

Modelo de Anderson e Modelo de Kondo

Historicamente, os modelos de Kondo e Anderson apareceram com o objetivo de se estudar a formação de momentos magnéticos em metais e como esses momentos magnéticos interagem com os elétrons de condução.

Tomemos, por exemplo, impurezas de Mn (ou algum elemento com forte tendência a formação de momentos magnéticos $\rightarrow$ camadas d ou f não totalmente preenchidas) numa matriz metálica de comportamento simples, como, p. ex., os metais nobres (Cu, Ag, Au) que não têm comportamento magnético forte (são paramagnetos de Pauli $\rightarrow$ ver Ashcroft + Mermin: "Solid State Physics"). Nesse caso, os íons das impurezas podem apresentar "momentos localizados" ou não. Por momentos localizados, queremos dizer um spin localizado em um sítio de impureza (o momento angular orbital dos íons de metais de transição é, na maioria das vezes, "blindado" ("quenched") pelos campos cristalinos $\rightarrow$ ver Ashcroft Mermin: "Solid State Physics"). A maneira direta de se medir a presença ou ausência desses momentos magnéticos localizados é através de medidas de susceptibilidade magnética em função da temperatura. Um spin livre apresenta uma susceptibilidade dada pela Lei de Curie:

$$\chi(T) = \frac{N_s S(S+1) (g \mu_B)^2}{3 k_B T} \quad \text{"Lei de Curie"}$$

onde N_s é o número de spins, S é o spin total de cada momento local, g é o fator de Landé, μ_B o magneton de Bohr, k_B a constante de Boltzmann e T a temperatura absoluta (ver Ashcroft e Mermin: "Solid State Physics")

Queremos estudar sob quais condições o momento magnético é estabilizado. Para isso, vamos tentar estudar um modelo que tente descrever a física de uma impureza com camadas dentro numa matriz metálica. Como sempre, a ideia é escrever o modelo mais simples que contenha as interações mais importantes. Para isso, usaremos dois ingredientes básicos.

- (i) A matriz metálica é descrita por uma banda de elétrons com dispersão E_k e spin- $1/2$. Desprezamos
- a - interações entre os e^- 's da banda
 - b - a presença de outras bandas (degenerescências,

$$\rightarrow H_0 = \sum_{k\sigma} E_k c_{k\sigma}^\dagger c_{k\sigma}$$

(ii) A impureza magnética é descrita por um orbital ("d") não-degenerado, que pode ser ocupado por e⁻s de spin ↑ ou ↓. Desprezamos, possíveis degenerescências orbitais.

$$H_0 = \sum_{\sigma} \epsilon_d d_{\sigma}^{\dagger} d_{\sigma}$$

Para tornar o modelo não-trivial acrescentamos mais dois termos:

(iii) Uma hibridização entre o orbital d e os ~~estados~~ ^{estados} de condução delocalizados.

$$H_1 = \sum_{k\sigma} (V_{k\sigma} c_{k\sigma}^{\dagger} d_{\sigma} + V_{k\sigma}^* d_{\sigma}^{\dagger} c_{k\sigma})$$

(iv) Uma interação tipo Hubbard entre os e⁻s quando estes ocupam o estado d:

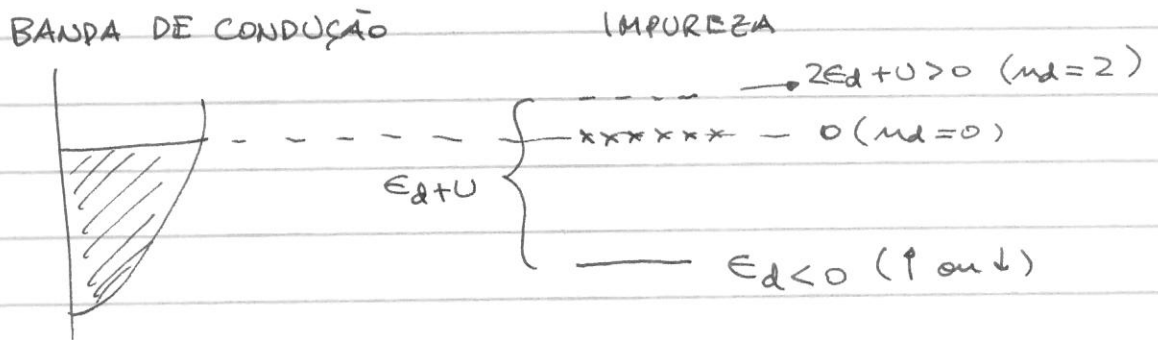
$$H_2 = U \sum_{\sigma} d_{\sigma}^{\dagger} d_{\sigma} d_{\sigma}^{\dagger} d_{\sigma}$$

Desprezamos todos os outros termos na esperança de que $H = H_0 + H_1 + H_2$ já contenha os ingredientes necessários. Entre os termos desprezados estão interações entre os elétrons no nível -d e nos estados de condução, exchange direto, etc.

