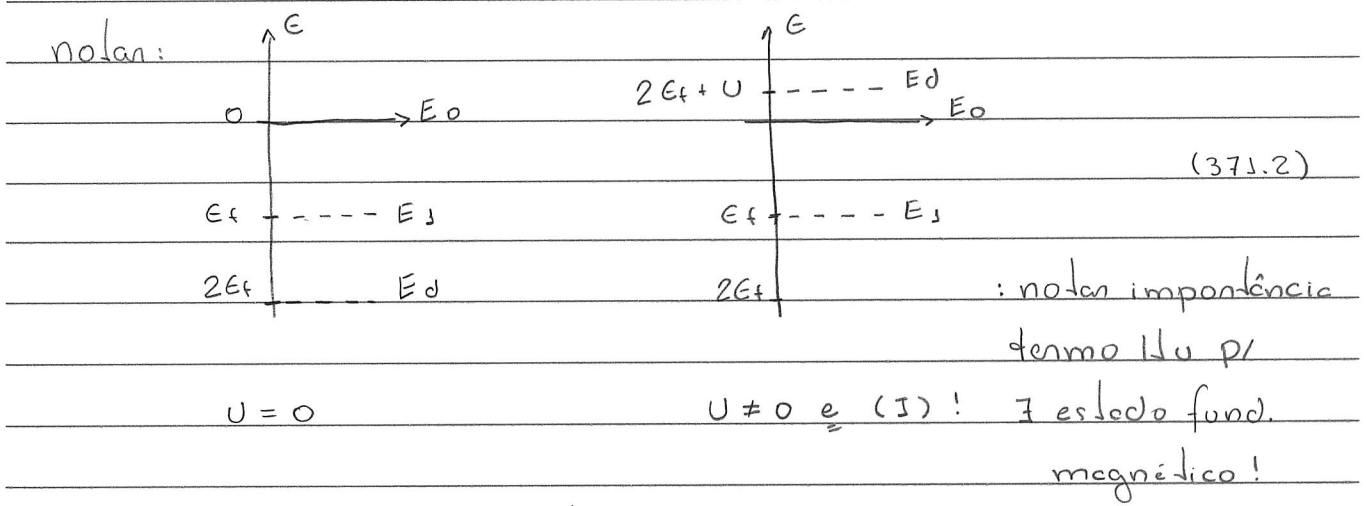
temos que:

autoestados	autovalores	
$ 0\rangle$	$E_0 = 2E_f + U$	} estados não-magnéticos
$ 10\rangle$	$E_0 = 0$	
$ 1\uparrow\rangle, 1\downarrow\rangle$	$E_1 = E_f$	} " magnético (37.1)

↳ Q.: Qual relação entre E_f e U tal que estado fundamental magnético?

- notas:
- se estado fundamental = $|0\rangle$ ou $|10\rangle \rightarrow H_{hyb} = 0 : (I)$
 - " " " " = $|1\uparrow\rangle, |1\downarrow\rangle \rightarrow H_{hyb} \neq 0 : (II)$

como $E_f < 0 \rightarrow$ se $2E_f + U > E_f \rightarrow U > -E_f > 0 \rightarrow (I)!$



(2) formação de estados vinculais: resonant level model,

pr detalhes: veja P.03, Lista 3!

solução alternativa Coleman: solução diagramática:

considerar:

ω : $G_f^0(\omega) = \frac{1}{\omega - E_f}$: propagação impureza

\vec{k}, ω : $G^0(\vec{k}, \omega) = \frac{1}{\omega - \epsilon_{\vec{k}}}$: " elétrons de condução

(372.1)

onde $\omega \rightarrow \omega \pm i\eta$

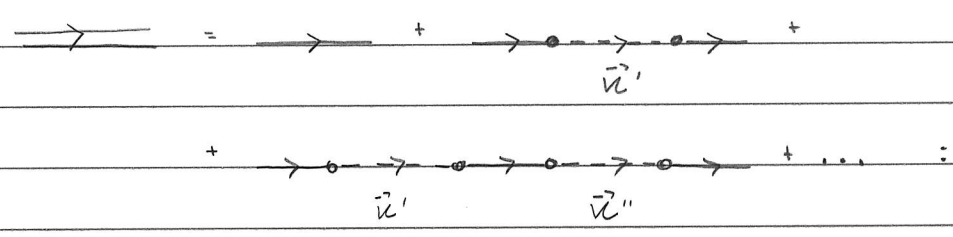
hipótese: $V(\vec{k}) = V^*(\vec{k}) = V$

