

Programa de Pós-Graduação em Ciência dos
Materiais

**O grafeno versus gás de elétrons 2D:
filtro Fano relativístico de spins por
meio de pontas de AFM e STM**

Robyson dos Santos Machado

28/02/2014

Universidade Estadual Paulista “Júlio de Mesquita Filho”
Faculdade de Engenharia de Ilha Solteira - SP
Departamento de Física e Química

UNIVERSIDADE ESTADUAL PAULISTA
Faculdade de Engenharia de Ilha Solteira
Departamento de Física e Química
Pós-Graduação em Ciência dos Materiais

DISSERTAÇÃO DE MESTRADO

O GRAFENO VERSUS GÁS DE ELÉTRONS 2D: FILTRO FANO RELATIVÍSTICO DE SPINS POR MEIO DE PONTAS DE AFM E STM

ROBYSON DOS SANTOS MACHADO

Orientador: Prof. Dr. Antonio Carlos Ferreira Seridonio

Co-orientador: Prof. Dr. Ezequiel Costa Siqueira

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Ciência dos Materiais, Departamento de Física e Química, Universidade Estadual Paulista – UNESP, Faculdade de Engenharia de Ilha Solteira – SP, como parte das exigências para obtenção do título de Mestre em Ciência dos Materiais. Área de concentração: Física da Matéria Condensada.

ILHA SOLTEIRA – SP

2014

FICHA CATALOGRÁFICA

Desenvolvido pelo Serviço Técnico de Biblioteca e Documentação

M149g Machado, Robyson.
O grafeno versus gás de elétrons 2d: filtro fano relativístico de spins por meio de pontas de afm e stm / Robyson Machado. -- Ilha Solteira: [s.n.], 2014
82 f. : il.

Dissertação (mestrado) - Universidade Estadual Paulista. Faculdade de Engenharia de Ilha Solteira. Área de conhecimento: Física da Matéria Condensada, 2014

Orientador: Antonio Carlos Ferreira Seridonio
Co-orientador: Ezequiel Costa Siqueira
Inclui bibliografia

1. Microscópio de varredura por tunelamento de elétrons. 2. Grafeno. 3. Spintrônica. 4. Transporte quântico. 5. Condutância diferencial.

CERTIFICADO DE APROVAÇÃO

TÍTULO: O grafeno versus gás de elétrons 2D: filtro Fano relativístico de spins por meio de pontas de AFM e STM

AUTOR: ROBYSON DOS SANTOS MACHADO

ORIENTADOR: Prof. Dr. ANTONIO CARLOS FERREIRA SERIDONIO

CO-ORIENTADOR: Prof. Dr. EZEQUIEL COSTA SIQUEIRA

Aprovado como parte das exigências para obtenção do Título de Mestre em Ciência dos Materiais ,
Área: FÍSICA DA MATERIA CONDENSADA, pela Comissão Examinadora:

ACF Seridonio

Prof. Dr. ANTONIO CARLOS FERREIRA SERIDONIO
Departamento de Física e Química / Faculdade de Engenharia de Ilha Solteira

J. Moraes

Prof. Dr. JOÃO CARLOS SILOS MORAES
Departamento de Física e Química / Faculdade de Engenharia de Ilha Solteira

Eduardo Miranda

Prof. Dr. EDUARDO MIRANDA
Departamento de Física Da Matéria Condensada / Universidade Estadual de Campinas

Data da realização: 28 de fevereiro de 2014.

Agradecimentos

Primeiramente, agradeço a Deus pela oportunidade na Terra, e por tudo que tenho e ainda vou ter.

Ao meu orientador Antônio C. F. Seridonio, por confiar em minhas idéias e capacidades, e pelas discussões que contribuíram não só para este trabalho, mas também, para minha formação.

Ao professor Ezequiel C. Siqueira, pelas discussões que resultaram em importantes contribuições ao presente trabalho.

A meus pais, Dagoberto M. B. Machado e Nilza R. S. Machado, que me apoiaram incondicionalmente em todos os sentidos, por serem pessoas maravilhosas, e por me permitirem estar neste mundo.

À minha namorada e companheira, Beatriz F. Casagrande, por seu carinho, sua força, alegria, e humildade que inspiram nosso amor.

E por fim, aos amigos, Felipe Rizzo, Fábio Barrachi, Éder Alves, Fernando Dessotti, Felipe Magalhães, Maurício Grisi e Luciano Ricco que contribuíram diretamente ou indiretamente para a realização deste trabalho.

Lista de Figuras

1.1	(a) Representação da banda de condução de um metal acoplado a uma impureza magnética, nesta banda temos a semi-largura de banda D , o nível de energia da impureza ϵ_d e o nível de Fermi ϵ_F . (b) Representação da curva da densidade de estados (DOS) do sistema metal+impureza magnética no regime Kondo. A semi-largura dos picos é dado por Γ	3
1.2	(a) Diagrama esquemático do sistema proposto neste trabalho. Uma ponta de STM está acoplada ao sistema que é composto por um hospedeiro bidimensional, que pode ser um gás de elétrons ou um plano de grafeno, com duas impurezas. A primeira impureza é adsorvida (adatom) no topo de um átomo de carbono e a segunda está localizada exatamente abaixo deste mesmo átomo. As pontas de AFM nos permite controlar os níveis de energia das impurezas que estão sob a presença de campos magnéticos anti-paralelos. A cruz e o ponto em cada impureza indicam a orientação do campo magnético. (b) Uma visão do topo dos arranjos considerados: Um 2DEG e um plano de grafeno, respectivamente. (c) Desdobramento Zeeman causado pelo campo magnético em ambas as impurezas.	5
2.1	Estrutura de bandas do grafeno. (a) Energia de dispersão em função dos componentes do vetor de onda k_x e k_y . (b) A estrutura de bandas do grafeno na vizinhança do ponto de Dirac.[1,4]	12
3.1	Níveis de energia de uma impureza no modelo de Anderson. (a) Para $\epsilon_d < \epsilon_F$ e $\epsilon_d + U > \epsilon_F$, a formação do momento localizado na impureza é favorecida. (b) Para $\epsilon_d \simeq \epsilon_F$, não há estado magnético (regime de valência intermediária).	15
7.1	Valor absoluto do parâmetro de Fano da equação (6.10) em função da energia ϵ para $v_0 = 0.14$ e $t_{d2}/t_c = 0.5 \times 10^{-5}$. (a) Para $t_{d1}/t_c = 1 \times 10^{-5}$. (b) Para $t_{d1}/t_c = 10 \times 10^{-5}$. Nestes gráficos definimos a região sombreada segundo a condição: $ q_{T2}^{GS} < q_{T1}^{GS} $. Aumentando a razão t_{d1}/t_c a partir de 1×10^{-5} até 10×10^{-5} esta região é ampliada, como mostrado na figura (b). Em ambos os casos é observado que o parâmetro de Fano tende ao infinito quando a energia se aproxima do nível de Fermi.	49

- 7.2 Aqui utilizamos a equação (5.58) para a densidade de estados das impurezas. (a) Densidade de estados para o adatom, com energia Zeeman $\Delta_1 = 2 \times 10^{-5}$. (b) Densidade de estados para a segunda impureza com energia Zeeman $\Delta_2 = -\Delta_1$ (campos magnéticos antiparalelos). As setas (vermelha e azul) indicam o spin correspondente as ressonâncias. 50
- 7.3 Limite simétrico dos parâmetros de Fano: $t_{d1}/t_c = t_{d2}/t_c = 1 \times 10^{-5}$. (a) No limite simétrico, $\rho_{\text{LDOS}}^\sigma$ é spin degenerada. Como resultado, a curva vermelha pontilhada e a curva azul sólida para spins up e down, respectivamente, estão sobrepostas. A densidade de estados para o grafeno livre das impurezas é representada pela curva verde com quadrados. (b) A curva sólida preta representa a LDOS total, dada pela soma das contribuições de spin up e down. As setas foram incluídas a fim de ilustrar os spins correspondentes as ressonâncias. Adicionalmente, as curvas cinzas pontilhada e tracejada descrevem os termos misto e direto, respectivamente. . . . 52
- 7.4 Limite assimétrico dos parâmetros de Fano: $t_{d1}/t_c = 1 \times 10^{-5}$ e $t_{d2}/t_c = 0.5 \times 10^{-5}$. (a) No limite assimétrico, $\rho_{\text{LDOS}}^\sigma$ torna-se dependente de spin, que está evidente pelos picos com diferentes amplitudes para spin up (curva vermelha pontilhada) e spin down (curva azul sólida). A densidade de estados para o grafeno livre das impurezas é representada pela curva verde com quadrados. (b) Somando as curvas de (a) para spin up e spin down, obtém-se a curva preta sólida para a LDOS total. As setas ilustram a polarização de spin. Também são ilustradas as curvas cinza pontilhada e tracejada para os termos misto e direto, respectivamente. 53
- 7.5 Limite assimétrico dos parâmetros de Fano: $t_{d1}/t_c = 10 \times 10^{-5}$ e $t_{d2}/t_c = 0.5 \times 10^{-5}$. (a) No limite assimétrico, $\rho_{\text{LDOS}}^\sigma$ torna-se dependente de spin, que está evidente pelos picos com diferentes amplitudes para spin up (curva vermelha pontilhada) e spin down (curva azul sólida). (b) A LDOS total (curva preta sólida) e as contribuições dos termos direto (curva cinza tracejada) e misto (curva cinza pontilhada). As setas indicam o spin majoritário correspondente a ressonância. 54
- 7.6 Polarização de transporte em função da energia ε . $t_{d1}/t_c = 1 \times 10^{-5}$ para a curva preta sólida. $t_{d1}/t_c = 10 \times 10^{-5}$ para a curva vermelha pontilhada. Aumentando o valor de t_{d1}/t_c para 10×10^{-5} é possível obter dois pontos em que a eficiência atinge um valor máximo. Em particular, para $\varepsilon \simeq -0.5 \times 10^{-5}$ a eficiência é 100%, que leva a uma corrente completamente polarizada através do sistema. 55
- 7.7 Limite assimétrico dos parâmetros de Fano: $t_{d1}/t_c = 1 \times 10^{-5}$ e $t_{d2}/t_c = 0.5 \times 10^{-5}$. A $\rho_{\text{LDOS}}^\sigma$ é apresentada em função da energia ε para o 2DEG. A LDOS total não depende de spin, em oposição ao observado para o grafeno. Diferente do grafeno, no 2DEG sempre temos $|q_{T1}^{2\text{DEG}}| > |q_{T2}^{2\text{DEG}}|$ para $t_{d1}/t_c > t_{d2}/t_c$ 56

Sumário

Resumo

Abstract

1	Introdução	1
2	O plano de grafeno	7
2.1	Hamiltoniano	7
2.2	Dispersão dos elétrons no grafeno	9
3	Modelo de Anderson	13
3.1	Hamiltoniano de Anderson de uma impureza	13
4	Modelo Teórico	16
4.1	Hamiltoniano	16
4.2	LDOS para o sistema “hospedeiro+impurezas” na presença de pontas de STM e AFM	19
5	Funções de Green das impurezas	29
6	Auto-energias não interagente e parâmetros de Fano	44
7	Resultados e Discussões	48
7.1	Parâmetros	48
7.2	Sistema com o grafeno	48
7.3	Sistema com o 2DEG	55
8	Conclusões	57
	Referências Bibliográficas	58

Resumo

Foi estudado teóricamente a densidade local de estados (LDOS), por meio de uma ponta de STM, de sistemas bidimensionais hospedando um adatom e uma segunda impureza localizada abaixo da superfície hospedeira, ambos capacitivamente acoplados a pontas de AFM e atravessados por campos magnético antiparalelos. São analisados dois sistemas, uma monocamada de grafeno e um gás de elétrons bidimensional (2DEG). As pontas de AFM ajustam os níveis das impurezas com respeito à energia de Fermi, onde dois comportamentos contrastantes emergem: o fator de Fano para o grafeno diverge, enquanto no 2DEG ele se aproxima de zero. Como resultado, a degenerescência de spin da LDOS é levantada exclusivamente no sistema do grafeno, em particular para o regime assimétrico da interferência Fano. O resultado deste limite é um fenômeno não intuitivo, que consiste de um fator de Fano dominante devido à impureza que se encontra abaixo do plano de grafeno, mesmo com um forte acoplamento entre a ponta do STM e o adatom. Assim, foi obtida uma condutância completamente polarizada, por meio do deslocamento vertical da posição da ponta de STM. Para melhor conhecimento, este trabalho é a primeira proposta que utiliza o efeito Fano como mecanismo para filtrar spins no grafeno. Esta característica surge a partir de elétrons de Dirac que se comportam como se não tivessem massa, por conta da estrutura de bandas do grafeno, e nos permite empregá-lo como um filtro de spins relativístico Fano.

Palavras-chave: Microscópio de varredura por tunelamento de elétrons, grafeno, spintrônica, transporte quântico, condutância diferencial.

Abstract

We explore theoretically the density of states (LDOS) probed by an STM tip of 2D systems hosting an adatom and a subsurface impurity, both capacitively coupled to AFM tips and traversed by antiparallel magnetic fields. Two kinds of setups are analyzed, a monolayer of graphene and a two-dimensional electron gas (2DEG). The AFM tips set the impurity levels at the Fermi energy, where two contrasting behaviors emerge: the Fano factor for the graphene diverges, while in the 2DEG it approaches zero. As result, the spin-degeneracy of the LDOS is lifted exclusively in the graphene system, in particular for the asymmetric regime of Fano interference. The aftermath of this limit is a counterintuitive phenomenon, which consists of a dominant Fano factor due to the subsurface impurity even with a stronger STM-adatom coupling. Thus we find a full polarized conductance, achievable just by displacing vertically the position of the STM tip. To the best knowledge, our work is the first to propose the Fano effect as the mechanism to filter spins in graphene. This feature arises from the massless Dirac electrons within the band structure and allows us to employ the graphene host as a relativistic Fano spin-filter.