Esse é o modelo de Anderson:

$$H = \sum_{k\sigma} \epsilon_k c_{k\sigma}^\dagger c_{k\sigma} + \epsilon_d \sum_{\sigma} d_{\sigma}^\dagger d_{\sigma} + \sum_{k\sigma} (V_k c_{k\sigma}^\dagger d_{\sigma} + \text{H.c.}) + U d_{\uparrow}^\dagger d_{\downarrow}^\dagger d_{\downarrow} d_{\uparrow}$$

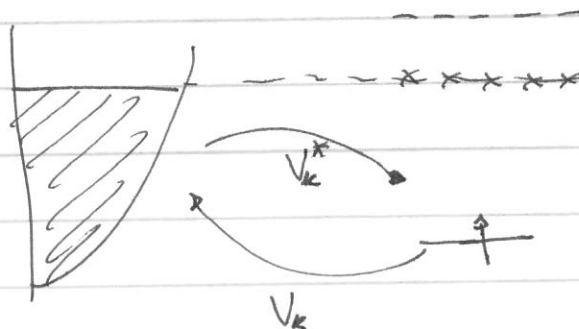
Quando $V_k=0$ ele se reduz a uma banda de condução não-correlacionada e uma impureza do tipo Hubbard. Podemos representar esquematicamente o modelo com $V_k=0$ como: ($\epsilon_d < 0$ e $2\epsilon_d + U > 0$)



Para o caso da figura, $\epsilon_d < 0$ e $2\epsilon_d + U > 0$. Está claro que nesse caso $n_d = 1$ e o orbital d é ocupado por um elétron com spin $\uparrow$ ou $\downarrow$.

⇒ FORMAÇÃO DE MOMENTO LOCAL

Quando a hibridização V_k é ligada, ela tende a fazer transições entre o orbital d e a banda de condução e o número de elétrons d não é um bom número quântico (n_d não comuta com o termo de hibridização).



Limite atômico do modelo de Anderson

Quando $V_d = 0$, a impureza se desacopla da banda de condução. A impureza pode assumir 4 configurações:

Estado vazio: $n_{d\uparrow} = n_{d\downarrow} = 0$

$$\Rightarrow E_0 = 0$$

Estado duplamente ocupado: $n_{d\uparrow} = n_{d\downarrow} = 1$

$$\Rightarrow E_2 = 2E_d + U$$

Estado ocupado por um elétron: Esse caso é duplamente degenerado

$$n_{d\uparrow} = 1 \text{ e } n_{d\downarrow} = 0 \quad \text{ou} \quad n_{d\uparrow} = 0 \text{ e } n_{d\downarrow} = 1$$

Em ambos os casos:

$$\Rightarrow E_1 = E_d$$

Assim, por exemplo, o esquema de níveis fica:

—○—

↑↓

↑ ou ↓

Caso em que:

$$E_d < 0$$

$$E_d + U > 0$$

Vamos estudar as condições necessárias para que o estado magnético ($\sum_i m_{i\sigma} = 1$) seja o estado fundamental nesse limite. Devemos ter:

$$E_0 > E_1 \Rightarrow 0 > E_d \quad (1)$$

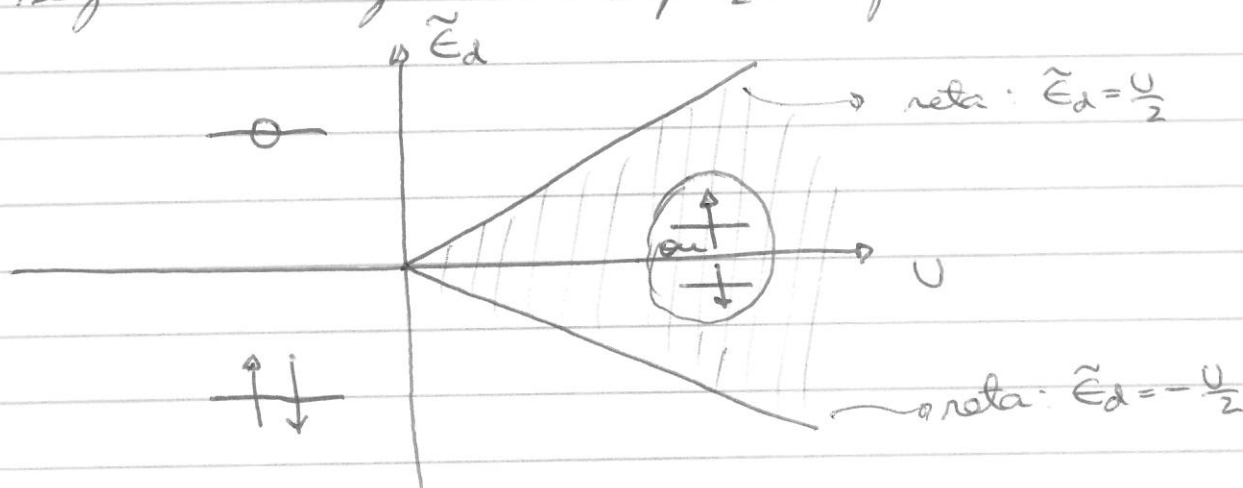
$$E_2 > E_1 \Rightarrow 2E_d + U > E_d \Rightarrow E_d + U > 0 \quad (2)$$