$L \rightarrow H_{hyb} = \begin{array}{c} \checkmark \\ \bullet \end{array} \rightarrow \text{ou} \begin{array}{c} \checkmark \\ \bullet \end{array} \rightarrow$ (372.2)

nesse caso, é interessante considerar a autoenergia:

$\Sigma(\omega) = \begin{array}{c} \checkmark \\ \bullet \end{array} \begin{array}{c} \checkmark \\ \bullet \end{array} = \sum_{\vec{k}} V^2 G^0(\vec{k}, \omega) = \sum_{\vec{k}} \frac{V^2}{\omega - \epsilon_{\vec{k}}}$ (372.3)

a função de Green p/ os elétrons-f pode ser escrita como:



: processos de espalhamento (onde $n_f \sim$ elétron f \rightarrow banda de condução \rightarrow elétron f!)

$L \rightarrow \text{double arrow} = \text{single arrow} + \left(\text{single arrow with dot} + \text{single arrow with two dots} + \dots \right)$ (372.4)

ou

$$G_f(\omega) = G_f^0(\omega) \left(1 + G_f^0 Z + (G_f^0 Z)^2 + \dots \right)$$

$$\frac{1}{1 - G_f^0(\omega) Z(\omega)}$$

$$\hookrightarrow G_f(\omega) = \frac{1}{\omega - \epsilon_f - Z(\omega)} \quad (373.1)$$

notan Eq. (372.3):

$$Z(\omega) = \int_{-D}^D d\zeta \rho(\zeta) \frac{v^2}{\omega - \zeta} = \frac{1}{2\pi} \int_{-D}^D d\zeta \underbrace{2\pi \rho(\zeta) v^2}_{= \Gamma(\zeta)} \frac{1}{\omega - \zeta}$$

Eq. (370.2) ↑

$$= \int_{-D}^{+D} \frac{d\zeta}{2\pi} \cdot \frac{\Gamma(\zeta)}{\omega - \zeta}$$

$$\hookrightarrow Z^R(\omega) = \int_{-D}^{+D} \frac{d\zeta}{2\pi} \cdot \frac{\Gamma(\zeta)}{\omega - \zeta + i0}$$

$$= P \int_{-D}^{+D} \frac{d\zeta}{2\pi} \cdot \frac{\Gamma(\zeta)}{\omega - \zeta} - \frac{i}{2} \int_{-D}^{+D} d\zeta \Gamma(\zeta) \delta(\omega - \zeta) \quad (373.2)$$

$\Gamma(\omega)$

hipotese: $\Gamma(\omega) = \Gamma = cte, -D \leq \omega \leq D$

$$\hookrightarrow Z^R(\omega) = \frac{\Gamma}{2\pi} \cdot \ln \left| \frac{\omega + D}{\omega - D} \right| - \frac{i\Gamma}{2}, -D \leq \omega \leq D$$

$$\approx O(\omega/D) \approx cte \rightarrow Re Z^R(\omega) = cte \quad (373.3)$$

↳ Eqs. (373.1) e (373.3):