Keywords: Scanning tunneling microscope, graphene, spintronics, quantum transport, differential conductance.

1 Introdução

O grafeno é um arranjo bidimensional de átomos de carbono organizados em uma rede hexagonal. Sua peculiar estrutura de bandas, composta de dois cones de Dirac localizados nos extremos da zona de Brillouin, e caracterizada por uma relação de dispersão relativística, fornece a oportunidade para cientistas explorarem fenômenos relativísticos no domínio de Física da matéria condensada. Na última década, o grafeno esteve no foco das pesquisas em Física de ambas as comunidades, teórica e experimental. Em particular, as propriedades de transporte do grafeno (e de outras nanoestruturas baseadas em carbono) atraíram o interesse de pesquisadores [1-12].

Recentes estudos experimentais [13,14] e teóricos [15-18] revelam a possibilidade de adsorção efetiva de impurezas magnéticas individuais em um único plano de grafeno. A presença de tais impurezas (adatoms) modifica fortemente as propriedades magnéticas [19-21] e de transporte do grafeno [22-24], tornando-o propício a uma grande variedade de aplicações tecnológicas, até mesmo sensores químicos [25,26]. A técnica experimental que nos possibilita caracterizar as propriedades de adatoms individuais é fornecida pelo Microscópio de Varredura por Tunelamento de elétrons (STM) [27-28]. Tal aparato é constituído de uma ponta metálica que sonda, para temperaturas suficientemente baixas, a densidade local de estados (LDOS) de uma amostra por meio de medidas de condutância diferencial [29,30]. Neste contexto, o STM de impurezas adsorvidas no grafeno revela o espalhamento de elétrons em um ambiente relativístico.

A LDOS de um sistema metálico acoplado a impurezas apresentam perfis Fano [31,32] como resultado de uma interferência quântica entre os diferentes canais de transporte eletrônico. Tal efeito surge inicialmente a partir da interferência entre os elétrons itinerantes que viajam pelo canal da banda de condução do hospedeiro e aqueles que tunelam para a impureza e retornam à banda, esta primeira interferência leva a um fator de Fano interno. Outra interferência surge entre os elétrons que tunelam da ponta do STM diretamente para o hospedeiro e aqueles que tunelam via impureza, esta competição entre canais de tunelamento leva a um fator de Fano

extrínseco. A soma destes dois fatores de Fano resulta em um fator de Fano total, estabelecido pela superposição destes caminhos eletrônicos, que depende das propriedades do hospedeiro. A forma do perfil da condutância diferencial será definida por este fator de Fano total.

Na última década, uma atenção particular foi dada ao efeito Fano em metais regulares com adatoms magnéticos no regime Kondo [33]. Nesta situação, a descrição do hospedeiro como um gás de elétrons bidimensional (2DEG) tem sido verificada com sucesso [34,38].

O regime Kondo é a situação na qual um sistema se encontra na condição para que o efeito Kondo se manifeste. Para compreendermos melhor este efeito, consideremos uma superfície metálica em que foi adsorvida uma impureza magnética, logo, na banda de condução deste metal haverá um nível de energia ε_d que corresponde ao nível de energia da impureza, como está representado na figura 1.1(a). Como a banda e a impureza estão acopladas por uma energia de hibridização V , elas trocam elétrons a uma certa taxa. Suponhamos que a banda coloque um elétron com spin up no nível ε_d , isso irá refletir na curva da DOS como uma ressonância em torno de ε_d , como ilustrado na figura 1.1(b). Quando a banda tentar colocar o segundo elétron, com spin down (devido o princípio de exclusão de Pauli), ele não cairá em ε_d , mas sim em um nível $\varepsilon_d + U$, onde U é a energia de repulsão coulombiana, isso resultará na curva da DOS em uma ressonância em torno de $\varepsilon_d + U$, já que é possível localizarmos elétrons ali. No entanto, este segundo elétron não terá energia suficiente para cair em $\varepsilon_d + U$, de modo que teremos um elétron desemparelhado em ε_d . Os elétrons de condução, próximos ao nível de Fermi, irão interagir com este elétron desemparelhado de modo que eles irão blindar de maneira antiferromagnética o spin deste elétron. Esta blindagem, formada pelos elétrons de condução, é denominada nuvem Kondo. Como esta interação ocorre próxima ao nível de Fermi, isso vai refletir na curva da DOS como uma ressonância estreita e aguda centrada no nível de Fermi, como ilustrado na figura 1.1(b). Quando o elétron com spin up na impureza saltar para a banda de condução e um elétron com spin down saltar para a impureza, ocorrerá uma inversão do spin dos elétrons que formam a nuvem Kondo, tal efeito é chamado de spin-flip. Mas tudo isso, só irá ocorrer se o sistema estiver abaixo de uma temperatura característica, denominada temperatura de Kondo T_K . Se o sistema estiver acima de T_K , a rede do metal irá “chacoalhar” de tal maneira que está interação será destruída, evaporando assim a nuvem Kondo.

Adicionalmente, a presença de hospedeiros spin-polarizados da origem a novas

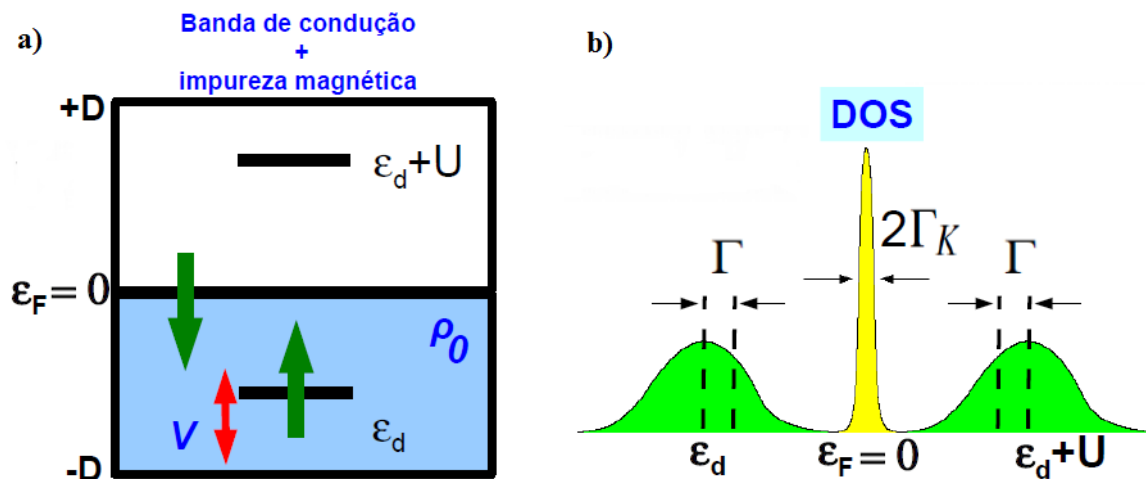


Figura 1.1: (a) Representação da banda de condução de um metal acoplado a uma impureza magnética, nesta banda temos a semi-largura de banda D , o nível de energia da impureza ϵ_d e o nível de Fermi ϵ_F . (b) Representação da curva da densidade de estados (DOS) do sistema metal+impureza magnética no regime Kondo. A semi-largura dos picos é dado por Γ .

características extremamente interessantes no emergente campo da spintrônica [39-55]. Para estes casos, a separação do pico de Kondo na condutância caracteriza a marca de magnetismo itinerante no hospedeiro [39,40]. Uma ponta spin-polarizada e um hospedeiro não magnético também leva a um STM dependente do spin. Particularmente, o sistema mencionado acima comporta-se tanto como um filtro de spins no regime Kondo ou como um diodo de spins fora dele [41-43]. Além disso, um filtro de spins baseado no efeito Fano pode, em princípio, ser realizado mesmo na ausência de ferromagnetismo [56,57] e efeito Kondo. Tal efeito pode ser obtido na geometria de um fio quântico hibridizado lateralmente a um ponto quântico (QD), onde a degenerescência de spin é quebrada pela aplicação de um campo magnético externo na região do QD [58].

As propriedades de impurezas magnéticas individuais adsorvidas no grafeno foram estudadas teoricamente utilizando-se o modelo de Anderson de uma impureza [59]. Tais estudos foram realizados tanto no regime de altas temperaturas, para $T \gg T_K$ (onde T_K é a temperatura de Kondo), quando o método de Hartree-Fock pode ser empregado [5,6], quanto no regime de baixas temperaturas, para $T \ll T_K$, quando as correlações de Kondo devem ser consideradas. No último caso, alterando o nível do adatom na vizinhança do nível de Fermi, foi previsto que o pico de Kondo surge em um intervalo de energia mais estreito do que em metais comuns [7]. Isto se deve a diferença na dispersão dos portadores de carga nos dois sistemas: enquanto o 2DEG

é descrito por uma dispersão parabólica, a rede hexagonal do grafeno leva a uma relação de dispersão linear próximo ao nível de Fermi.

No presente trabalho nós estudamos fenômenos relacionados ao spin em metais comuns e no grafeno, ambos hospedando duas impurezas na geometria de acoplamento lateral, conforme ilustrado nas figuras 1.2(a) e 1.2(b). As impurezas estão sujeitas a campos magnéticos antiparalelos, campos estes que introduzem um desdobramento Zeeman nos níveis das impurezas como representado na figura 1.2(c). Além disso, há duas pontas de microscópio de força atômica (AFM) acopladas capacitivamente as impurezas, com o intuito de ajustar suas energias em relação ao nível de Fermi do hospedeiro [8]. Estas pontas desempenham o papel de terminais metálicos, geralmente empregados para regular níveis de QDs embutidos em nanoestruturas [60,61].

Com o intuito de modelar o sistema ilustrado na figura 1.2, um método baseado no modelo de Anderson de duas impurezas que vai além da aproximação de Hartree-Fock e válido fora do regime Kondo foi desenvolvido. Nós consideramos ambos os casos de hospedeiros, o 2DEG e o plano de grafeno. No último sistema, nós seguimos o modelo proposto na referência [7], onde uma impureza é adsorvida sobre um único sítio do hospedeiro. Além disso, nós consideramos uma segunda impureza situada exatamente abaixo do átomo em que foi adsorvida a primeira impureza. Utilizando a técnica da equação de movimento para as funções de Green, nós derivamos a expressão para a LDOS do sistema dependente de spin, caracterizada pelos parâmetros de interferência quântica de Fano.

A interferência quântica entre os caminhos dos elétrons governa o transporte através do sistema e leva a forma Fano no perfil da condutância diferencial. Tal perfil pode ser caracterizado em termos dos parâmetros de Fano. Parâmetros estes que nos permite determinar o impacto relativo de cada caminho dentro da resposta global obtida pela ponta dos STM. Os parâmetros de Fano dependem das propriedades do hospedeiro e apresenta comportamentos opostos para o grafeno e para metais comuns. No primeiro caso, na vizinhança do nível de Fermi do hospedeiro o fator de Fano diverge, enquanto no último caso ele tende a zero. A fim de explorar tais características contrastantes, em nossa consideração nós ajustamos os níveis de energia das impurezas na energia de Fermi do hospedeiro.

Como será apresentado neste trabalho, a quebra da degenerescência de spin da LDOS ocorre apenas para o sistema em que o grafeno é o hospedeiro, em particular, no limite assimétrico dos parâmetros de Fano. Neste regime, um fenômeno não

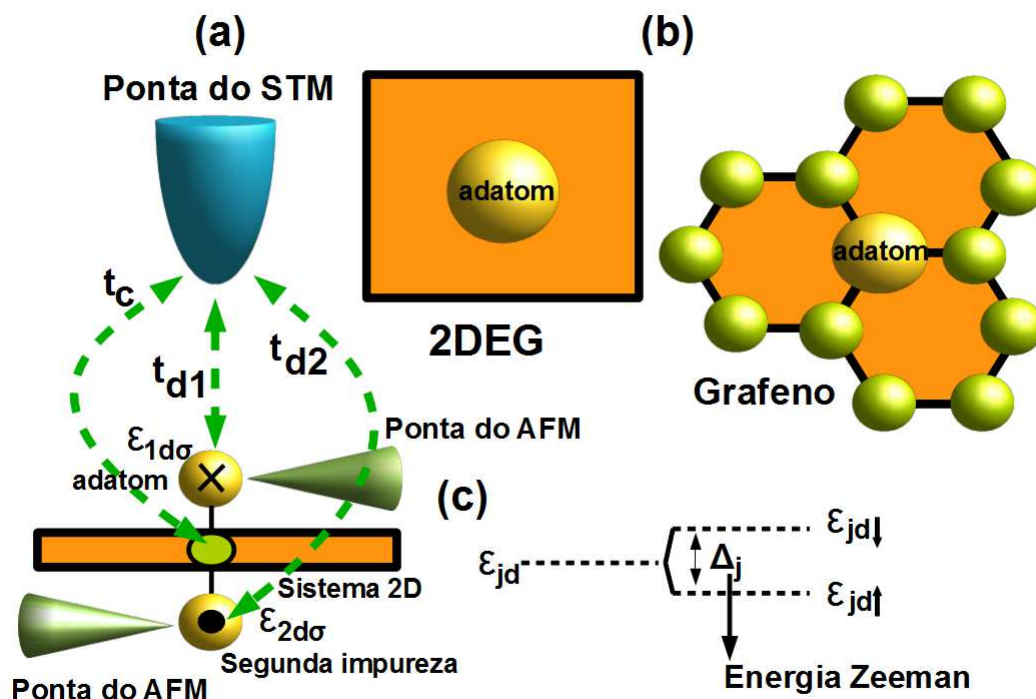


Figura 1.2: (a) Diagrama esquemático do sistema proposto neste trabalho. Uma ponta de STM está acoplada ao sistema que é composto por um hospedeiro bidimensional, que pode ser um gás de elétrons ou um plano de grafeno, com duas impurezas. A primeira impureza é adsorvida (adatom) no topo de um átomo de carbono e a segunda está localizada exatamente abaixo deste mesmo átomo. As pontas de AFM nos permite controlar os níveis de energia das impurezas que estão sob a presença de campos magnéticos anti-paralelos. A cruz e o ponto em cada impureza indicam a orientação do campo magnético. (b) Uma visão do topo dos arranjos considerados: Um 2DEG e um plano de grafeno, respectivamente. (c) Desdobramento Zeeman causado pelo campo magnético em ambas as impurezas.

intuitivo é revelado: há uma posição da ponta do STM que o fator de Fano da impureza que se encontra abaixo da superfície (segunda impureza) domina a interferência mesmo com um forte acoplamento entre o STM e o adatom. Nós observamos que a componente de spin majoritário da LDOS pode ser controlada pelo deslocamento vertical da ponta do STM em direção ao hospedeiro. Nós também demonstramos que é possível obter um perfil da condutância completamente polarizado deslocando verticalmente a ponta do STM. Assim, o sistema formado pelo grafeno como hospedeiro nos permite emular um filtro de spins relativístico Fano com férmions de Dirac sem massa.