Se definirmos a quantidade $\tilde{E}_d \equiv E_d + \frac{U}{2}$ teremos:

$$(1) \Rightarrow \tilde{E}_d < \frac{U}{2}$$

$$(2) \Rightarrow \tilde{E}_d > -\frac{U}{2}$$

Graficamente, as desigualdades acima definem a seguinte região no espaço de parâmetros:



As outras regiões são caracterizadas por um estado fundamental vazio ou duplamente ocupado como pode ser verificado (faça isso você mesmo)

O modelo de Anderson, que foi proposto a fim de se discutir a formação de momentos locais, tem uma física simples. Suponhamos que $U \rightarrow +\infty$ e V é bem pequeno e vamos discutir o modelo na aproximação Hartree-Fock em que

$$U n_p n_d \approx U \langle n_p \rangle n_d + U \langle n_d \rangle n_p \\ = U \sum_{\sigma} \langle n_{-\sigma} \rangle n_{+\sigma}$$

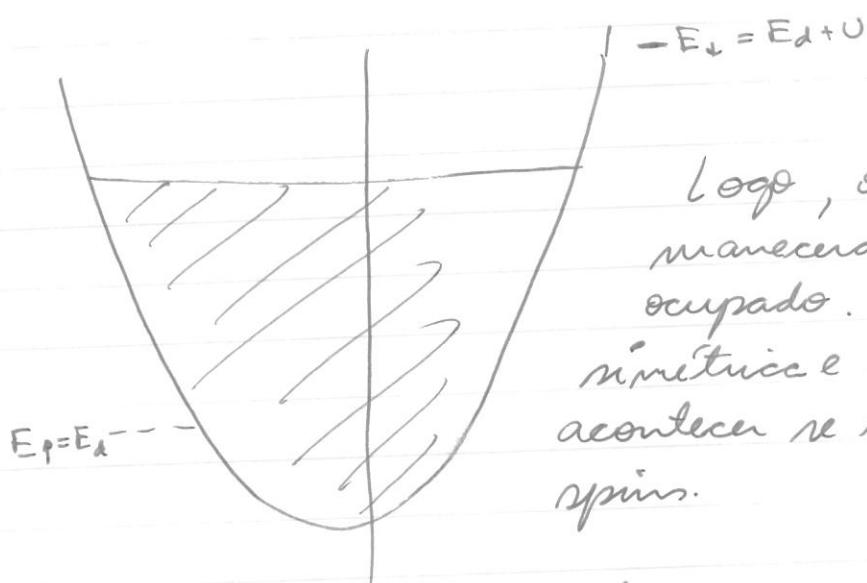
$$\Rightarrow E_{d\sigma} = E_d + U \langle n_{-\sigma} \rangle$$

Suponhamos que o nível d esteja momentaneamente ocupado por um elétron?

$$\langle n_p \rangle = 1 \quad \langle n_d \rangle = 0$$

$$\Rightarrow E_f = E_d < 0$$

$$E_+ = E_d + U > 0$$



Logo, o nível f permanecerá vazio e o d ocupado. A situação é simétrica e o mesmo poderia acontecer se revertermos os spins.

Esse é o estado magnético procurado.

Por outro lado, se houvesse um número médio igual de elétrons $\uparrow$ e $\downarrow$

$$\langle M_{\uparrow} \rangle = \langle M_{\downarrow} \rangle$$

teríamos a seguinte situação. Se $\langle M_{\downarrow} \rangle = \langle M_{\uparrow} \rangle = 0$
 $\Rightarrow E_{\sigma} = E_d < 0 \Rightarrow$ ele teria de ser preenchido pois
 ficaria abaixo do potencial químico. Por outro
 lado, se $\langle M_{\uparrow} \rangle = \langle M_{\downarrow} \rangle = 1$:

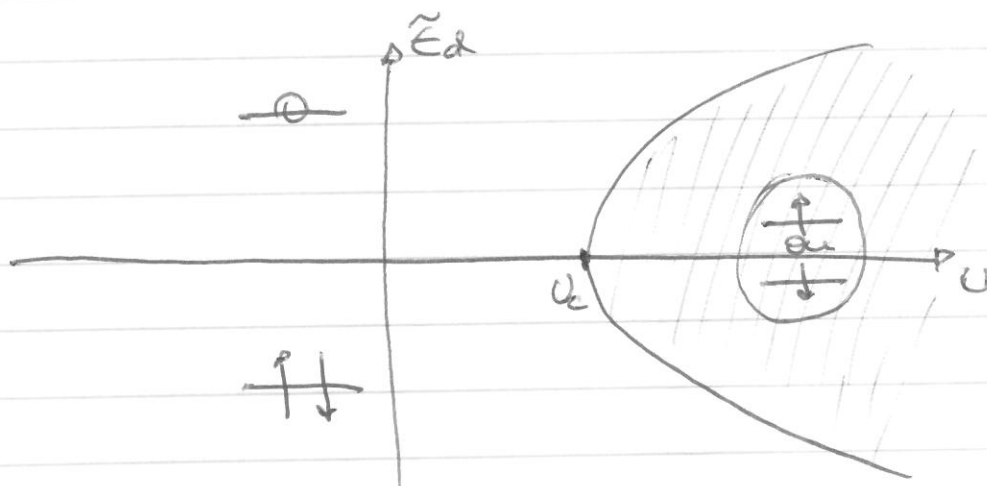
$$E_{\sigma} = E_d + U > 0$$

e ele não seria preenchido. Entretanto, poderíamos
 ajustar $\langle M_{\sigma} \rangle$ a um valor intermediário
 tal que $E_{\sigma} \approx 0$.

A teoria H-F é auto-consistente e
 $\langle M_{\sigma} \rangle$ tem que ser calculado no Hamiltoniano
 H-F. O resultado final é um diagrama de fase
 onde há regiões magnéticas e não magnéticas
 (ver figura).

Entretanto, a solução magnética quebra
 a simetria de rotação de spin, o que é impossível num
 sistema com apenas 1 grau de liberdade. Na verdade,
 os estados magnéticos $\uparrow$ ou $\downarrow$ são conectados por
 flutuações que vão além de H-F. Essas flutuações
 são bem descritas pelo modelo de Kondo.

Dentro da teoria de campo médio proposta por Anderson em 1961 o diagrama do limite atômico é modificado e fica assim:



Uma maneira prática de se calcular o efeito de V_k quando o momento local é estável ($\epsilon_d < 0, |\epsilon_d| \rightarrow 0, U \rightarrow +\infty$) é através de uma transformação canônica (Schrieffer, Wolff, 1966). Para isso, escrevemos:

$$U = e^S \quad U^\dagger = U^{-1} = e^{-S}$$

$$\tilde{H} = e^S H e^{-S} = H + [S, H] + \frac{1}{2} [S, [S, H]] + \dots$$

Se escrevemos:

$$H = H_0 + H_V \text{ onde}$$

$$H_0 = \sum_k \epsilon_k c_{k\sigma}^\dagger c_{k\sigma} + \epsilon_d \sum_\sigma d_\sigma^\dagger d_\sigma + U d_\uparrow^\dagger d_\uparrow d_\downarrow^\dagger d_\downarrow$$

$$H_V = \sum_{k\sigma} V_k c_{k\sigma}^\dagger d_\sigma + \text{H.c.}$$

$$\Rightarrow \tilde{H} = H_0 + H_V + [S, H_0] + [S, H_V] + \frac{1}{2} [S, [S, H_0]] + \frac{1}{2} [S, [S, H_V]] + \dots$$

Impondo agora que:

$$H_V + [S, H_0] = 0$$

de tal forma que a dependência linear em V_k desapareça em $\tilde{H}$. Obviamente $S \propto O(V_k)$ e os outros termos da expansão serão de ordem superior em V_k . Vamos seguir até $O(V_k^3)$:

$$\tilde{H} \approx H_0 + [S, H_V] + \frac{1}{2} [S, [S, H_0]] = H_0 + \frac{1}{2} [S, H_V] + O(V_k^3)$$

Um pouco de experimentação ~~de~~ dá:

$$S = \sum_{k\sigma} V_k \left[\frac{1 - n_{d-\sigma}}{\epsilon_d - \epsilon_k} + \frac{n_{d-\sigma}}{\epsilon_d + U - \epsilon_k} \right] (d_\sigma^\dagger c_{k\sigma} - c_{k\sigma}^\dagger d_\sigma)$$