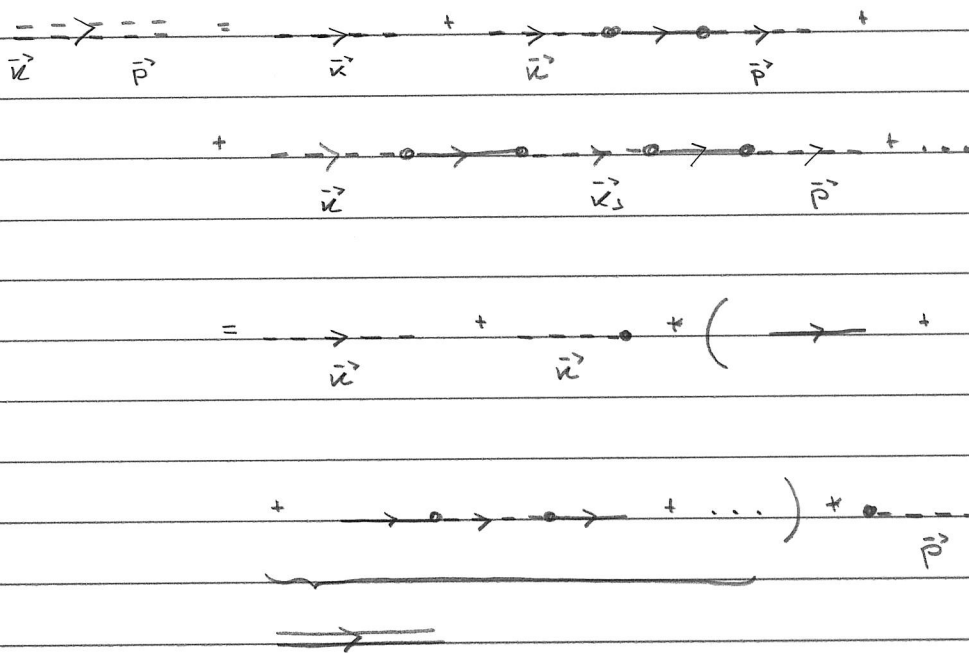
$$G_f^R(\omega) = \frac{1}{\omega - \bar{E}_f + i\Gamma/2}; \quad \bar{E}_f = E_f + Re\tau^R \quad (374.1)$$

↳ função espectral (288.3):

$$\rho_f(\omega) = -2 \text{Im} G_f^R(\omega) = \frac{\Gamma}{(\omega - \bar{E}_f)^2 + (\Gamma/2)^2} \quad (374.1)$$

: densidade de estados nivel impureza = lorentziana, centro \bar{E}_f e largura Γ !

• função de Green pr os elétrons de condução:
similar Eq. (372.4), temos que:



ou

$$G(\vec{v}, \vec{p}, \omega) = S_{\vec{v}, \vec{p}} G^0(\vec{v}, \omega) + G^0(\vec{v}, \omega) \underbrace{V^2 G_f(\omega)}_{\equiv T(\omega) : \text{matriz-}\hat{T}!} G^0(\vec{p}, \omega) \quad (374.2)$$

lembrar espalhamento:

$$S(\omega) = e^{2i\delta(\omega)} = 1 - 2\pi i \rho(\omega) T(\omega - i\eta)$$

↑
matriz- \hat{S}

verifica-se que (veja Sec 16.4.2, Coleman):

$$\delta f(\omega) = \cot^{-1} \left(\frac{\bar{E}_f - \omega}{\Gamma/2} \right) = \tan^{-1} \left(\frac{\Gamma/2}{\bar{E}_f - \omega} \right); \quad (375.1)$$

: característica espalhamento ressonante:
formação estado ligado virtual!

· próxima etapa: solução campo-médio p/ modelo de Anderson;

· como: $n_{f\uparrow} = \langle n_{f\uparrow} \rangle + (n_{f\uparrow} - \langle n_{f\uparrow} \rangle)$

e $n_{f\downarrow} = \langle n_{f\downarrow} \rangle + (n_{f\downarrow} - \langle n_{f\downarrow} \rangle)$

$\hookrightarrow H_0^{MF} \approx -U \langle n_{f\uparrow} \rangle \langle n_{f\downarrow} \rangle + U \langle n_{f\uparrow} \rangle n_{f\downarrow} + U \langle n_{f\downarrow} \rangle n_{f\uparrow} + O(S_0^2)$

\hookrightarrow Eq. (369.2):

$$\begin{aligned} H_f + H_0^{MF} &= (E_f + U \langle n_{f\downarrow} \rangle) f_{f\uparrow}^\dagger f_{f\uparrow} + (E_f + U \langle n_{f\uparrow} \rangle) f_{f\downarrow}^\dagger f_{f\downarrow} \\ &= \sum_{\alpha} E_{f,\alpha} f_{\alpha}^\dagger f_{\alpha} \end{aligned}$$

\hookrightarrow Eq. (369.4): $H^{MF} = H_c + H_{hyb} + H_f + H_0^{MF}$:

(375.2)

: similar limite (2) c/ $E_f \rightarrow E_{f,\alpha}$!