Esta dissertação está organizada da seguinte forma: No Capítulo 2, apresentamos

uma breve introdução ao grafeno, bem como o cálculo da relação de dispersão para os elétrons em sua rede hexagonal. No Capítulo 3, apresentamos o modelo de Anderson. O desenvolvimento do modelo teórico das superfícies com duas impurezas e da expressão da LDOS dependente do spin dos sistemas ilustrados na figura 1.2 é feito no Capítulo 4. No Capítulo 5, realizamos o cálculo das funções de Green das impurezas diretas e mistas, bem como o método de desacoplamento Hubbard I [62]. No Capítulo 6, nós derivamos as expressões das auto-energias não interagentes das impurezas, bem como os parâmetros de Fano para o grafeno e para o 2DEG, respectivamente. Os resultados dos cálculos são apresentados e discutidos no Capítulo 7. As conclusões são sumarizadas no Capítulo 8, seguida da publicação associada a esse trabalho.

2 O plano de grafeno

O grafeno é uma camada bidimensional de átomos de carbono organizados em uma rede hexagonal. Desde a última década o grafeno tem atraído o interesse da comunidade científica, teórica e experimental, em virtude de métodos experimentais que levaram a obtenção do grafeno isolado, primeiramente obtido por K. S. Novoselov et al. em 2004 [63]. O grande interesse neste material se deve em grande parte à sua estrutura de bandas, composta de dois cones de Dirac localizados nos extremos da zona de Brillouin, e caracterizada por uma dispersão eletrônica que é análoga à dos fótons [4]. Ele é o primeiro material cristalino naturalmente bidimensional já observado na natureza, cujas propriedades são consideravelmente diferentes de seu correspondente material tridimensional [1]. É o material mais fino e mais forte já obtido, seus portadores de carga se comportam como férmions de Dirac sem massa, é um ótimo condutor elétrico e térmico [1]; a lista de suas características pode ser extensa e novas propriedades estão sendo adicionadas a ele frequentemente. No contexto deste trabalho, o interesse reside nas propriedades eletrônicas e de transporte do grafeno, graças ao comportamento relativístico dos elétrons na rede deste material, o que abre a possibilidade do desenvolvimento de novos dispositivos baseados nele que podem apresentar resultados de interesse no campo da spintrônica.

2.1 Hamiltoniano

O Hamiltoniano “tight-binding” dos elétrons na rede do grafeno é dado por

$$\mathcal{H}_G = -t \sum_{\langle ij \rangle \sigma} [a_{i\sigma}^\dagger b_{j\sigma} + \text{H.c.}] \quad (2.1)$$

onde $a_{i\sigma}^\dagger$ ($a_{i\sigma}$) cria (aniquila) um elétron com spin σ na posição R_i da subrede A, $b_{j\sigma}^\dagger$ ($b_{j\sigma}$) cria (aniquila) um elétron com spin σ na posição R_j da subrede B e t é a energia de hopping entre vizinhos mais próximos. Assumindo invariância translacional, podemos escrever a equação (2.1) no espaço dos momentos, assim podemos

definir:

$$a_{i\sigma}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{N_A}} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_i} a_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger, \quad b_{i\sigma}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{N_B}} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_i} b_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger \quad (2.2)$$

o que nos permite calcular o seguinte termo

$$a_{i\sigma}^\dagger b_{j\sigma} = \frac{1}{\sqrt{N_A N_B}} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_i} e^{-i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{R}_j} a_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger b_{\mathbf{k}'\sigma}. \quad (2.3)$$

Os vetores que conectam o átomo na subrede A aos seus vizinhos mais próximos são:

$$\boldsymbol{\delta}_1 = \frac{a}{2}(1, \sqrt{3}, 0), \quad \boldsymbol{\delta}_2 = \frac{a}{2}(1, -\sqrt{3}, 0), \quad \boldsymbol{\delta}_3 = a(-1, 0, 0) \quad (2.4)$$

$$\boldsymbol{\delta}_i = \mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j \quad \therefore \quad \mathbf{R}_i = \boldsymbol{\delta}_i + \mathbf{R}_j \quad (2.5)$$

substituindo na equação (2.3) e realizando a soma sobre os sítios, obtemos:

$$\begin{aligned} -t \sum_{\langle ij \rangle \sigma} a_{i\sigma}^\dagger b_{j\sigma} &= -t \sum_{\langle ij \rangle \sigma} \frac{1}{\sqrt{N_A N_B}} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_j} e^{i\mathbf{k}\cdot\boldsymbol{\delta}_i} e^{-i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{R}_j} a_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger b_{\mathbf{k}'\sigma} \\ &= -t \sum_{\langle ij \rangle \sigma} \frac{1}{\sqrt{N_A N_B}} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\cdot\mathbf{R}_j} e^{i\mathbf{k}\cdot\boldsymbol{\delta}_i} a_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger b_{\mathbf{k}'\sigma}. \end{aligned} \quad (2.6)$$

Considerando a seguinte relação

$$\frac{1}{\sqrt{N_A N_B}} \sum_j e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\cdot\mathbf{R}_j} = \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}, \quad (2.7)$$

obtemos:

$$-t \sum_{\langle ij \rangle \sigma} a_{i\sigma}^\dagger b_{j\sigma} = -t \sum_{i\mathbf{k}\sigma} e^{i\mathbf{k}\cdot\boldsymbol{\delta}_i} a_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger b_{\mathbf{k}\sigma} = \sum_{\mathbf{k}\sigma} \phi(\mathbf{k}) a_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger b_{\mathbf{k}\sigma} \quad (2.8)$$

com

$$\phi(\mathbf{k}) = -t \sum_{i=1}^3 e^{i\mathbf{k}\cdot\boldsymbol{\delta}_i}. \quad (2.9)$$

Assim podemos escrever a equação (2.1) da seguinte maneira:

$$H_G = \sum_{\mathbf{k}\sigma} [\phi(\mathbf{k}) a_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger b_{\mathbf{k}\sigma} + \text{H.c.}] \quad (2.10)$$

2.2 Dispersão dos elétrons no grafeno

Vamos considerar o problema de auto-valores para o grafeno isolado, como dado pela equação (2.10). É possível escrever a equação (2.10) da seguinte maneira:

$$H_G = \sum_{\mathbf{k}\sigma} [\phi(\mathbf{k}) a_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger b_{\mathbf{k}\sigma} + \text{H.c.}] = \sum_{\mathbf{k}\sigma} \begin{bmatrix} a_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger & b_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} 0 & \phi(\mathbf{k}) \\ \phi^*(\mathbf{k}) & 0 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} a_{\mathbf{k}\sigma} \\ b_{\mathbf{k}\sigma} \end{bmatrix} \quad (2.11)$$

e calculando o determinante da matriz da equação (2.11), segue que:

$$\det(\mathbf{E}\mathbf{I} - \mathbf{H}_G) = 0 \quad \therefore \quad \begin{vmatrix} -E & \phi(\mathbf{k}) \\ \phi^*(\mathbf{k}) & -E \end{vmatrix} = 0 \quad (2.12)$$

e os auto-valores serão dados por

$$E_{\pm}(\mathbf{k}) = \pm |\phi(\mathbf{k})| \quad (2.13)$$

onde o sinal de mais ou menos está relacionado as bandas superior e inferior, respectivamente. Assim, pela equação (2.9) temos:

$$\phi(\mathbf{K}) = -t \sum_{i=1}^3 e^{i\vec{K} \cdot \delta_i} = -t \left(e^{i\vec{K} \cdot \delta_1} + e^{i\vec{K} \cdot \delta_2} + e^{i\vec{K} \cdot \delta_3} \right). \quad (2.14)$$

Os pontos de Dirac \mathbf{K} e \mathbf{K}' , localizados nos cantos da zona de Brillouin, estão posicionados no espaço dos momentos em

$$\mathbf{K} = \left[\frac{2\pi}{3a}, \frac{2\pi}{3\sqrt{3}a} \right] \quad \mathbf{K}' = \left[\frac{2\pi}{3a}, -\frac{2\pi}{3\sqrt{3}a} \right] \quad (2.15)$$

e outros cinco pontos na zona de Brillouin relacionados por simetria. Combinando a equação (2.4) com o ponto \mathbf{K} (ou \mathbf{K}'), obtemos:

$$\mathbf{K} \cdot \delta_1 = \frac{2\pi}{3a} \times \frac{a}{2} + \frac{2\pi}{3\sqrt{3}a} \times \frac{\sqrt{3}a}{2} = \frac{2\pi}{3} \quad (2.16)$$

$$\mathbf{K} \cdot \boldsymbol{\delta}_2 = \frac{2\pi}{3a} \times \frac{a}{2} - \frac{2\pi}{3\sqrt{3}a} \times \frac{\sqrt{3}a}{2} = 0 \quad (2.17)$$

$$\mathbf{K} \cdot \boldsymbol{\delta}_3 = -\frac{2\pi}{3a} \times a = -\frac{2\pi}{3} \quad (2.18)$$

substituindo na equação (2.14), obtemos

$$\begin{aligned} \phi(\mathbf{K}) &= -t \left(e^{i2\pi/3} + 1 + e^{-i2\pi/3} \right) = -t(1 + 2 \cos 2\pi/3) \\ &= -t \left(1 - 2 \times \frac{1}{2} \right) = 0 \end{aligned} \quad (2.19)$$

como $\phi(\mathbf{K}) = 0$, podemos expandir $\phi(\mathbf{k})$ em torno do ponto de Dirac. Assim, como $\mathbf{k} = \mathbf{K} + \mathbf{q}$, com $|\mathbf{q}| \ll |\mathbf{K}|$ [4], e utilizando a expansão em série de Taylor, podemos escrever:

$$\phi(\mathbf{K} + \mathbf{q}) \approx \phi(\mathbf{K}) + \mathbf{q} \cdot \nabla_{\mathbf{k}} \phi(\mathbf{k})|_{\mathbf{k}=\mathbf{K}} \quad (2.20)$$

onde expandimos até primeira ordem em \mathbf{K} . Calculando a derivada de $\phi(\mathbf{k})$, obtemos:

$$\frac{\partial \phi(\mathbf{k})}{\partial k_x} = -t \sum_i \frac{\partial e^{i\mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\delta}_i}}{\partial k_x} = -it \sum_i \delta_{ix} e^{i\mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\delta}_i}, \quad (2.21)$$

e

$$\frac{\partial \phi(\mathbf{k})}{\partial k_y} = -t \sum_i \frac{\partial e^{i\mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\delta}_i}}{\partial k_y} = -it \sum_i \delta_{iy} e^{i\mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\delta}_i}. \quad (2.22)$$

Logo, o segundo termo da expansão pode ser escrito como:

$$\begin{aligned}
 \mathbf{q} \cdot \nabla_{\mathbf{k}} \phi(\mathbf{k})|_{\mathbf{k}=\mathbf{K}} &= -it \sum_i q_x \delta_{ix} e^{i\mathbf{K} \cdot \delta_i} - it \sum_i q_y \delta_{iy} e^{i\mathbf{K} \cdot \delta_i} \\
 &= -it \sum_i [q_x \delta_{ix} + q_y \delta_{iy}] e^{i\mathbf{K} \cdot \delta_i} \\
 &= -it([q_x \delta_{1x} + q_y \delta_{1y}] e^{i\mathbf{K} \cdot \delta_1} + [q_x \delta_{2x} + q_y \delta_{2y}] e^{i\mathbf{K} \cdot \delta_2} \\
 &\quad + [q_x \delta_{3x} + q_y \delta_{3y}] e^{i\mathbf{K} \cdot \delta_3}) \\
 &= -it \left[q_x \frac{a}{2} + q_y \frac{a\sqrt{3}}{2} \right] \times e^{2\pi i/3} \\
 &\quad + \left[q_x \frac{a}{2} - q_y \frac{a\sqrt{3}}{2} \right] \times 1 - [q_x a] \times e^{-2\pi i/3} \\
 &= -it \frac{a}{2} \left(\frac{1}{2} (q_x + \sqrt{3}q_y)(-1 + i\sqrt{3}) + (q_x - \sqrt{3}q_y) + q_x(1 + i\sqrt{3}) \right) \\
 &= -it \frac{a}{2} \left[\frac{3}{2} q_x (1 + i\sqrt{3}) + i \frac{3}{2} q_y (1 + i\sqrt{3}) \right] \\
 &= -it \frac{3a}{2} (q_x + iq_y) e^{i\pi/3} = \frac{3}{2} ta e^{i\pi/3} (q_y - iq_x) \tag{2.23}
 \end{aligned}$$

como $\phi(\mathbf{K}) = 0$, podemos escrever $\phi(\mathbf{K} + \mathbf{q})$ da seguinte maneira:

$$\phi(\mathbf{K} + \mathbf{q}) \approx \frac{3}{2} ta e^{i\pi/3} (q_y - iq_x). \tag{2.24}$$