Temos que:

$$[S, \sum_{k\sigma} \epsilon_k c_{k\sigma}^\dagger c_{k\sigma}] = \sum_{k\sigma} \epsilon_k \sum_{p\sigma'} V_p \left[\frac{1 - n_{d-\sigma'}}{\epsilon_d - \epsilon_p} + \frac{n_{d-\sigma'}}{\epsilon_d + U - \epsilon_p} \right]$$

$$\times \underbrace{[d_{\sigma'}^\dagger c_{p\sigma'} - c_{p\sigma'}^\dagger d_{\sigma'}, c_{k\sigma}^\dagger c_{k\sigma}]}_{d_{\sigma'}^\dagger c_{k\sigma} \delta_{\sigma\sigma'} \delta_{pk} + c_{k\sigma}^\dagger d_{\sigma'} \delta_{pk} \delta_{\sigma\sigma'}}$$

$$= \sum_{k\sigma} \epsilon_k V_k \left[\frac{1 - n_{d-\sigma}}{\epsilon_d - \epsilon_k} + \frac{n_{d-\sigma}}{\epsilon_d + U - \epsilon_k} \right] (c_{k\sigma}^\dagger d_\sigma + d_\sigma^\dagger c_{k\sigma})$$

(Note que usamos que $[A, BC] = \{A, B\}C - B\{A, C\}$)

$$[S, \sum_{\sigma} d_\sigma^\dagger d_\sigma] = \epsilon_d \sum_{\sigma} \sum_{k\sigma'} V_k \left[\frac{1 - n_{d-\sigma'}}{\epsilon_d - \epsilon_k} + \frac{n_{d-\sigma'}}{\epsilon_d + U - \epsilon_k} \right] \underbrace{[d_{\sigma'}^\dagger c_{k\sigma'} - c_{k\sigma'}^\dagger d_{\sigma'}, d_\sigma^\dagger]}_{-d_\sigma^\dagger c_{k\sigma'} \delta_{\sigma\sigma'} - c_{k\sigma'}^\dagger d_\sigma \delta_{\sigma\sigma'}}$$

$$= -\epsilon_d \sum_{k\sigma} V_k \left[\frac{1 - n_{d-\sigma}}{\epsilon_d - \epsilon_k} + \frac{n_{d-\sigma}}{\epsilon_d + U - \epsilon_k} \right] (c_{k\sigma}^\dagger d_\sigma + d_\sigma^\dagger c_{k\sigma})$$

$$[S, U d_i^\dagger d_i d_i^\dagger d_i] = U \sum_{k\sigma} V_k \left[\frac{1 - n_{d-\sigma}}{\epsilon_d - \epsilon_k} + \frac{n_{d-\sigma}}{\epsilon_d + U - \epsilon_k} \right] \underbrace{\left[d_\sigma^\dagger c_{k\sigma} - c_{k\sigma}^\dagger d_\sigma, d_i^\dagger d_i d_i^\dagger d_i \right]}_{= n_{d-\sigma} [d_\sigma^\dagger c_{k\sigma} - c_{k\sigma}^\dagger d_\sigma]}$$

$$= - U \sum_{k\sigma} V_k \left[\frac{1 - n_{d-\sigma}}{\epsilon_d - \epsilon_k} + \frac{n_{d-\sigma}}{\epsilon_d + U - \epsilon_k} \right] (d_\sigma^\dagger c_{k\sigma} + c_{k\sigma}^\dagger d_\sigma) n_{d-\sigma}$$

Assim:

$$[S, H_0] = \sum_{k\sigma} V_k \left[\frac{1 - n_{d-\sigma}}{\epsilon_d - \epsilon_k} + \frac{n_{d-\sigma}}{\epsilon_d + U - \epsilon_k} \right] [\epsilon_k - \epsilon_d - U n_{d-\sigma}] (c_{k\sigma}^\dagger d_\sigma + \text{H.c.})$$

Agora: $\frac{1 - n_{d-\sigma}}{\epsilon_d - \epsilon_k} + \frac{n_{d-\sigma}}{\epsilon_d + U - \epsilon_k} = \frac{\epsilon_d + U - \epsilon_k + n_{d-\sigma}(-U)}{(\epsilon_d - \epsilon_k)(\epsilon_d + U - \epsilon_k)}$

$$\Rightarrow \left[\frac{1 - n_{d-\sigma}}{\epsilon_d - \epsilon_k} + \frac{n_{d-\sigma}}{\epsilon_d + U - \epsilon_k} \right] [\epsilon_k - \epsilon_d - U n_{d-\sigma}] = \frac{(\epsilon_k - \epsilon_d)(\epsilon_d + U - \epsilon_k) - U(\epsilon_k - \epsilon_d)}{(\epsilon_d - \epsilon_k)(\epsilon_d + U - \epsilon_k)}$$

$$-U n_{d-\sigma}(\epsilon_d + U - \epsilon_k) + U^2 n_{d-\sigma} = -1$$

$$\Rightarrow [S, H_0] = - \sum_{k\sigma} V_k (c_{k\sigma}^\dagger d_\sigma + \text{H.c.}) = - H_V$$

como queríamos:

Agora temos que calcular: $[S, H_V]$

$$[S, H_V] = \sum_{k\sigma} \sum_{p\sigma'} V_k V_p \left[\left(\frac{1 - M_{d-\sigma'}}{\epsilon_d - \epsilon_p} + \frac{M_{d-\sigma'}}{\epsilon_d + U - \epsilon_p} \right), \overbrace{c_{k\sigma}^\dagger d_\sigma + d_\sigma^\dagger c_{k\sigma}}^{(d_{\sigma'}^\dagger c_{p\sigma'} - c_{p\sigma'}^\dagger d_{\sigma'})} \right]$$

Temos vários termos:

$$\begin{aligned} & \left[\frac{1 - M_{d-\sigma'}}{\epsilon_d - \epsilon_p} + \frac{M_{d-\sigma'}}{\epsilon_d + U - \epsilon_p}, c_{k\sigma}^\dagger d_\sigma + d_\sigma^\dagger c_{k\sigma} \right] = \\ &= c_{k\sigma}^\dagger \left\{ \frac{\delta_{\sigma, -\sigma'} d_\sigma}{\epsilon_d - \epsilon_p} - \frac{\delta_{\sigma, \sigma'} d_\sigma}{\epsilon_d + U - \epsilon_p} \right\} + \left\{ \frac{-\delta_{\sigma, -\sigma'} d_\sigma^\dagger}{\epsilon_d - \epsilon_p} + \frac{\delta_{\sigma, -\sigma'} d_\sigma^\dagger}{\epsilon_d + U - \epsilon_p} \right\} c_{k\sigma} \\ &= \delta_{\sigma, -\sigma'} \left\{ \frac{(c_{k\sigma}^\dagger d_\sigma - d_\sigma^\dagger c_{k\sigma})}{\epsilon_d - \epsilon_p} - \frac{(c_{k\sigma}^\dagger d_\sigma - d_\sigma^\dagger c_{k\sigma})}{\epsilon_d + U - \epsilon_p} \right\} = \\ &= \delta_{\sigma, -\sigma'} (c_{k\sigma}^\dagger d_\sigma - d_\sigma^\dagger c_{k\sigma}) \left[\frac{1}{\epsilon_d - \epsilon_p} - \frac{1}{\epsilon_d + U - \epsilon_p} \right] \end{aligned}$$

E:

$$\left[d_{\sigma'}^\dagger c_{p\sigma'} - c_{p\sigma'}^\dagger d_{\sigma'}, c_{k\sigma}^\dagger d_\sigma + d_\sigma^\dagger c_{k\sigma} \right] = d_{\sigma'}^\dagger \delta_{pk} \delta_{\sigma\sigma'} d_\sigma - c_{k\sigma}^\dagger \delta_{\sigma\sigma'} c_{p\sigma'}$$

$$- (c_{p\sigma'}^\dagger \delta_{\sigma\sigma'} c_{k\sigma} - d_\sigma^\dagger \delta_{pk} \delta_{\sigma\sigma'} d_{\sigma'}) = 2\delta_{pk} \delta_{\sigma\sigma'} M_{d\sigma} - \delta_{\sigma\sigma'} (c_{k\sigma}^\dagger c_{p\sigma} + c_{p\sigma}^\dagger c_{k\sigma})$$

Logo:

$$\begin{aligned}
 [S, H_V] &= \sum_{k\sigma} V_k V_p \left\{ \delta_{\sigma, -\sigma'} (c_{k\sigma}^\dagger d_{\sigma} - d_{\sigma}^\dagger c_{k\sigma}) (d_{\sigma'}^\dagger c_{p\sigma'} - c_{p\sigma'}^\dagger d_{\sigma'}) \left[\frac{1}{\epsilon_d - \epsilon_p} - \frac{1}{\epsilon_d + U - \epsilon_p} \right] \right. \\
 &\quad \left. + \left(\frac{1 - m_{d-\sigma'}}{\epsilon_d - \epsilon_p} + \frac{m_{d-\sigma'}}{\epsilon_d + U - \epsilon_p} \right) \left[2 \delta_{pk} \delta_{\sigma\sigma'} m_{d\sigma} - \delta_{\sigma\sigma'} (c_{k\sigma}^\dagger c_{p\sigma} + c_{p\sigma}^\dagger c_{k\sigma}) \right] \right\} \\
 &= 2 \sum_{k\sigma} V_k^2 \left(\frac{(1 - m_{d-\sigma}) m_{d\sigma}}{\epsilon_d - \epsilon_k} + \frac{m_{d-\sigma} m_{d\sigma}}{\epsilon_d + U - \epsilon_k} \right) + \\
 &\quad + \sum_{kps} V_k V_p (c_{k\sigma}^\dagger d_{\sigma} - d_{\sigma}^\dagger c_{k\sigma}) (c_{p-\sigma}^\dagger d_{-\sigma} - d_{-\sigma}^\dagger c_{p-\sigma}) \left[\frac{1}{\epsilon_d + U - \epsilon_p} - \frac{1}{\epsilon_d - \epsilon_p} \right] \\
 &\quad - \sum_{kps} V_k V_p \left(\frac{1 - m_{d-\sigma}}{\epsilon_d - \epsilon_p} + \frac{m_{d-\sigma}}{\epsilon_d + U - \epsilon_p} \right) (c_{k\sigma}^\dagger c_{p\sigma} + c_{p\sigma}^\dagger c_{k\sigma})
 \end{aligned}$$