\hookrightarrow Eqs. (374.1) e (375.2):

$$G_{f\alpha}^R(\omega) = \frac{1}{\omega - E_{f,\alpha} + i\Gamma/2}$$

(376.1)

onde: $E_{f,\alpha} = \bar{E}_f + U \langle n_{f,-\alpha} \rangle \equiv E_f + U \langle n_{f,-\alpha} \rangle$

lembrando Eqs. (251.1) e (292.2):

$$\langle n_{f\alpha} \rangle = \frac{1}{\beta \hbar} \sum_n e^{i\omega_n \tau} G_{f\alpha}(\vec{r}, \omega_n)$$

$$= \int \frac{d\omega}{2\pi} \rho_{f\alpha}(\vec{r}, \omega) \underbrace{\frac{1}{\beta \hbar} \sum_n e^{i\omega_n \tau} \frac{1}{i\omega_n - \omega}}_{\rho_{FD}(\omega)}$$

pt o nivel de impureza, temos que:

$$\langle n_{f\alpha} \rangle = \int \frac{d\omega}{2\pi} \rho_{f\alpha}(\omega) \rho_{FD}(\omega) \tag{376.2}$$

pt $\tau=0$ e considerando $\mathcal{D} \rightarrow +\infty$, temos que:

$$\langle n_{f\alpha} \rangle \approx \int_{-\infty}^0 \frac{d\omega}{2\pi} \frac{\Gamma}{(\omega - E_{f,\alpha})^2 + (\Gamma/2)^2} \tag{0\leftarrow, pois \Gamma \ll \mathcal{D}}$$

$$= -\frac{1}{2} - \frac{1}{\pi} \tan^{-1} \left(\frac{2E_{f,\alpha}}{\Gamma} \right)$$

$$\hookrightarrow \frac{2E_{f,\alpha}}{\Gamma} = \cot(\pi \langle n_{f\alpha} \rangle)$$

(376.3)

$$\text{ou} \quad \langle n_{f\alpha} \rangle = \frac{1}{\pi} \cot^{-1} \left(\frac{E_f + U \langle n_{f,-\alpha} \rangle}{\Gamma/2} \right)$$

• p/ solução Eq. (376.3), é interessante definir:

$$n_f = \langle n_{f\uparrow} \rangle + \langle n_{f\downarrow} \rangle \quad ; \quad \text{ocupação nível } f$$

≡

$$M = \langle n_{f\uparrow} \rangle - \langle n_{f\downarrow} \rangle \quad ; \quad \text{magnetização " "}$$

↳ Eqs. (376.3) e (377.1):

$$n_f = \frac{1}{\pi} \sum_{\alpha} \cot^{-1} \left(\frac{1}{\Gamma/2} \cdot (E_f + U(n_f - \alpha M)/2) \right) \quad (377.2)$$

$$M = \frac{1}{\pi} \sum_{\alpha} \alpha \cot^{-1} \left(\frac{1}{\Gamma/2} \cdot (E_f + U(n_f - \alpha M)/2) \right) \quad (377.3)$$

ideia: determinar U_c tal que p/ $U > U_c$, estado fundamental impuneza = estado magnético; Lembra Fig. (371.2);

notas: Eq. (377.2) p/ $M \rightarrow 0^+ \rightarrow \frac{E_f + U n_f / 2}{\Gamma/2} = \cot \left(\frac{\pi n_f}{2} \right);$

como $\frac{d}{dx} \cot^{-1}(x) = \frac{-1}{1+x^2}$, a expansão Eq. (377.3) em torno

$M = 0$ e dada por:

$$M \approx \frac{M \cdot U}{\pi \Gamma/2} \frac{-1}{1 + \left(\frac{E_f + U n_f / 2}{\Gamma/2} \right)^2} = \frac{M \cdot U}{\pi \Gamma/2} \sin^2 \left(\frac{\pi n_f}{2} \right)$$

p/ $M \rightarrow 0^+$, temos que:

$$1 = \frac{U_c \sin^2 \left(\frac{\pi n_f}{2} \right)}{\pi \Gamma/2} \quad (377.4)$$

como, p/ estado impureza magnético $n_f = 1$, temos que:

$$U_c = \pi \frac{\Gamma}{2} \tag{378.1}$$

notas: densidade de estados nivel de impureza f p/ $U > U_c$:

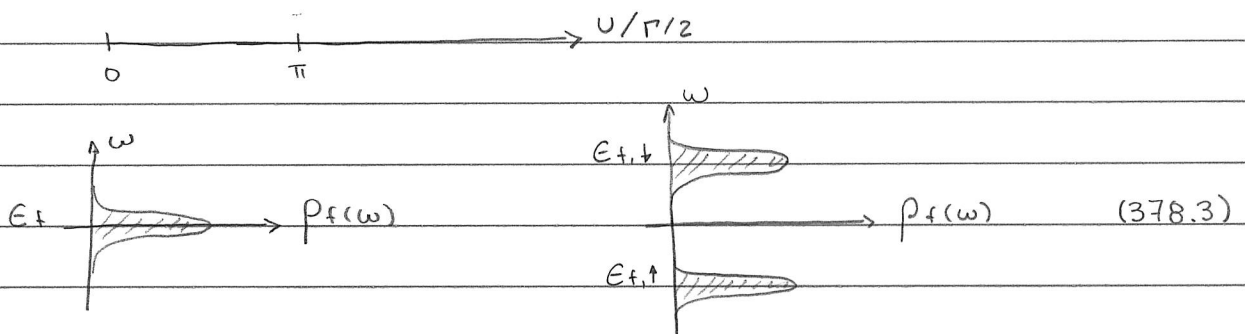
$$\begin{aligned} \rho_f(\omega) &= \sum_{\alpha} -2 \text{Im} G_{f,\alpha}^R(\omega) \\ &= \frac{\Gamma}{(\omega - E_{f,\uparrow})^2 + (\Gamma/2)^2} + \frac{\Gamma}{(\omega - E_{f,\downarrow})^2 + (\Gamma/2)^2} \end{aligned} \tag{378.2}$$

onde $E_{f,\uparrow} = E_f + U \langle n_{f,\uparrow} \rangle = E_f + \frac{1}{2} U n_f - \frac{1}{2} U M$

$E_{f,\downarrow} = E_f + U \langle n_{f,\downarrow} \rangle = E_f + \frac{1}{2} U n_f + \frac{1}{2} U M$

: comparar Eq. (374.1)

notas: Eqs. (374.1) e (378.2):



• Modelo de Wondo:

ideia: descrição sistema = elétrons de condução \oplus

impureza magnética;

" impureza magnética: isolante

(lembra modelo Heisenberg);

proposta Zener (1951):

$$H_{sd} = \sum_{\vec{u}, \vec{p}} J_{\vec{u}, \vec{p}} \left(S^+ C_{\vec{u}\uparrow}^\dagger C_{\vec{p}\uparrow} + S^- C_{\vec{u}\uparrow}^\dagger C_{\vec{p}\downarrow} + S^z (C_{\vec{u}\uparrow}^\dagger C_{\vec{p}\uparrow} - C_{\vec{u}\downarrow}^\dagger C_{\vec{p}\downarrow}) \right), \quad (379.1)$$

onde S^+, S^-, S^z : ops. spins impureza (orbital $d_{\text{ou}f}$)

↳ modelo Wondo:

$$H = \sum_{\vec{u}\alpha} \epsilon_{\vec{u}} C_{\vec{u}\alpha}^\dagger C_{\vec{u}\alpha} + H_{sd} \quad (379.2)$$

Obs.: é possível derivar Eq. (379.1) via procedimento similar

utilizado no Ex. 4, Cap. 2 (veja pg. 72);

pt. detalhes, veja Sec. 1.4, Mahan

companas: espalhamento elétrons de condução (orbitais-s)

via interação sd (379.1)

≡ " potencial (s-conpo) ~ impureza não-magnética:

$$\hat{V}_{\text{IMP}} = \sum_{\vec{u}, \vec{p}} \sum_{\alpha} \underbrace{\langle \vec{u}\alpha | V_{\text{IMP}} | \vec{p}\alpha \rangle}_{= V_{\vec{u}, \vec{p}}} C_{\vec{u}\alpha}^\dagger C_{\vec{p}\alpha} \quad (379.3)$$

• ideia: derivar o modelo de Rondo a partir do modelo de Anderson (369.4) via transformação de Schrieffer-Wolff