Logo, tomando o módulo conjugado da equação (2.24), obtemos:

$$|\phi(\mathbf{K} + \mathbf{q})| \approx \frac{3}{2} ta |\mathbf{q}| \tag{2.25}$$

e a fase de $\phi(\mathbf{K} + \mathbf{q})$ pode ser obtida por:

$$\frac{\phi(\mathbf{K} + \mathbf{q})}{|\phi(\mathbf{K} + \mathbf{q})|} = e^{i\delta(\mathbf{K}+\mathbf{q})} \approx e^{i\pi/3} \frac{(q_y - iq_x)}{|\mathbf{q}|}. \tag{2.26}$$

Assim, combinando as equações (2.25) e (2.13), chegamos em

$$E_{\pm}(\mathbf{K} + \mathbf{q}) = \pm \frac{3}{2} ta |\mathbf{q}| = \pm v_F |\mathbf{q}| \tag{2.27}$$

para a relação de dispersão dos elétrons no grafeno em torno do ponto \mathbf{K} (ou \mathbf{K}'). A equação (2.27) é a dispersão de uma partícula relativística com velocidade de Fermi $v_F = \frac{3}{2} ta$, que é, um férmion de Dirac. Por isso, em baixas energias (energias

muito menores do que a largura de banda), a descrição efetiva do problema “tight-binding” reduz os seis pontos da zona de Brillouin a dois cones de Dirac, cada um deles associados a subredes diferentes. A descrição de baixa energia é válida desde que os momentos característicos (energia) da excitação sejam menores do que um corte, k_c ($D = v_F k_c$), da ordem do inverso do espaçamento da rede. A figura 2.1 (a) ilustra a estrutura de bandas completa do grafeno, e a figura 2.1 (b) é uma ampliação da estrutura de bandas próximo a um dos pontos de Dirac (no ponto \mathbf{K} ou \mathbf{K}') [4].

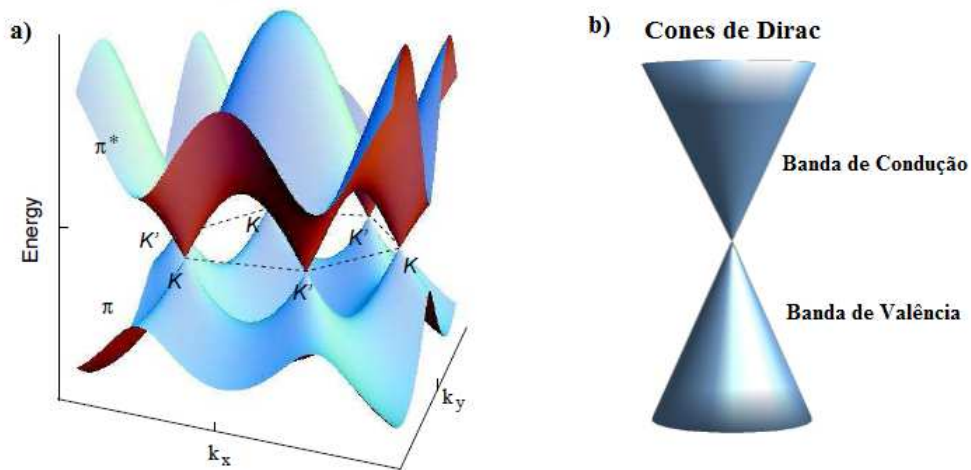


Figura 2.1: Estrutura de bandas do grafeno. (a) Energia de dispersão em função dos componentes do vetor de onda k_x e k_y . (b) A estrutura de bandas do grafeno na vizinhança do ponto de Dirac.[1,4]

3 Modelo de Anderson

Neste capítulo vamos apresentar o modelo de impurezas em metais desenvolvido por P.W. Anderson na década de 60. Este modelo trata um sistema composto por uma impureza adsorvida em uma superfície metálica (por exemplo, átomos de Cobalto colocados sobre uma superfície de Cobre [37]), isto é, um adatom num ambiente de gás de elétrons livres. O sistema pode ser tratado em partes: A banda de condução do metal, onde os elétrons podem se mover livremente e pode ser bem descrito pelo Hamiltoniano de um gás de Fermi, uma parte que corresponde ao nível localizado da impureza, e uma outra parte que consiste de uma impureza acoplada a banda, onde geralmente os elétrons estão fortemente correlacionados. As impurezas podem gerar alterações no perfil energético em determinadas regiões da banda de condução, o que leva ao surgimento de estados localizados. Dependendo da posição, em relação ao nível de Fermi do metal, desses estados localizados eles podem estar ocupados ou não por elétrons. Os elétrons itinerantes que viajam pela banda de condução podem tunelar para o estado localizado da impureza, e vice-versa, os elétrons localizados podem saltar para a banda, o que produz efeitos de correlação de carga e spin.

3.1 Hamiltoniano de Anderson de uma impureza

O modelo de Anderson interagente leva em conta a interação coulombiana U entre elétrons localizados na impureza. Essa interação é dada por

$$U = \int d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 |\phi_d(\mathbf{r}_1)|^2 \frac{e^2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} |\phi_d(\mathbf{r}_2)|^2 \quad (3.1)$$

onde e é a carga do elétron e $\phi_d(\mathbf{r})$ é a função de onda associada ao autoestado de um elétron na impureza em uma dada posição \mathbf{r} .

Uma impureza magnética quando adsorvida em um metal não magnético pode dar origem a um momento magnético localizado, isso ocorre quando essa é ocupada por um elétron desemparelhado (metais de transição, terras raras). Como dito

anteriormente, neste modelo a banda de condução do metal hospedeiro pode ser tratada como um gás de elétrons livres, então

$$\epsilon_{\mathbf{K}} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} - \epsilon_F \quad (3.2)$$

representa a energia de um elétron de condução, e a impureza é tratada como um único orbital localizado, dado pela função de onda $\phi_d(\mathbf{r})$. Escolhendo-se o nível de Fermi como $\epsilon_F = 0$, ϵ_d torna-se o custo em energia para introduzir o primeiro elétron na impureza. Para adicionar o segundo, com spin contrário, devido o princípio de exclusão de Pauli, o custo adicional fica estabelecido pela energia de repulsão Coulombiana dada pela equação (3.1). Dessa forma, surge um acoplamento do estado da impureza com um dado estado \mathbf{k} da banda de condução do metal, determinado por um elemento de matriz $V_{\mathbf{k}d}$. Esse elemento gera uma hibridização entre tais estados, e por isso, existe uma probabilidade do elétron de condução visitar o nível da impureza. Baseado nessa fenomenologia, podemos então enunciar o Hamiltoniano de Anderson de uma impureza como

$$H^A = \sum_{\mathbf{k}\sigma} \epsilon_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma} + \sum_{\sigma} \epsilon_d d_{\sigma}^\dagger d_{\sigma} + U n_{d\uparrow} n_{d\downarrow} + \sum_{\mathbf{k}\sigma} V_{\mathbf{k}d} (c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger d_{\sigma} + d_{\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma}) \quad (3.3)$$

onde $c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger$ e $c_{\mathbf{k}\sigma}$ são operadores fermiônicos que criam e aniquilam, respectivamente, elétrons na banda de condução com spin σ , d_{σ}^\dagger (d_{σ}) cria (aniquila) um elétron com spin σ no orbital localizado d na impureza e $n_{d\sigma} = d_{\sigma}^\dagger d_{\sigma}$ é o operador número para um elétron localizado de spin σ . Ressaltamos que a repulsão Coulombiana favorece a formação de momentos magnéticos localizados, pois inibe a dupla ocupação. Adicionalmente, é o acoplamento que causa transições entre um elétron inicialmente no estado da impureza para um estado \mathbf{k} da banda e vice versa. A taxa W associada a essa transição é dada pela regra de ouro de Fermi

$$W = 2\pi \frac{|V_{\mathbf{k}d}|^2 N(\epsilon_F)}{\hbar} \equiv \frac{2\Delta}{\hbar}, \quad (3.4)$$

onde $N(\epsilon_F)$ é a densidade de estados da banda de condução avaliada no nível de Fermi. Como resultado de tal transição, o nível de energia na impureza fica alargado, sendo essa largura governada por $\Delta = \pi |V_{\mathbf{k}d}|^2 N(\epsilon_F)$, a qual leva à hibridização entre a banda de condução e o estado da impureza.

Vemos que o modelo de Anderson depende de ϵ_d , U e de Δ . Dessa forma, o custo total em energia para colocar dois elétrons na impureza é $2\epsilon_d + U$. O sistema torna-se favorável à formação de momento magnético localizado nas condições $\epsilon_d < \epsilon_F$ e $\epsilon_d + U > \epsilon_F$. O diagrama de níveis de energia para esse caso é mostrado na Figura 3.1(a) e no caso (b), temos o regime conhecido pelo nome de valência intermediária, o qual não possui solução magnética.

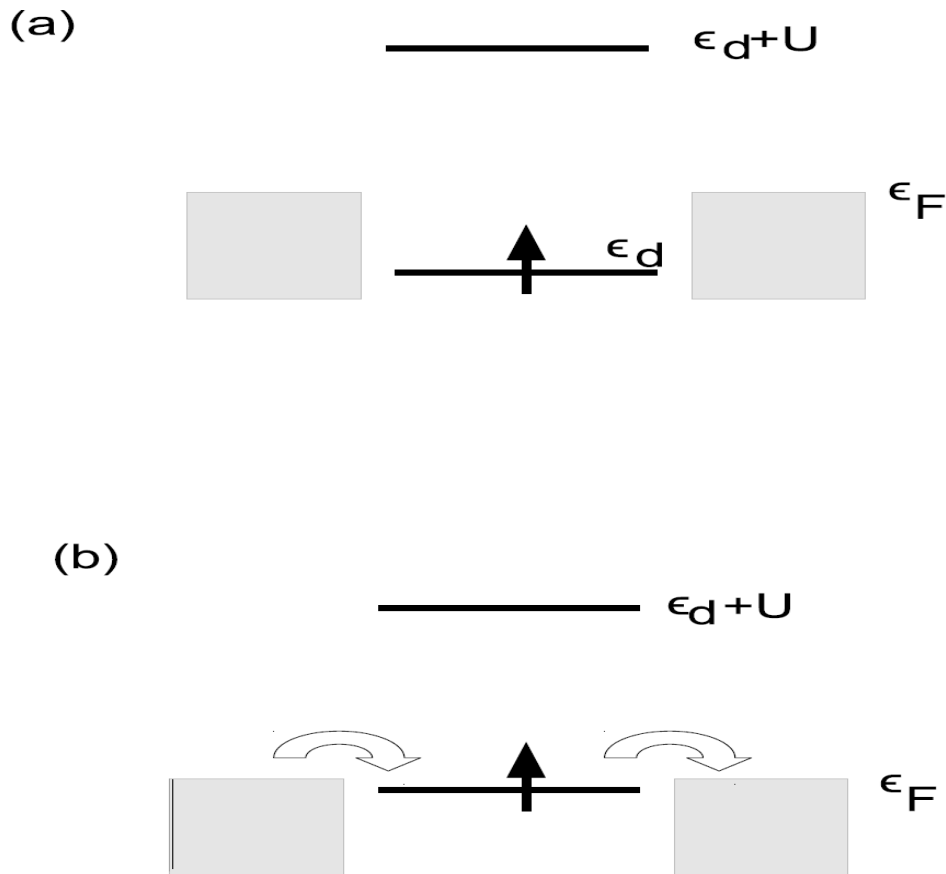


Figura 3.1: Níveis de energia de uma impureza no modelo de Anderson. (a) Para $\epsilon_d < \epsilon_F$ e $\epsilon_d + U > \epsilon_F$, a formação do momento localizado na impureza é favorecida. (b) Para $\epsilon_d \simeq \epsilon_F$, não há estado magnético (regime de valência intermediária).

4 Modelo Teórico

4.1 Hamiltoniano

Com o objetivo de estudar a LDOS de superfícies metálicas, consideramos uma ponta de STM fracamente acoplada a hospedeiros hibridizados a um par de impurezas na geometria de acoplamento lateral como ilustrado na figura 1.1. Os sistemas que analisamos são descritos pelo seguinte hamiltoniano

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}^{2D} + \mathcal{H}_{\text{tip}} + \mathcal{H}_{\text{tun}}. \quad (4.1)$$

O primeiro termo representa o modelo de anderson [7] generalizado para duas impurezas, que pode ser escrito como

$$\begin{aligned} \mathcal{H}^{2D} = & \sum_{s\sigma} \int dk \varepsilon_k c_{sk\sigma}^\dagger c_{sk\sigma} + \sum_{j\sigma} \varepsilon_{jd\sigma} d_{j\sigma}^\dagger d_{j\sigma} \\ & + \sum_j \mathcal{U}_j n_{j\uparrow} n_{j\downarrow} + \sum_{j\sigma} \int dk \mathcal{V}_{jk} (c_{sk\sigma}^\dagger d_{j\sigma} + \text{H.c.}). \end{aligned} \quad (4.2)$$

A superfície eletrônica dos hospedeiros são descritas pelos operadores $c_{sk\sigma}^\dagger$ ($c_{sk\sigma}$) para criação (aniquilação) de um elétron em um estado quântico rotulado pelo número de onda k , spin σ , e no caso do grafeno, um índice adicional s é utilizado para indexar os cones de Dirac [4]. Para o 2DEG, o número quântico s não existe. Como mostramos no capítulo 2, a relação de dispersão para os elétrons no grafeno é

$$\varepsilon_k = \hbar v_F k, \quad (4.3)$$

onde \hbar é a constante de Planck dividido por 2π e v_F a velocidade de Fermi. Para as impurezas, $d_{j\sigma}^\dagger$ ($d_{j\sigma}$) cria (aniquila) um elétron com spin σ no estado $\varepsilon_{jd\sigma}$, com o índice $j = 1, 2$ correspondente as impurezas acima e abaixo, respectivamente, da superfície do hospedeiro.