~~Definindo:~~ Definindo:

$$J_{kp} = V_k V_p \left[\frac{1}{\epsilon_d + U - \epsilon_p} + \frac{1}{\epsilon_d + U - \epsilon_k} - \frac{1}{\epsilon_d - \epsilon_p} - \frac{1}{\epsilon_d - \epsilon_k} \right] \quad 2$$

$$W_{kp} = V_k V_p \left[\frac{1}{\epsilon_d - \epsilon_p} + \frac{1}{\epsilon_d - \epsilon_k} \right]$$

e notando que:

$$\sum_{\sigma} (c_{k\sigma}^\dagger d_{\sigma} - d_{\sigma}^\dagger c_{k\sigma}) (c_{p-\sigma}^\dagger d_{-\sigma} - d_{-\sigma}^\dagger c_{p-\sigma})$$

$$2 \quad c_{k\sigma}^\dagger c_{p\sigma} + c_{p\sigma}^\dagger c_{k\sigma}$$

São simétricas sob $\vec{k} \leftrightarrow \vec{p}$, podemos escrever

$$\begin{aligned}
[S, H_V] &= \sum_{k\sigma} W_{kk} n_{d\sigma} - \frac{1}{2} \sum_{k\sigma} W_{kp} (c_{k\sigma}^\dagger c_{p\sigma} + h.c.) \\
&+ \sum_{k\sigma} J_{kk} n_{d\sigma} n_{d-\sigma} - \frac{1}{2} \sum_{k\sigma} J_{kp} n_{d-\sigma} (c_{k\sigma}^\dagger c_{p\sigma} + h.c.) \\
&+ \frac{1}{2} \sum_{k\sigma} J_{kp} (c_{k\sigma}^\dagger d_{-\sigma} - d_{-\sigma}^\dagger c_{k\sigma}) (c_{p-\sigma}^\dagger d_{-\sigma} - d_{-\sigma}^\dagger c_{p-\sigma})
\end{aligned}$$

O último termo pode ser expandido:

$$\begin{aligned}
U.t. &= \frac{1}{2} \sum_{k\sigma} J_{kp} \left[+c_{k\sigma}^\dagger c_{p-\sigma}^\dagger d_{-\sigma} d_{+\sigma} + d_{-\sigma}^\dagger d_{-\sigma} c_{p-\sigma} c_{k\sigma} \right. \\
&\quad \left. + (c_{k\sigma}^\dagger c_{p-\sigma}) (d_{-\sigma}^\dagger d_{-\sigma}) + c_{k\sigma}^\dagger c_{p-\sigma} d_{-\sigma}^\dagger d_{-\sigma} \right] \\
&= \frac{1}{2} \sum_{k\sigma} J_{kp} \left[c_{k\sigma}^\dagger c_{p-\sigma}^\dagger d_{-\sigma} d_{+\sigma} + h.c. \right] + \sum_{k\sigma} J_{kp} (c_{k\sigma}^\dagger c_{p-\sigma}) (d_{-\sigma}^\dagger d_{-\sigma})
\end{aligned}$$

Mas vimos que:

$$\begin{aligned}
\sum_{\sigma} c_{k\sigma}^\dagger c_{p-\sigma} d_{-\sigma}^\dagger d_{-\sigma} &= \frac{1}{2} \sum_{\substack{\alpha\beta \\ \gamma\delta}} \left[(c_{k\alpha}^\dagger \sigma_x^{\alpha\beta} c_{p\beta}) (d_{-\gamma}^\dagger \sigma_x^{\gamma\delta} d_{-\delta}) + \right. \\
&\quad \left. + (c_{k\alpha}^\dagger \sigma_y^{\alpha\beta} c_{p\beta}) (d_{-\gamma}^\dagger \sigma_y^{\gamma\delta} d_{-\delta}) \right] \\
&\equiv \frac{2}{\cancel{2}} \left(S_{ckp}^x S_d^x + S_{ckp}^y S_d^y \right)
\end{aligned}$$