(p/ detalhes, veja Sec. 2.4, Altland; Sec. 1.7, Hewson)

considerar projetores $P_n \sim$ subespaço c/ \underline{n} elétrons no nível f de impureza:

$$P_0 = (1 - n_{f\uparrow})(1 - n_{f\downarrow})$$

$$P_1 = (1 - n_{f\uparrow})n_{f\downarrow} + (1 - n_{f\downarrow})n_{f\uparrow} \quad (380.1)$$

$$P_2 = n_{f\uparrow}n_{f\downarrow}$$

notar: $H|\psi\rangle = E|\psi\rangle$

$$\hookrightarrow P_m H |\psi\rangle = \sum_n P_m H P_n |\psi\rangle = E P_m |\psi\rangle = E |\psi_m\rangle$$

$P_n |\psi_n\rangle$: projeção $|\psi\rangle$ no subespaço c/ \underline{n} elétrons no nível f !

$$\hookrightarrow \sum_{n=0}^2 H_{mn} |\psi_n\rangle = E |\psi_m\rangle \quad ; \quad H_{mn} = P_m H P_n \quad (380.2)$$

• como $H_{nn} \sim$ ocupação fixa do nível f , p/ hamiltoniano (369.4), temos que:

$$H_{00} = H_c \quad ; \quad H_{11} = H_c + E_f \quad ; \quad H_{22} = H_c + 2E_f + U \quad (380.3)$$

• como H_{nm} c/ $n \neq m \sim$ alternância ocupação do nível f

$$\hookrightarrow H_{nm} \sim H_{\text{hyb}};$$

como $H_{hyb} \sim$ adição/nemoção $\frac{1}{2}$ elétron nível- f

$$\hookrightarrow H_{02} = H_{20} = 0;$$

• como $H_{03} = P_0 V P_3 \sim$ nemoção $\downarrow e^-$

$$\hookrightarrow H_{03} = \sum_{\vec{r}_\alpha} v(\vec{r}_\alpha) C_{\vec{r}_\alpha}^\dagger (1 - n_{f,-\alpha}) f_\alpha$$

! necessário pr. projetor $P_0 \neq 0$

similares:

(381.1)

$$H_{10} = P_1 H P_0 = \sum_{\vec{r}_\alpha} v^\dagger(\vec{r}_\alpha) f_\alpha^\dagger (1 - n_{f,-\alpha}) C_{\vec{r}_\alpha} = H_{01}^\dagger$$

$$\cdot H_{12} = P_1 H P_2 = \sum_{\vec{r}_\alpha} v(\vec{r}_\alpha) C_{\vec{r}_\alpha}^\dagger n_{f,-\alpha} f_\alpha$$

(381.2)

$$\cdot H_{21} = P_2 H P_1 = \sum_{\vec{r}_\alpha} v^\dagger(\vec{r}_\alpha) f_\alpha^\dagger n_{f,-\alpha} C_{\vec{r}_\alpha} = H_{12}^\dagger$$

• notas: Eq. (380.2) pode ser escrita como:

$$\begin{pmatrix} H_{00} & H_{01} & 0 \\ H_{10} & H_{11} & H_{12} \\ 0 & H_{21} & H_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} |\psi_0\rangle \\ |\psi_1\rangle \\ |\psi_2\rangle \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} |\psi_0\rangle \\ |\psi_1\rangle \\ |\psi_2\rangle \end{pmatrix}$$

ou

$$H_{01} |\psi_1\rangle = (E - H_{00}) |\psi_0\rangle$$

$$H_{10} |\psi_0\rangle + H_{11} |\psi_1\rangle + H_{12} |\psi_2\rangle = E |\psi_1\rangle \quad (381.3)$$

$$H_{21} |\psi_1\rangle = (E - H_{22}) |\psi_2\rangle$$

pr o subespaço P_1 (nível $f \sim$ estado magnético), temos que:

$$\underbrace{\left(H_{10} \frac{1}{E - H_{00}} H_{01} + H_{11} + H_{12} \frac{1}{E - H_{22}} H_{21} \right)}_{(I)} |\psi_1\rangle = E |\psi_1\rangle \quad (382.1)$$

considerando Eq. (369.4) como:

$$H = \underbrace{H_c + H_f + H_0}_{H_0} + \underbrace{H_{hyb}}_{\text{perturbação}}$$

\hookrightarrow podemos substituir $E \rightarrow E^{(0)}$ em (I);

pr subespaço P_1 , temos que:

$$E \rightarrow E^{(0)} = E_f + \sum_{\vec{q}, \mu} \zeta_{\vec{q}} n_{\vec{q}, \mu} \quad (382.2)$$