Os campos magnéticos, sob os quais as impurezas estão submetidas, dividem os níveis de energia localizados $\varepsilon_{jd\sigma}$ segundo a expressão

$$\varepsilon_{jd\sigma} = \varepsilon_{jd} - \sigma \frac{\Delta_j}{2}, \quad (4.4)$$

onde Δ_j é a energia Zeeman. Aqui empregamos campos magnéticos anti-paralelos estabelecido pela condição $\Delta_1 = -\Delta_2$.

O terceiro termo na equação (4.2) descreve a interação coulombiana \mathcal{U}_j nos níveis localizados das impurezas, com $n_{j\sigma} = d_{j\sigma}^\dagger d_{j\sigma}$. Finalmente, os últimos dois termos acopla o contínuo de estados da banda de condução do hospedeiro e os níveis $\varepsilon_{jd\sigma}$, onde H.c. corresponde ao hermitiano conjugado do primeiro termo. Esta hibridização ocorre no sítio da impureza por meio do acoplamento

$$\mathcal{V}_{jk} = \frac{v_0}{2\pi} \sqrt{\frac{\pi\Omega_0}{\mathcal{N}}} \sqrt{|k|}, \quad (4.5)$$

onde N é o número de estados de condução, e os parâmetros v_0 e Ω_0 denotam a hibridização entre o hospedeiro e a impureza, na dimensão da energia, e a área da célula unitária, respectivamente.

A densidade de estados dos hospedeiros por spin é obtida a partir da soma sobre a ocupação média dos níveis:

$$\begin{aligned} N &= \sum_{k,\sigma} \langle n_{k,\sigma} \rangle = \frac{\int d^2k}{\Delta\Omega_k} = \frac{\Omega_0}{4\pi^2} \int d^2k \\ &= \frac{\Omega_0}{4\pi^2} \int k dk d\theta = \frac{\Omega_0}{2\pi} \int k dk \\ &= \frac{\Omega_0}{2\pi} \int k \frac{dk}{d\varepsilon} d\varepsilon = \int \rho(\varepsilon) d\varepsilon \end{aligned} \quad (4.6)$$

onde definimos

$$\rho(\varepsilon) = \frac{\Omega_0}{2\pi} k \frac{dk}{d\varepsilon}, \quad (4.7)$$

assim, para o plano de grafeno temos

$$\rho_0 = \rho^{\text{GS}}(\varepsilon) = \sum_s \frac{\Omega_0}{2\pi} \frac{|\varepsilon|}{(\hbar v_F)^2} = \frac{|\varepsilon|}{D^2} \quad (4.8)$$

onde utilizamos a equação (4.3). No caso do 2DEG, esta expressão pode ser obtida a partir de sua relação de dispersão quadrática $\varepsilon_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$, logo

$$\rho_0 = \rho^{\text{2DEG}}(\varepsilon) = \frac{\Omega_0}{2\pi} \frac{D}{(\hbar v_F)^2} = \frac{1}{2D}, \quad (4.9)$$

onde D corresponde a energia na borda da banda.

A segunda parte da equação (4.1) é descrita pelo hamiltoniano

$$\mathcal{H}_{\text{tip}} = \sum_{q\sigma} \varepsilon_q b_{q\sigma}^\dagger b_{q\sigma} \quad (4.10)$$

que corresponde aos elétrons livres na ponta do STM com energia ε_q governados pelos operadores fermiônicos $b_{q\sigma}^\dagger$ e $b_{q\sigma}$.

Para realizar o acoplamento entre as equações (4.2) e (4.10), definimos o hamiltoniano de tunelamento

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{\text{tun}} &= t_c \sum_{\sigma} \psi_{\text{tip},\sigma}^\dagger \psi_{\text{host},\sigma} + \sum_{j\sigma} t_{dj} \psi_{\text{tip},\sigma}^\dagger d_{j\sigma} + \text{H.c.} \\ &= t_c \sum_{\sigma} \left(\psi_{\text{tip},\sigma}^\dagger \psi_{\text{host},\sigma} + \psi_{\text{tip},\sigma}^\dagger \sum_j \frac{t_{dj}}{t_c} d_{j\sigma} + \text{H.c.} \right) \\ &= t_c \sum_{\sigma} \psi_{\text{tip},\sigma}^\dagger \left(\psi_{\text{host},\sigma} + \sum_j \frac{t_{dj}}{t_c} d_{j\sigma} \right) + \text{H.c.} \\ &= t_c \sum_{\sigma} \psi_{\text{tip},\sigma}^\dagger \psi_{\sigma} + \text{H.c.}, \end{aligned} \quad (4.11)$$

onde

$$\psi_{\text{tip},\sigma} = \frac{1}{\sqrt{\mathcal{N}}} \sum_q b_{q\sigma} \quad (4.12)$$

é o operador fermiônico para o sítio da borda da ponta do STM,

$$\psi_{\text{host},\sigma} = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{\pi\Omega_0}{\mathcal{N}}} \sum_s \int \sqrt{|k|} dk c_{sk\sigma} \quad (4.13)$$

para o sítio do hospedeiro lateralmente acoplado as impurezas e

$$\psi_\sigma = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{\pi\Omega_0}{\mathcal{N}}} \sum_s \int \sqrt{|k|} dk c_{sk\sigma} + (\pi\rho_0 v_0) \sum_j q_j^e d_{j\sigma} \quad (4.14)$$

representa o operador que considera a interferência Fano por meio do fator de Fano extrínseco definido por

$$q_j^e = (\pi\rho_0 v_0)^{-1} \left(\frac{t_{dj}}{t_c} \right). \quad (4.15)$$

Note que os elétrons a partir da ponta são capazes de tunelar diretamente para três sítios distintos com diferentes termos de “hopping”, definidos como: tunelamento ponta-hospedeiro (t_c), tunelamento ponta-adatom (t_{d_1}) e ponta-segunda impureza (t_{d_2}). É válido mencionar que de acordo com as referências [64] e [65], estas amplitudes são integrais de superposição que hibridizam a ponta do STM com o sistema composto pelo hospedeiro com as impurezas. Assim, alterando estes parâmetros estamos manipulando o deslocamento vertical da ponta do STM.

4.2 LDOS para o sistema “hospedeiro+impurezas” na presença de pontas de STM e AFM

Pela teoria de resposta linear, em que a ponta do STM pode ser tratada perturbativamente, sabemos que a condutância diferencial para um dado spin pode ser obtida pela expressão [6]:

$$\mathcal{G}^\sigma(V) = \frac{e^2}{h} \pi \Gamma_c \int d\varepsilon \left\{ -\frac{\partial}{\partial \varepsilon} f(\varepsilon - eV) \right\} \rho_{\text{LDOS}}^\sigma(\varepsilon). \quad (4.16)$$

Trabalhando em um intervalo de temperaturas onde podemos seguramente definir

a função degrau como a distribuição de Fermi no hospedeiro, temos

$$\mathcal{G}^\sigma(V) \sim \frac{e^2}{h} \pi \Gamma_c \int d\varepsilon \delta(\varepsilon - eV) \rho_{\text{LDOS}}^\sigma(\varepsilon). \quad (4.17)$$

Logo a condutância diferencial por spin é determinada por

$$\mathcal{G}^\sigma(V) \sim \frac{e^2}{h} \pi \Gamma_c \rho_{\text{LDOS}}^\sigma(eV), \quad (4.18)$$

onde e é a carga do elétron, $\Gamma_c = 4\pi t_c^2 \rho_{\text{tip}}$, t_c é o termo de tunelamento entre a ponta do STM e o hospedeiro, ρ_{tip} é a densidade de estados da ponta, V é a voltagem aplicada e $\rho_{\text{LDOS}}^\sigma$ é a LDOS dependente do spin do sistema “hospedeiro+impurezas”.

Para obter a LDOS, definimos a função de Green retardada temporal para o operador da equação (4.14) da seguinte maneira

$$\mathcal{R}_\sigma(t) = -\frac{i}{\hbar} \theta(t) Z^{-1} \sum_n e^{-\beta \varepsilon_n} \langle n | [\psi_\sigma(t), \psi_\sigma^\dagger(0)]_+ | n \rangle, \quad (4.19)$$

onde $\theta(t)$ é a função degrau, Z é função de partição do sistema descrito pelo hamiltoniano da equação (4.2), e $[\dots, \dots]_+$ é o anticomutador do operador de campo segundo a representação de Heisenberg [39].

A LDOS dependente de spin pode ser obtida a partir da equação (4.19) da seguinte maneira

$$\rho_{\text{LDOS}}^\sigma = -\frac{1}{\pi} \text{Im}(\tilde{\mathcal{R}}_\sigma), \quad (4.20)$$

onde $\tilde{\mathcal{R}}_\sigma$ é a transformada de Fourier de $\mathcal{R}_\sigma(t)$. Assim, para obtermos uma expressão analítica para a LDOS precisamos calcular $\tilde{\mathcal{R}}_\sigma$, a qual iremos utilizar o método da equação de movimento. Então, substituindo a equação (4.14) na (4.19) temos,

$$\begin{aligned}
\mathcal{R}_\sigma(t) &= -\frac{i}{\hbar}\theta(t) Z^{-1} \sum_n e^{-\beta\varepsilon_n} \langle n | \left[\frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{\pi\Omega_0}{\mathcal{N}}} \sum_s \int \sqrt{|k|} dk c_{sk}(t) \right. \\
&\quad \left. + (\pi\rho_0 v_0) \sum_j q_j^e d_j(t), \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{\pi\Omega_0}{\mathcal{N}}} \sum_{\bar{s}} \int \sqrt{|k|} dk c_{\bar{s}q}^\dagger(0) + (\pi\rho_0 v_0) \sum_l q_l^e d_l^\dagger(0) \right]_+ |n\rangle \\
&= \left(\frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{\pi\Omega_0}{\mathcal{N}}} \right)^2 \sum_{\bar{s}\bar{s}} \int \sqrt{|k|} dk \sqrt{|q|} dq \mathcal{R}_{c_{sk}c_{\bar{s}q}}^\sigma \\
&\quad + (\pi\rho_0 v_0) \sum_{js} q_j^e \left(\frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{\pi\Omega_0}{\mathcal{N}}} \right) \int \sqrt{|k|} dk (\mathcal{R}_{d_j c_{sk}}^\sigma + \mathcal{R}_{c_{sk} d_j}^\sigma) \\
&\quad + (\pi\rho_0 v_0)^2 \sum_{jl} q_j^e q_l^e \mathcal{R}_{d_j d_l}^\sigma, \tag{4.21}
\end{aligned}$$

em termos das funções de Green $\mathcal{R}_{c_{sk}c_{\bar{s}q}}^\sigma$, $\mathcal{R}_{d_j c_{sk}}^\sigma$, $\mathcal{R}_{c_{sk} d_j}^\sigma$ e $\mathcal{R}_{d_j d_l}^\sigma$.

Primeiro precisamos determinar

$$\mathcal{R}_{c_{sk}c_{\bar{s}q}}^\sigma(t) = -\frac{i}{\hbar}\theta(t) Z^{-1} \sum_n e^{-\beta\varepsilon_n} \langle n | \left[c_{sk\sigma}(t), c_{\bar{s}q\sigma}^\dagger(0) \right]_+ |n\rangle. \tag{4.22}$$

Derivando, obtemos

$$\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial t} \mathcal{R}_{c_{sk}c_{\bar{s}q}}^\sigma(t) &= -\frac{i}{\hbar}\delta(t) Z^{-1} \sum_n e^{-\beta\varepsilon_n} \langle n | \left[c_{sk\sigma}(t), c_{\bar{s}q\sigma}^\dagger(0) \right]_+ |n\rangle \\
&\quad - \frac{i}{\hbar}\theta(t) Z^{-1} \sum_n e^{-\beta\varepsilon_n} \langle n | \left[\frac{\partial}{\partial t} c_{sk\sigma}(t), c_{\bar{s}q\sigma}^\dagger(0) \right]_+ |n\rangle. \tag{4.23}
\end{aligned}$$

Pela equação de Heisenberg temos

$$\begin{aligned}
i\hbar \frac{\partial}{\partial t} c_{s'k'\sigma'}(t) &= [c_{s'k'\sigma'}, \mathcal{H}^{2D}] = \sum_{s\sigma} \int dk \varepsilon_k [c_{s'k'\sigma'}, c_{sk\sigma}^\dagger c_{sk\sigma}] + \sum_{j\sigma} \varepsilon_{jd\sigma} [c_{s'k'\sigma'}, d_{j\sigma}^\dagger d_{j\sigma}] \\
&\quad + \sum_j \mathcal{U}_j [c_{s'k'\sigma'}, n_{j\uparrow} n_{j\downarrow}] + \sum_{j\sigma} \int dk \mathcal{V}_{jk} [c_{s'k'\sigma'}, c_{sk\sigma}^\dagger d_{j\sigma} + \text{H.c.}]. \tag{4.24}
\end{aligned}$$