Além disso:

$$\begin{aligned}
\sum_{\sigma kp} J_{kp} n_{d-\sigma} (c_{k\sigma}^\dagger c_{p\sigma} + h.c.) &= 2 \sum_{kp\sigma} J_{kp} n_{d-\sigma} (c_{k\sigma}^\dagger c_{p\sigma}) \\
&= \sum_{kp\sigma} J_{kp} (n_d) \left(\sum_{\sigma} c_{k\sigma}^\dagger c_{p\sigma} \right) - \sum_{kp} J_{kp} (4) S_d^z S_{ckp}^z
\end{aligned}$$

Juntando o quarto e o quinto termos:

$$4^o + 5^o = -\frac{1}{2} m_d \sum_{kp\sigma} J_{kp} c_{k\sigma}^{\dagger} c_{p\sigma} + 2 \sum_{kp} J_{kp} \vec{S}_{ckp} \cdot \vec{S}_d$$

$$+ \frac{1}{2} \sum_{kp\sigma} J_{kp} [c_{k\sigma}^{\dagger} c_{p-\sigma}^{\dagger} d_{-\sigma} d_{+\sigma} + h.c.]$$

Finalmente:

$$[S, H_0] = \sum_{k\sigma} (W_{kk} + J_{kk} m_{d-\sigma}) m_{d\sigma} - \sum_{kp\sigma} (W_{kp} + \frac{m_d}{2} J_{kp}) c_{k\sigma}^{\dagger} c_{p\sigma}$$

$$+ 2 \sum_{kp} J_{kp} \vec{S}_{ckp} \cdot \vec{S}_d + \frac{1}{2} \sum_{kp\sigma} J_{kp} [c_{k\sigma}^{\dagger} c_{p-\sigma}^{\dagger} d_{-\sigma} d_{+\sigma} + h.c.]$$

Finalmente:

$$\tilde{H} \cong H_0 + \frac{1}{2} [S, H_0]$$

Restringindo-nos ao subespaço $m_d = 1$, o primeiro termo acima é uma constante:

$$\sum_k W_{kk}$$

O segundo termo nos dá espalhamento potencial dos elétrons de condução:

$$-\sum_{kp\sigma} (W_{kp} + \frac{J_{kp}}{2}) c_{k\sigma}^{\dagger} c_{p\sigma}$$

e o último termo, que é do tipo transição de pares, nos tira do sub-espaço $m_d = 1$

Resta-nos portanto apenas:

$$\begin{aligned}\tilde{H} &\approx \sum_{k\sigma} \epsilon_k c_{k\sigma}^\dagger c_{k\sigma} + \sum_{kp} J_{kp} \vec{S}_{ckp} \cdot \vec{S}_d \\ &= \sum_{k\sigma} \epsilon_k c_{k\sigma}^\dagger c_{k\sigma} + \frac{1}{2} \sum_{kp} J_{kp} (c_{k\alpha}^\dagger \vec{\sigma}_{k\beta} c_{p\beta}) \cdot \vec{S}_d\end{aligned}$$

Se nos concentrarmos em $|\vec{k}| \sim k_F$ teremos:

$$J_{k_F k_F} = 2V_{k_F} V_{k_F} \left[\frac{1}{\epsilon_d + U} - \frac{1}{\epsilon_d} \right] = 2V_{k_F}^2 \frac{(-U)}{\epsilon_d(\epsilon_d + U)} > 0$$

re $\epsilon_d < 0$ e $\epsilon_d + U > 0$ como assumimos. Portanto

$$J \sim J_{k_F k_F} > 0$$

e a interação é AFM. Note que o fenômeno é basicamente de superexchange que é sempre AFM.

O Hamiltoniano acima é o Hamiltoniano de Kondo e ele é o limite do Hamiltoniano de Anderson quando o momento local é bem formado:

$$\epsilon_d < 0 \quad |\epsilon_d| \rightarrow +\infty \quad \text{e} \quad U \rightarrow +\infty.$$

$$\text{Com } \frac{V_{k_F}^2 U}{\epsilon_d(\epsilon_d + U)} \rightarrow \text{constante.}$$

Tanto o Hamiltoniano de Anderson quanto o de Kondo têm solução exata. Além disso, existem várias outras técnicas aproximadas que permitem a elucidação da física desse sistema.

Uma das principais conclusões que se tira dessa análise é o fato de que o estado fundamental do sistema é um singlete ($S=0$), apesar de haver um momento localizado a altas temperaturas. Os elétrons de condução "blindam" efetivamente o momento local e formam com ele um estado de $S=0$. Esse processo de blindagem do momento local é ~~em~~ conhecido como efeito Kondo.