• Eqs. (380.3), (381.1), (381.2) e (382.1):

$$H_{10} \frac{1}{E^{(0)} - H_{00}} H_{01} |\psi_1\rangle = \sum_{\vec{u}, \vec{p}} \sum_{\alpha, \beta} V^*(\vec{p}) V(\vec{u}) +$$

$$+ f_{\beta}^{\dagger} (1 - n_{f, \beta}) C_{\vec{p}\beta} \frac{1}{E^{(0)} - H_c} \underbrace{C_{\vec{u}\alpha}^{\dagger} (1 - n_{f, \alpha}) f_{\alpha}}_{|\Phi\rangle} |\psi_1\rangle$$

$$\text{como } H_c |\Phi\rangle = \sum_{\vec{q} \neq \vec{u}, \mu} \zeta_{\vec{q}} n_{\vec{q}, \mu} + \zeta_{\vec{u}} \quad (382.3)$$

$\hookrightarrow E^{(0)} - H_c \rightarrow E_f - \zeta_{\vec{u}}$

$$H_{12} \cdot \frac{1}{E^{(0)} - H_{22}} \cdot H_{21} = \sum_{\vec{u}, \vec{p}} \sum_{\alpha, \beta} V(\vec{p}) V^*(\vec{u}) +$$

$$+ \frac{1}{E^{(0)} - 2\epsilon_f - U - H_c} \cdot \underbrace{f_\alpha^\dagger n_{f, -\alpha} C_{\vec{u}\alpha}^\dagger |\Phi\rangle}_{|\Phi\rangle}$$

como $H_c |\Phi\rangle = \sum_{\vec{q} \neq \vec{u}, \mu} \zeta_{\vec{q}} n_{\vec{q}, \mu}$ (383.1)

$$L \rightarrow E^{(0)} - 2\epsilon_f - U - H_c \rightarrow -\epsilon_f - U + \zeta_{\vec{u}}$$

pr subespaço P_1 , os termos $(1 - n_{f, -\alpha})$ e $n_{f, -\alpha} \rightarrow 1$

$$L \rightarrow (1) = H_{11} + (-1) \sum_{\vec{u}, \vec{p}} \sum_{\alpha, \beta} V^*(\vec{p}) V(\vec{u}) +$$

notas: $\vec{u} \leftrightarrow \vec{p}$

$$+ \left(\frac{1}{\zeta_{\vec{u}} - \epsilon_f} f_\beta^\dagger C_{\vec{p}\beta}^\dagger C_{\vec{u}\alpha}^\dagger f_\alpha + \frac{1}{\epsilon_f + U - \zeta_{\vec{p}}} C_{\vec{u}\beta}^\dagger f_\beta f_\alpha^\dagger C_{\vec{p}\alpha} \right)$$

(383.2)

notas:

$$\sum_{\alpha, \beta} f_\beta^\dagger C_{\vec{p}\beta}^\dagger C_{\vec{u}\alpha}^\dagger f_\alpha = \sum_{\alpha, \beta} \delta_{\vec{u}, \vec{p}} \delta_{\alpha, \beta} f_\beta^\dagger f_\alpha = f_\beta^\dagger C_{\vec{u}\alpha}^\dagger C_{\vec{p}\beta} f_\alpha$$

= 1, pr subespaço P_1 !

$$= 2\delta_{\vec{u}, \vec{p}} + \sum_{\alpha, \beta} C_{\vec{u}\alpha}^\dagger f_\beta^\dagger C_{\vec{p}\beta} f_\alpha$$

$$= -2 \hat{S}_{\vec{u}, \vec{p}} \cdot \vec{S}_f - \frac{1}{2} \sum_{\alpha} C_{\vec{u}\alpha}^\dagger C_{\vec{p}\alpha} \sum_{\beta} f_\beta^\dagger f_\beta$$

identidade

(80.1)

= 1

onde $\hat{S}_{\vec{u}, \vec{p}} = \frac{1}{2} \sum_{\alpha\beta} C_{\vec{u}\alpha}^\dagger \hat{\sigma}_{\alpha\beta} C_{\vec{p}\beta}$

(384.1)

$\hat{S}_f = \frac{1}{2} \sum_{\mu\nu} f_\mu^\dagger \hat{\sigma}_{\mu\nu} f_\nu$: spin impuneze