Calculando separadamente:

$$\begin{aligned}
\sum_{s\sigma} \int dk \varepsilon_k [c_{s'k'\sigma'}, c_{sk\sigma}^\dagger c_{sk\sigma}] &= \sum_{s\sigma} \int dk \varepsilon_k \left([c_{s'k'\sigma'}, c_{sk\sigma}^\dagger]_+ c_{sk\sigma} - c_{sk\sigma}^\dagger [c_{s'k'\sigma'}, c_{sk\sigma}]_+ \right) \\
&= \sum_{s\sigma} \int dk \varepsilon_k (\delta_{ss'} \delta_{\sigma\sigma'} \delta_{kk'} c_{sk\sigma} - 0) \\
&= \sum_{s\sigma} \int dk \varepsilon_k \delta_{ss'} \delta_{\sigma\sigma'} \delta_{kk'} c_{sk\sigma} = \varepsilon_k c_{sk\sigma}(t), \quad (4.25)
\end{aligned}$$

$$\sum_{j\sigma} \varepsilon_{jd\sigma} [c_{s'k'\sigma'}, d_{j\sigma}^\dagger d_{j\sigma}] = \sum_{j\sigma} \varepsilon_{jd\sigma} \left([c_{s'k'\sigma'}, d_{j\sigma}^\dagger]_+ d_{j\sigma} - d_{j\sigma}^\dagger [c_{s'k'\sigma'}, d_{j\sigma}]_+ \right) = 0, \quad (4.26)$$

$$\sum_j \mathcal{U}_j [c_{s'k'\sigma'}, n_{j\uparrow} n_{j\downarrow}] = \sum_j \mathcal{U}_j \left([c_{s'k'\sigma'}, n_{j\uparrow}]_+ n_{j\downarrow} - n_{j\uparrow} [c_{s'k'\sigma'}, n_{j\downarrow}]_+ \right) = 0 \quad (4.27)$$

e

$$\begin{aligned}
\sum_{js\sigma} \int dk \mathcal{V}_{jk} [c_{s'k'\sigma'}, c_{sk\sigma}^\dagger d_{j\sigma} + \text{H.c.}] &= \sum_{js\sigma} \int dk \mathcal{V}_{jk} \left([c_{s'k'\sigma'}, c_{sk\sigma}^\dagger]_+ d_{j\sigma} + [c_{s'k'\sigma'}, d_{j\sigma}^\dagger]_+ c_{sk\sigma} \right) \\
&= \sum_{js\sigma} \int dk \mathcal{V}_{jk} \left([c_{s'k'\sigma'}, c_{sk\sigma}^\dagger]_+ d_{j\sigma} - c_{sk\sigma}^\dagger [c_{s'k'\sigma'}, d_{j\sigma}]_+ \right. \\
&\quad \left. + [c_{s'k'\sigma'}, d_{j\sigma}^\dagger]_+ c_{sk\sigma} - d_{j\sigma}^\dagger [c_{s'k'\sigma'}, c_{sk\sigma}]_+ \right) \\
&= \sum_{js\sigma} \int dk \mathcal{V}_{jk} \delta_{ss'} \delta_{\sigma\sigma'} \delta_{kk'} d_{j\sigma} = \sum_j \mathcal{V}_{jk} d_{j\sigma}, \quad (4.28)
\end{aligned}$$

concluimos

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} c_{sk\sigma}(t) = [c_{sk\sigma}, \mathcal{H}^{2D}] = \varepsilon_k c_{sk\sigma}(t) + \sum_j \mathcal{V}_{jk} d_{j\sigma}(t) \quad (4.29)$$

e

$$\frac{\partial}{\partial t} c_{sk\sigma}(t) = -\frac{i}{\hbar} \left(\varepsilon_k c_{sk\sigma}(t) + \sum_j \mathcal{V}_{jk} d_{j\sigma}(t) \right). \quad (4.30)$$

Substituindo a equação (4.30) na (4.23), temos

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \mathcal{R}_{c_{sk}c_{\bar{s}q}}^\sigma(t) &= -\frac{i}{\hbar} \delta(t) Z^{-1} \sum_n e^{-\beta\varepsilon_n} \langle n | [c_{sk\sigma}(t), c_{\bar{s}q\sigma}^\dagger(0)]_+ | n \rangle \\ &\quad - \frac{i}{\hbar} \theta(t) Z^{-1} \sum_n e^{-\beta\varepsilon_n} \langle n | [c_{sk\sigma}(t), c_{\bar{s}q\sigma}^\dagger(0)]_+ | n \rangle \left(-\varepsilon_k \frac{i}{\hbar} \right) \\ &\quad - \frac{i}{\hbar} \theta(t) Z^{-1} \sum_n e^{-\beta\varepsilon_n} \langle n | [d_{j\sigma}(t), c_{\bar{s}q\sigma}^\dagger(0)]_+ | n \rangle \\ &\quad \times \left(-\frac{i}{\hbar} \sum_j \mathcal{V}_{jk} \right). \end{aligned} \quad (4.31)$$

Logo,

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \mathcal{R}_{c_{sk}c_{\bar{s}q}}^\sigma(t) &= -\frac{i}{\hbar} \delta(t) Z^{-1} \sum_n e^{-\beta\varepsilon_n} \langle n | [c_{sk\sigma}(t), c_{\bar{s}q\sigma}^\dagger(0)]_+ | n \rangle \\ &\quad - \frac{i}{\hbar} \varepsilon_k \mathcal{R}_{c_{sk}c_{\bar{s}q}}^\sigma - \frac{i}{\hbar} \sum_j \mathcal{V}_{jk} \mathcal{R}_{d_j c_{\bar{s}q}}^\sigma. \end{aligned} \quad (4.32)$$

Tomando a transformada de Fourier de $\frac{\partial}{\partial t} \mathcal{R}_{c_{sk}c_{\bar{s}q}}^\sigma(t)$, ganhamos

$$\begin{aligned} -\frac{i}{\hbar} \varepsilon^+ \tilde{\mathcal{R}}_{c_{sk}c_{\bar{s}q}}^\sigma(\varepsilon^+) &= \int \frac{\partial}{\partial t} \mathcal{R}_{c_{sk}c_{\bar{s}q}}^\sigma(t) e^{\frac{i}{\hbar} \varepsilon^+ t} dt \\ &= -\frac{i}{\hbar} \int \delta(t) Z^{-1} \sum_n e^{-\beta\varepsilon_n} \langle n | [c_{sk\sigma}(t), c_{\bar{s}q\sigma}^\dagger(0)]_+ | n \rangle e^{\frac{i}{\hbar} \varepsilon^+ t} dt \\ &\quad - \frac{i}{\hbar} \varepsilon_k \int \mathcal{R}_{c_{sk}c_{\bar{s}q}}^\sigma e^{\frac{i}{\hbar} \varepsilon^+ t} dt - \frac{i}{\hbar} \sum_j \mathcal{V}_{jk} \int \mathcal{R}_{d_j c_{\bar{s}q}}^\sigma e^{\frac{i}{\hbar} \varepsilon^+ t} dt \end{aligned} \quad (4.33)$$

onde $\varepsilon^+ = \varepsilon + i\eta$ e $\eta \rightarrow 0^+$. Assim,

$$-\frac{i}{\hbar} \varepsilon^+ \tilde{\mathcal{R}}_{c_{sk}c_{\bar{s}q}}^\sigma(\varepsilon^+) = -\frac{i}{\hbar} \left(\delta(k-q) \delta_{s\bar{s}} + \varepsilon_k \tilde{\mathcal{R}}_{c_{sk}c_{\bar{s}q}}^\sigma + \sum_j \mathcal{V}_{jk} \tilde{\mathcal{R}}_{d_j c_{\bar{s}q}}^\sigma \right). \quad (4.34)$$

Logo obtemos

$$\tilde{\mathcal{R}}_{c_{sk}c_{sq}}^\sigma = \frac{\delta(k-q)\delta_{s\bar{s}}}{\varepsilon^+ - \varepsilon_k} + \sum_j \frac{\mathcal{V}_{jk}}{\varepsilon^+ - \varepsilon_k} \tilde{\mathcal{R}}_{d_j c_{sq}}^\sigma. \quad (4.35)$$

Note que, precisamos calcular também a função de Green mista $\tilde{\mathcal{R}}_{d_j c_{sq}}^\sigma$. Para isto vamos definir a seguinte função de Green avançada

$$\mathcal{A}_{d_j c_{sq}}^\sigma(t) = \frac{i}{\hbar} \theta(-t) Z^{-1} \sum_n e^{-\beta\varepsilon_n} \langle n | [d_{j\sigma}^\dagger(0), c_{sq\sigma}(t)]_+ | n \rangle, \quad (4.36)$$

cuja derivada temporal fica

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \mathcal{A}_{d_j c_{sq}}^\sigma(t) &= -\frac{i}{\hbar} \delta(t) Z^{-1} \sum_n e^{-\beta\varepsilon_n} \langle n | [d_{j\sigma}^\dagger(0), c_{sq\sigma}(t)]_+ | n \rangle \\ &+ \frac{i}{\hbar} \theta(-t) Z^{-1} \sum_n e^{-\beta\varepsilon_n} \langle n | \left[d_{j\sigma}^\dagger(0), \frac{\partial}{\partial t} c_{sq\sigma}(t) \right]_+ | n \rangle. \end{aligned} \quad (4.37)$$

Utilizando a equação (4.30) (intercalando $k \leftrightarrow q$), podemos escrever

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \mathcal{A}_{d_j c_{sq}}^\sigma(t) &= -\frac{i}{\hbar} \delta(t) Z^{-1} \sum_n e^{-\beta\varepsilon_n} \langle n | [d_{j\sigma}^\dagger(0), c_{sq\sigma}(t)]_+ | n \rangle \\ &- \frac{i}{\hbar} \varepsilon_q \mathcal{A}_{d_j c_{sq}}^\sigma(t) - \frac{i}{\hbar} \sum_l \mathcal{V}_{lq} \mathcal{A}_{d_j d_l}^\sigma(t). \end{aligned} \quad (4.38)$$

A transformada de Fourier da equação (4.38) torna-se

$$\begin{aligned} -\frac{i}{\hbar} \varepsilon^- \tilde{\mathcal{A}}_{d_j c_{sq}}^\sigma(\varepsilon^-) &= \int \frac{\partial}{\partial t} \mathcal{A}_{d_j c_{sq}}^\sigma(t) e^{\frac{i}{\hbar} \varepsilon^- t} dt \\ &= -\frac{i}{\hbar} \int \delta(t) Z^{-1} \sum_n e^{-\beta\varepsilon_n} \langle n | [d_{j\sigma}^\dagger(0), c_{sq\sigma}(t)]_+ | n \rangle e^{\frac{i}{\hbar} \varepsilon^- t} dt \\ &- \frac{i}{\hbar} \varepsilon_q \int \mathcal{A}_{d_j c_{sq}}^\sigma e^{\frac{i}{\hbar} \varepsilon^- t} dt - \frac{i}{\hbar} \sum_l \mathcal{V}_{lq} \int \mathcal{A}_{d_j d_l}^\sigma e^{\frac{i}{\hbar} \varepsilon^- t} dt, \end{aligned} \quad (4.39)$$

o que nos leva a

$$\varepsilon^- \tilde{\mathcal{A}}_{d_j c_{sq}}^\sigma = \varepsilon_q \tilde{\mathcal{A}}_{d_j c_{sq}}^\sigma + \sum_l \mathcal{V}_{lq} \tilde{\mathcal{A}}_{d_j d_l}^\sigma, \quad (4.40)$$

onde $\varepsilon^- = \varepsilon - i\eta$. Aplicando a propriedade $\tilde{\mathcal{R}}_{d_j c_{sq}}^\sigma = (\tilde{\mathcal{A}}_{d_j c_{sq}}^\sigma)^\dagger$ na equação (4.40), ficamos com

$$\varepsilon^+ \tilde{\mathcal{R}}_{d_j c_{sq}}^\sigma = \varepsilon_q \tilde{\mathcal{R}}_{d_j c_{sq}}^\sigma + \sum_l \mathcal{V}_{lq} \tilde{\mathcal{R}}_{d_j d_l}^\sigma, \quad (4.41)$$

logo

$$\tilde{\mathcal{R}}_{d_j c_{sq}}^\sigma = \sum_l \frac{\mathcal{V}_{lq}}{\varepsilon^+ - \varepsilon_q} \tilde{\mathcal{R}}_{d_j d_l}^\sigma. \quad (4.42)$$

Aplicando procedimento análogo, obtemos também a seguinte função de Green mista

$$\tilde{\mathcal{R}}_{c_{sq} d_j}^\sigma = \sum_l \frac{\mathcal{V}_{lq}}{\varepsilon^+ - \varepsilon_q} \tilde{\mathcal{R}}_{d_l d_j}^\sigma. \quad (4.43)$$

Agora substituindo a equação (4.42) na (4.35), obtemos

$$\tilde{\mathcal{R}}_{c_{sk} c_{sq}}^\sigma = \frac{\delta(k-q) \delta_{s\bar{s}}}{\varepsilon^+ - \varepsilon_k} + \sum_{jl} \left(\frac{\mathcal{V}_{jk}}{\varepsilon^+ - \varepsilon_k} \right) \left(\frac{\mathcal{V}_{lq}}{\varepsilon^+ - \varepsilon_q} \right) \tilde{\mathcal{R}}_{d_j d_l}^\sigma. \quad (4.44)$$

Tomando a transformada de Fourier da equação (4.21)

$$\tilde{\mathcal{R}}_\sigma(\varepsilon^+) = \int \mathcal{R}_\sigma(t) e^{\frac{i}{\hbar} \varepsilon^+ t} dt, \quad (4.45)$$

obtemos

$$\begin{aligned} \tilde{\mathcal{R}}_\sigma(\varepsilon^+) &= \left(\frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{\pi\Omega_0}{\mathcal{N}}} \right)^2 \sum_{s\bar{s}} \int \sqrt{|k|} dk \sqrt{|q|} dq \tilde{\mathcal{R}}_{c_{sk} c_{sq}}^\sigma \\ &+ (\pi\rho_0 v_0) \sum_{js} q_j^e \left(\frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{\pi\Omega_0}{\mathcal{N}}} \right) \int \sqrt{|k|} dk (\tilde{\mathcal{R}}_{d_j c_{sk}}^\sigma + \tilde{\mathcal{R}}_{c_{sk} d_j}^\sigma) \\ &+ (\pi\rho_0 v_0)^2 \sum_{jl} q_j^e q_l^e \tilde{\mathcal{R}}_{d_j d_l}^\sigma. \end{aligned} \quad (4.46)$$