$\sum_{\alpha\beta} C_{\vec{u}\beta}^\dagger f_\beta f_\alpha^\dagger C_{\vec{p}\alpha} = \sum_{\alpha\beta} C_{\vec{u}\alpha}^\dagger f_\alpha f_\beta^\dagger C_{\vec{p}\beta}$
 $\delta_{\alpha\beta} - f_\beta^\dagger f_\alpha$

$= \sum_{\alpha} C_{\vec{u}\alpha}^\dagger C_{\vec{p}\alpha} + \sum_{\alpha\beta} C_{\vec{u}\alpha}^\dagger f_\beta^\dagger C_{\vec{p}\beta} f_\alpha$
 $- 2 \hat{S}_{\vec{u}, \vec{p}} \cdot \vec{S}_f - \frac{1}{2} \sum_{\alpha} C_{\vec{u}\alpha}^\dagger C_{\vec{p}\alpha} \sum_{\beta} f_\beta^\dagger f_\beta$
 $= 1$

$= - 2 \hat{S}_{\vec{u}, \vec{p}} \cdot \vec{S}_f + \frac{1}{2} \sum_{\alpha} C_{\vec{u}\alpha}^\dagger C_{\vec{p}\alpha}$

L> (I) = H assume a forma:

$H = \sum_{\vec{u}, \alpha} \zeta_{\vec{u}} C_{\vec{u}\alpha}^\dagger C_{\vec{u}\alpha} + \sum_{\vec{u}, \vec{p}} 2 J_{\vec{u}, \vec{p}} \hat{S}_{\vec{u}, \vec{p}} \cdot \vec{S}_f +$
 $+ \sum_{\vec{u}, \vec{p}} \sum_{\alpha} M_{\vec{u}, \vec{p}} C_{\vec{u}\alpha}^\dagger C_{\vec{p}\alpha}$

onde (384.2)

$J_{\vec{u}, \vec{p}} = V^\dagger(\vec{p}) V(\vec{u}) \left(\frac{1}{\zeta_{\vec{u}} - \epsilon_f} + \frac{1}{\epsilon_f + U - \zeta_{\vec{p}}} \right)$

$M_{\vec{u}, \vec{p}} = \frac{1}{2} \cdot V^\dagger(\vec{p}) V(\vec{u}) \left(\frac{1}{\zeta_{\vec{u}} - \epsilon_f} - \frac{1}{\epsilon_f + U - \zeta_{\vec{p}}} \right)$

procedimento alternativo: é possível derivar o modelo de Kondo a partir do modelo de Anderson via transformação canônica (p/ detalhes, veja Sec. 1.4, Hohen):

$$H' = e^{\hat{S}} H e^{-\hat{S}} = H + [\hat{S}, H] + \frac{1}{2!} [\hat{S}, [\hat{S}, H]] + \frac{1}{3!} [\hat{S}, [\hat{S}, [\hat{S}, H]]] + \dots \quad (385.1)$$

considerando Eq. (369.4) como:

$$H = H_c + H_f + H_0 + H_{\text{hyb}} \equiv H_0 + H_{\text{hyb}},$$

o operador \hat{S} pode ser escolhido de modo a eliminar os termos $O(V^1)$, onde $v(\vec{u})$: "potencial" (369.3), i.e.,

$$H_{\text{hyb}} + [\hat{S}, H_0] = 0 \quad (385.2)$$

$$\hookrightarrow \text{Eq. (385.1)}: H' = H_0 + \frac{1}{2} [\hat{S}, H_{\text{hyb}}] + \frac{1}{3} [\hat{S}, [\hat{S}, H_{\text{hyb}}]] + \dots \quad (385.3)$$

verifique-se que:

$$\hat{S} = \sum_{\vec{u}, \alpha} v(\vec{u}) c_{\vec{u}\alpha}^\dagger f_\alpha \left(\frac{1 - n_{f, -\alpha}}{3\vec{u} - E_f} + \frac{n_{f, -\alpha}}{3\vec{u} - (E_f + U)} \right) + \text{h.c.} \quad (385.4)$$

\hookrightarrow Eq. (385.4) \oplus 1 $^\circ$ e 2 $^\circ$ termos Eq. (385.3)

$\hookrightarrow H' \ni$ modelo Kondo!

Como $H' \neq H_{\text{Anderson}} \rightarrow$ modelos de Anderson e Kondo não são idênticos!