Assim, substituindo as equações (4.42), (4.43) e (4.44) na equação (4.46), temos

$$\begin{aligned}
\tilde{\mathcal{R}}_\sigma(\varepsilon^+) &= \left(\frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{\pi\Omega_0}{\mathcal{N}}} \right)^2 \sum_{s\bar{s}} \int \sqrt{|k|} dk \sqrt{|q|} dq \\
&\times \left(\frac{\delta(k-q)\delta_{s\bar{s}}}{\varepsilon^+ - \varepsilon_k} + \sum_{jl} \left(\frac{\mathcal{V}_{jk}}{\varepsilon^+ - \varepsilon_k} \right) \left(\frac{\mathcal{V}_{lq}}{\varepsilon^+ - \varepsilon_q} \right) \tilde{\mathcal{R}}_{d_j d_l}^\sigma \right) \\
&+ (\pi\rho_0 v_0) \sum_{js} q_j^e \left(\frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{\pi\Omega_0}{\mathcal{N}}} \right) \int \sqrt{|k|} dk \left(\sum_l \frac{\mathcal{V}_{lq}}{\varepsilon^+ - \varepsilon_q} \tilde{\mathcal{R}}_{d_j d_l}^\sigma + \sum_l \frac{\mathcal{V}_{lq}}{\varepsilon^+ - \varepsilon_q} \tilde{\mathcal{R}}_{d_l d_j}^\sigma \right) \\
&+ (\pi\rho_0 v_0)^2 \sum_{jl} q_j^e q_l^e \tilde{\mathcal{R}}_{d_j d_l}^\sigma. \tag{4.47}
\end{aligned}$$

Separando em partes real e imaginária, podemos escrever:

$$\begin{aligned}
\tilde{\mathcal{R}}_\sigma(\varepsilon^+) &= \left(\frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{\pi\Omega_0}{\mathcal{N}}} \right)^2 \sum_s \int k dk \frac{1}{\varepsilon^+ - \varepsilon_k} + \left(\frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{\pi\Omega_0}{\mathcal{N}}} \right)^2 \sum_{s\bar{s}} \int \sqrt{|k|} dk \sqrt{|q|} dq \\
&\times \left(\sum_{jl} \left(\frac{\mathcal{V}_{jk}}{\varepsilon - \varepsilon_k} - i\pi\mathcal{V}_{jk}\delta(\varepsilon - \varepsilon_k) \right) \left(\frac{\mathcal{V}_{lq}}{\varepsilon - \varepsilon_q} - i\pi\mathcal{V}_{lq}\delta(\varepsilon - \varepsilon_q) \right) \tilde{\mathcal{R}}_{d_j d_l}^\sigma \right) \\
&+ (\pi\rho_0 v_0) \sum_{js} q_j^e \left(\frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{\pi\Omega_0}{\mathcal{N}}} \right) \int \sqrt{|k|} dk \sum_l \left(\frac{\mathcal{V}_{lq}}{\varepsilon - \varepsilon_q} - i\pi\mathcal{V}_{lq}\delta(\varepsilon - \varepsilon_q) \right) \\
&\times \left(\tilde{\mathcal{R}}_{d_j d_l}^\sigma + \tilde{\mathcal{R}}_{d_l d_j}^\sigma \right) + (\pi\rho_0 v_0)^2 \sum_{jl} q_j^e q_l^e \tilde{\mathcal{R}}_{d_j d_l}^\sigma \tag{4.48}
\end{aligned}$$

onde utilizamos a função delta $\delta(\varepsilon - \varepsilon_k) = \frac{1}{\pi} \frac{\eta}{(\varepsilon - \varepsilon_k)^2 + \eta^2}$. Vamos definir os seguintes parâmetros:

$$q_j = \frac{1}{\pi\rho_0 v_0^2} \text{Re}\Sigma_{jj} \tag{4.49}$$

como o parâmetro de Fano [6] devido o acoplamento entre o hospedeiro e a impureza e

$$\mathcal{F}_j = -\frac{1}{\pi\rho_0 v_0^2} \text{Im}\Sigma_{jj} \tag{4.50}$$

com

$$\Sigma_{\tilde{l}} = \sum_s \int dk \frac{\mathcal{V}_{lk} \mathcal{V}_{\tilde{l}k}}{\varepsilon^+ - \varepsilon_k}, \quad (4.51)$$

sendo a auto-energia não interagente das impurezas [6]. Assim, podemos escrever a equação (4.48) da seguinte maneira

$$\begin{aligned} \tilde{\mathcal{R}}_\sigma(\varepsilon^+) &= \left(\frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{\pi\Omega_0}{\mathcal{N}}} \right)^2 \sum_s \int k dk \frac{1}{\varepsilon^+ - \varepsilon_k} \\ &+ (\pi\rho_0 v_0)^2 \sum_{jl} (q_j - i\mathcal{F}_j) \tilde{\mathcal{R}}_{d_j d_l}^\sigma (q_l - i\mathcal{F}_l) \\ &+ (\pi\rho_0 v_0)^2 \sum_{jl} q_j^e (q_l - i\mathcal{F}_l) (\tilde{\mathcal{R}}_{d_j d_l}^\sigma + \tilde{\mathcal{R}}_{d_l d_j}^\sigma) \\ &+ (\pi\rho_0 v_0)^2 \sum_{jl} q_j^e q_l^e \tilde{\mathcal{R}}_{d_j d_l}^\sigma. \end{aligned} \quad (4.52)$$

Desta forma, a partir das equações (4.20) e (4.52), podemos obter a LDOS por spin

$$\begin{aligned} \rho_{\text{LDOS}}^\sigma &= \rho_0 + \rho_0 \Gamma \sum_j [(\mathcal{F}_j^2 - q_{Tj}^2) \text{Im}(\tilde{\mathcal{R}}_{d_j d_j}^\sigma) \\ &+ 2q_{Tj} \mathcal{F}_j \text{Re}(\tilde{\mathcal{R}}_{d_j d_j}^\sigma)] \\ &+ \rho_0 \Gamma \sum_{j \neq l} [(\mathcal{F}_j \mathcal{F}_l - q_{Tj} q_{Tl}) \text{Im}(\tilde{\mathcal{R}}_{d_j d_l}^\sigma) \\ &+ (q_{Tj} \mathcal{F}_l + q_{Tl} \mathcal{F}_j) \text{Re}(\tilde{\mathcal{R}}_{d_j d_l}^\sigma)] \end{aligned} \quad (4.53)$$

onde definimos o parâmetro de Fano total

$$q_{Tj} = q_j + q_j^e, \quad (4.54)$$

com $\Gamma = \pi v_0^2 \rho_0$ sendo o parâmetro de Anderson. Podemos ainda, escrever a LDOS por spin, dada pela equação (4.53), da seguinte maneira

$$\rho_{\text{LDOS}}^\sigma = \rho_{1122}^\sigma + \rho_{1221}^\sigma \quad (4.55)$$

onde

$$\begin{aligned} \rho_{1122}^\sigma &= \rho_0 \Gamma \sum_j [(\mathcal{F}_j^2 - q_{Tj}^2) \text{Im}(\tilde{\mathcal{R}}_{d_j d_j}^\sigma) \\ &\quad + 2q_{Tj} \mathcal{F}_j \text{Re}(\tilde{\mathcal{R}}_{d_j d_j}^\sigma)] \end{aligned} \quad (4.56)$$

é o termo direto da LDOS, pois ele depende de funções de Green das impurezas diretas, e

$$\begin{aligned} \rho_{1221}^\sigma &= \rho_0 \Gamma \sum_{j \neq l} [(\mathcal{F}_j \mathcal{F}_l - q_{Tj} q_{Tl}) \text{Im}(\tilde{\mathcal{R}}_{d_j d_l}^\sigma) \\ &\quad + (q_{Tj} \mathcal{F}_l + q_{Tl} \mathcal{F}_j) \text{Re}(\tilde{\mathcal{R}}_{d_j d_l}^\sigma)] \end{aligned} \quad (4.57)$$

representa o termo misto da LDOS que surge a partir da interferência entre as impurezas, ele depende de funções de Green das impurezas mistas.

A equação (4.55) é o principal resultado analítico deste trabalho. Ela descreve a LDOS dependente do spin de hospedeiros bidimensionais com duas impurezas na geometria de acoplamento lateral, como ilustrado na figura 1.1. Esta equação demonstra a dependência da LDOS com as funções de Green das impurezas diretas e mistas, $\tilde{\mathcal{R}}_{d_j d_j}^\sigma$ e $\tilde{\mathcal{R}}_{d_j d_l}^\sigma$, respectivamente, e com o parâmetro de Fano total dado pela equação (4.54). Devemos ressaltar que a energia Zeeman das impurezas determina a dependência de spin da LDOS, ou seja, é possível separar as componentes de spin da LDOS, e, portanto, determinar o comportamento do sistema como um filtro de spins, em particular, apenas para o sistema onde o grafeno é o hospedeiro, como veremos mais adiante.

Com o intuito de estudar a dependência de spin da LDOS, bem como o efeito do filtro de spins, introduzimos a expressão

$$\text{LDOS} = \frac{\rho_{\text{LDOS}}^\uparrow + \rho_{\text{LDOS}}^\downarrow}{\rho^{\text{GS}}(D)}, \quad (4.58)$$

para a LDOS adimensional, onde utilizamos a equação (4.8) para $\rho^{\text{GS}}(D)$, e

$$\text{SP} = \frac{\mathcal{G}^\uparrow - \mathcal{G}^\downarrow}{\mathcal{G}^\uparrow + \mathcal{G}^\downarrow} \quad (4.59)$$

para a polarização de transporte do sistema, estabelecida a partir da equação (4.18).

5 Funções de Green das impurezas

Como acabamos de ver no capítulo anterior, a expressão obtida para a LDOS dos sistemas apresenta uma dependência nas funções de Green das impurezas. Por este motivo, no presente capítulo calculamos as funções $\tilde{\mathcal{R}}_{d_j d_l}^\sigma$ para $(j, l = 1, 2)$ segundo a aproximação Hubbard I [62]. Este método fornece resultados confiáveis fora do regime Kondo, já que a função de Green envolve uma interação entre os spins dos elétrons da impureza e da banda de condução, que é negligenciada pela aproximação Hubbard I. Essa interação se torna importante quando o sistema se encontra abaixo de uma certa temperatura característica, chamada de temperatura Kondo (T_K). Portanto, essa aproximação é válida para sistemas fora do regime Kondo. Assim, começamos aplicando o método da equação de movimento a seguinte função de Green mista

$$\mathcal{R}_{d_j d_l}^\sigma(t) = -\frac{i}{\hbar} \theta(t) Z^{-1} \sum_n e^{-\beta \varepsilon_n} \langle n | [d_{j\sigma}(t), d_{l\sigma}^\dagger(0)]_+ | n \rangle, \quad (5.1)$$

cuja derivada resulta em

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \mathcal{R}_{d_j d_l}^\sigma(t) &= -\frac{i}{\hbar} \delta(t) Z^{-1} \sum_n e^{-\beta \varepsilon_n} \langle n | [d_{j\sigma}(t), d_{l\sigma}^\dagger(0)]_+ | n \rangle \\ &\quad - \frac{i}{\hbar} \theta(t) Z^{-1} \sum_n e^{-\beta \varepsilon_n} \langle n | \left[\frac{\partial}{\partial t} d_{j\sigma}(t), d_{l\sigma}^\dagger(0) \right]_+ | n \rangle. \end{aligned} \quad (5.2)$$

Utilizando a equação de Heisenberg temos

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} d_{j'\sigma'}(t) &= [d_{j'\sigma'}, \mathcal{H}^{2D}] = \sum_{s\sigma} \int dk \varepsilon_k [d_{j'\sigma'}, c_{sk\sigma}^\dagger c_{sk\sigma}] + \sum_{j\sigma} \varepsilon_{jd\sigma} [d_{j'\sigma'}, d_{j\sigma}^\dagger d_{j\sigma}] \\ &\quad + \sum_j \mathcal{U}_j [d_{j'\sigma'}, n_{j\uparrow} n_{j\downarrow}] + \sum_{j\sigma} \int dk \mathcal{V}_{jk} [d_{j'\sigma'}, c_{sk\sigma}^\dagger d_{j\sigma} + \text{H.c.}]. \end{aligned} \quad (5.3)$$

Calculando separadamente obtemos

$$\sum_{s\sigma} \int dk \varepsilon_k [d_{j'\sigma'}, c_{sk\sigma}^\dagger c_{sk\sigma}] = \sum_{s\sigma} \int dk \varepsilon_k \left([d_{j'\sigma'}, c_{sk\sigma}^\dagger]_+ c_{sk\sigma} - c_{sk\sigma}^\dagger [d_{j'\sigma'}, c_{sk\sigma}]_+ \right) = 0 \quad (5.4)$$

$$\begin{aligned} \sum_{j\sigma} \varepsilon_{jd\sigma} [d_{j'\sigma'}, d_{j\sigma}^\dagger d_{j\sigma}] &= \sum_{j\sigma} \varepsilon_{jd\sigma} \left([d_{j'\sigma'}, d_{j\sigma}^\dagger]_+ d_{j\sigma} - d_{j\sigma}^\dagger [d_{j'\sigma'}, d_{j\sigma}]_+ \right) \\ &= \sum_{j\sigma} \varepsilon_{jd\sigma} \delta_{jj'} \delta_{\sigma\sigma'} d_{j\sigma} = \varepsilon_{jd\sigma} d_{j\sigma}, \end{aligned} \quad (5.5)$$

$$\begin{aligned} \sum_j \mathcal{U}_j [d_{j'\sigma'}, n_{j\uparrow} n_{j\downarrow}] &= \sum_j \mathcal{U}_j \left([d_{j'\sigma'}, n_{j\uparrow}] n_{j\downarrow} + n_{j\uparrow} [d_{j'\sigma'}, n_{j\downarrow}] \right) \\ &= \sum_j \mathcal{U}_j \left(([d_{j'\sigma'}, d_{j\uparrow}^\dagger]_+ d_{j\uparrow} - d_{j\uparrow}^\dagger [d_{j'\sigma'}, d_{j\uparrow}]_+) d_{j\downarrow}^\dagger d_{j\downarrow} \right. \\ &\quad \left. + d_{j\uparrow}^\dagger d_{j\uparrow} ([d_{j'\sigma'}, d_{j\downarrow}^\dagger]_+ d_{j\downarrow} - d_{j\downarrow}^\dagger [d_{j'\sigma'}, d_{j\downarrow}]_+) \right) \\ &= \sum_j \mathcal{U}_j \left(\delta_{jj'} \delta_{\sigma\uparrow} d_{j\uparrow}^\dagger d_{j\downarrow}^\dagger d_{j\downarrow} + d_{j\uparrow}^\dagger d_{j\uparrow} \delta_{jj'} \delta_{\sigma\downarrow} d_{j\downarrow} \right) \\ &= \mathcal{U}_j d_{j\sigma} n_{j\sigma'} \end{aligned} \quad (5.6)$$

e

$$\begin{aligned} \sum_{js\sigma} \int dk \mathcal{V}_{jk} [d_{j'\sigma'}, c_{sk\sigma}^\dagger d_{j\sigma} + \text{H.c.}] &= \sum_{js\sigma} \int dk \mathcal{V}_{jk} \left([d_{j'\sigma'}, c_{sk\sigma}^\dagger d_{j\sigma}] + [d_{j'\sigma'}, d_{j\sigma}^\dagger c_{sk\sigma}] \right) \\ &= \sum_{js\sigma} \int dk \mathcal{V}_{jk} \left([d_{j'\sigma'}, c_{sk\sigma}^\dagger]_+ d_{j\sigma} - c_{sk\sigma}^\dagger [d_{j'\sigma'}, d_{j\sigma}]_+ \right. \\ &\quad \left. + [d_{j'\sigma'}, d_{j\sigma}^\dagger]_+ c_{sk\sigma} - d_{j\sigma}^\dagger [d_{j'\sigma'}, c_{sk\sigma}]_+ \right) \\ &= \sum_{js\sigma} \int dk \mathcal{V}_{jk} \delta_{jj'} \delta_{\sigma\sigma'} c_{sk\sigma} = \sum_s \int dk \mathcal{V}_{jk} c_{sk\sigma} \\ &= \sum_s \int dk \mathcal{V}_{jk} c_{sk\sigma}. \end{aligned} \quad (5.7)$$

Logo temos

$$\frac{\partial}{\partial t} d_{j\sigma}(t) = -\frac{i}{\hbar} \left(\varepsilon_{jd\sigma} d_{j\sigma}(t) + \mathcal{U}_j d_{j\sigma}(t) n_{j\sigma'} + \sum_s \int dk \mathcal{V}_{jk} c_{sk\sigma}(t) \right). \quad (5.8)$$

Substituindo a equação (5.7) na (5.2) obtemos

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \mathcal{R}_{d_j d_l}^\sigma(t) &= -\frac{i}{\hbar} \delta(t) Z^{-1} \sum_n e^{-\beta \varepsilon_n} \langle n | [d_{j\sigma}(t), d_{l\sigma}^\dagger(0)]_+ | n \rangle \\ &\quad - \frac{i}{\hbar} \varepsilon_{jd\sigma} \mathcal{R}_{d_j d_l}^\sigma - \frac{i}{\hbar} \mathcal{U}_j \mathcal{R}_{d_{j\sigma} n_{j\sigma'}, d_{l\sigma}} - \frac{i}{\hbar} \sum_s \int dk \mathcal{V}_{jk} \mathcal{R}_{c_{sk} d_l}^\sigma. \end{aligned} \quad (5.9)$$

Tomando sua transformada de Fourier

$$-\frac{i}{\hbar} \varepsilon^+ \tilde{\mathcal{R}}_{d_j d_l}^\sigma(\varepsilon^+) = \int \frac{\partial}{\partial t} \mathcal{R}_{d_j d_l}^\sigma(t) e^{\frac{i}{\hbar} \varepsilon^+ t} dt, \quad (5.10)$$

chegamos em

$$(\varepsilon^+ - \varepsilon_{jd\sigma}) \tilde{\mathcal{R}}_{d_j d_l}^\sigma = \delta_{jl} + \mathcal{U}_j \tilde{\mathcal{R}}_{d_{j\sigma} n_{j\sigma'}, d_{l\sigma}} + \sum_s \int dk \mathcal{V}_{jk} \tilde{\mathcal{R}}_{c_{sk} d_l}^\sigma. \quad (5.11)$$

Substituindo a equação (4.43) na (5.11) obtemos

$$\begin{aligned} (\varepsilon^+ - \varepsilon_{jd\sigma}) \tilde{\mathcal{R}}_{d_j d_l}^\sigma &= \delta_{jl} + \mathcal{U}_j \tilde{\mathcal{R}}_{d_{j\sigma} n_{j\sigma'}, d_{l\sigma}} + \sum_s \int dk \mathcal{V}_{jk} \left(\sum_{\tilde{j}} \frac{\mathcal{V}_{\tilde{j}k}}{\varepsilon^+ - \varepsilon_k} \tilde{\mathcal{R}}_{d_{\tilde{j}} d_l}^\sigma \right) \\ &= \delta_{jl} + \mathcal{U}_j \tilde{\mathcal{R}}_{d_{j\sigma} n_{j\sigma'}, d_{l\sigma}} + \sum_{\tilde{j}} \Sigma_{j\tilde{j}} \tilde{\mathcal{R}}_{d_{\tilde{j}} d_l}^\sigma, \end{aligned} \quad (5.12)$$

onde utilizamos a equação (4.51). Na equação acima, $\tilde{\mathcal{R}}_{d_{j\sigma} n_{j\sigma'}, d_{l\sigma}}$ é uma função de Green de duas partículas composta de quatro operadores fermiônicos, obtida a partir da transformada de Fourier temporal de

$$\mathcal{R}_{d_{j\sigma} n_{j\sigma'}, d_{l\sigma}}(t) = -\frac{i}{\hbar} \theta(t) Z^{-1} \sum_n e^{-\beta \varepsilon_n} \langle n | [d_{j\sigma}(t) n_{j\sigma'}(t), d_{l\sigma}^\dagger(0)]_+ | n \rangle, \quad (5.13)$$

com $n_{j\sigma'} = d_{j\sigma'}^\dagger d_{j\sigma'}$ e o spin σ' é oposto ao σ . Então, vemos que para obtermos as funções $\tilde{\mathcal{R}}_{d_j d_l}^\sigma$ é preciso calcularmos a função de Green de quatro operadores $\tilde{\mathcal{R}}_{d_{j\sigma} n_{j\sigma'}, d_{l\sigma}}$. Assim, derivando a equação (5.13) temos

$$\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial t} \mathcal{R}_{d_{j\sigma} n_{j\sigma'}, d_{l\sigma}}(t) &= -\frac{i}{\hbar} \delta(t) Z^{-1} \sum_n e^{-\beta \varepsilon_n} \langle n | [d_{j\sigma}(t) n_{j\sigma'}(t), d_{l\sigma}^\dagger(0)]_+ | n \rangle \\
&- \frac{i}{\hbar} \theta(t) Z^{-1} \sum_n e^{-\beta \varepsilon_n} \langle n | \left[\frac{\partial}{\partial t} d_{j\sigma}(t) n_{j\sigma'}(t), d_{l\sigma}^\dagger(0) \right]_+ | n \rangle.
\end{aligned} \tag{5.14}$$

Por meio da equação de Heisenberg, podemos escrever

$$\begin{aligned}
i\hbar \frac{\partial}{\partial t} d_{j'\bar{\sigma}}(t) n_{j\sigma'}(t) &= [d_{j'\bar{\sigma}} n_{j\sigma'}, \mathcal{H}^{2D}] = \sum_{s\sigma} \int dk \varepsilon_k [d_{j'\bar{\sigma}} n_{j\sigma'}, c_{sk\sigma}^\dagger c_{sk\sigma}] + \sum_{j\sigma} \varepsilon_{jd\sigma} [d_{j'\bar{\sigma}} n_{j\sigma'}, d_{j\sigma}^\dagger d_{j\sigma}] \\
&+ \sum_j \mathcal{U}_j [d_{j'\bar{\sigma}} n_{j\sigma'}, n_{j\uparrow} n_{j\downarrow}] + \sum_{js\sigma} \int dk \mathcal{V}_{jk} [d_{j'\bar{\sigma}} n_{j\sigma'}, c_{sk\sigma}^\dagger d_{j\sigma} + \text{H.c.}].
\end{aligned} \tag{5.15}$$

Vamos calcular separadamente,

$$\sum_{s\sigma} \int dk \varepsilon_k [d_{j'\bar{\sigma}} n_{j\sigma'}, c_{sk\sigma}^\dagger c_{sk\sigma}] = \sum_{s\sigma} \int dk \varepsilon_k \left([d_{j'\bar{\sigma}} n_{j\sigma'}, c_{sk\sigma}^\dagger]_+ c_{sk\sigma} - c_{sk\sigma}^\dagger [d_{j'\bar{\sigma}} n_{j\sigma'}, c_{sk\sigma}]_+ \right) = 0, \tag{5.16}$$

$$\begin{aligned}
\sum_{j\sigma} \varepsilon_{jd\sigma} [d_{j'\bar{\sigma}} n_{j\sigma'}, d_{j\sigma}^\dagger d_{j\sigma}] &= \sum_{j\sigma} \varepsilon_{jd\sigma} \left([d_{j'\bar{\sigma}} n_{j\sigma'}, d_{j\sigma}^\dagger] d_{j\sigma} + d_{j\sigma}^\dagger [d_{j'\bar{\sigma}} n_{j\sigma'}, d_{j\sigma}] \right) \\
&= \sum_{j\sigma} \varepsilon_{jd\sigma} \left(([d_{j'\bar{\sigma}}, d_{j\sigma}^\dagger]_+ n_{j\sigma'} - d_{j'\bar{\sigma}} [n_{j\sigma'}, d_{j\sigma}^\dagger]_+) d_{j\sigma} \right. \\
&+ \left. d_{j\sigma}^\dagger ([d_{j'\bar{\sigma}}, d_{j\sigma}]_+ n_{j\sigma'} - d_{j'\bar{\sigma}} [n_{j\sigma'}, d_{j\sigma}]_+) \right) \\
&= \sum_{j\sigma} \varepsilon_{jd\sigma} \left(\delta_{jj'} \delta_{\sigma\bar{\sigma}} n_{j\sigma'} d_{j\sigma} - d_{j'\bar{\sigma}} d_{j\sigma}^\dagger \delta_{jj'} \delta_{\sigma\sigma'} d_{j\sigma} - d_{j\sigma}^\dagger d_{j'\bar{\sigma}} d_{j\sigma'} \delta_{jj'} \delta_{\sigma\sigma'} \right) \\
&= \varepsilon_{jd\sigma} d_{j\sigma} n_{j\sigma'},
\end{aligned} \tag{5.17}$$

$$\begin{aligned}
 \sum_j \mathcal{U}_j [d_{j'\bar{\sigma}} n_{j'\sigma'}, n_{j\uparrow} n_{j\downarrow}] &= \sum_j \mathcal{U}_j ([d_{j'\bar{\sigma}} n_{j'\sigma'}, n_{j\uparrow}] n_{j\downarrow} + n_{j\uparrow} [d_{j'\bar{\sigma}} n_{j'\sigma'}, n_{j\downarrow}]) \\
 &= \sum_j \mathcal{U}_j (([d_{j'\bar{\sigma}} n_{j'\sigma'}, d_{j\uparrow}^\dagger] d_{j\uparrow} + d_{j\uparrow}^\dagger [d_{j'\bar{\sigma}} n_{j'\sigma'}, d_{j\uparrow}]) d_{j\downarrow}^\dagger d_{j\downarrow} \\
 &\quad + d_{j\uparrow}^\dagger d_{j\uparrow} ([d_{j'\bar{\sigma}} n_{j'\sigma'}, d_{j\downarrow}^\dagger] d_{j\downarrow} + d_{j\downarrow}^\dagger [d_{j'\bar{\sigma}} n_{j'\sigma'}, d_{j\downarrow}])) \\
 &= \sum_j \mathcal{U}_j ((([d_{j'\bar{\sigma}}, d_{j\uparrow}^\dagger]_+ n_{j'\sigma'} - d_{j'\bar{\sigma}} [n_{j'\sigma'}, d_{j\uparrow}^\dagger]_+) d_{j\uparrow} \\
 &\quad + d_{j\uparrow}^\dagger ([d_{j'\bar{\sigma}}, d_{j\uparrow}]_+ n_{j'\sigma'} - d_{j'\bar{\sigma}} [n_{j'\sigma'}, d_{j\uparrow}]_+)) d_{j\downarrow}^\dagger d_{j\downarrow} \\
 &\quad + d_{j\uparrow}^\dagger d_{j\uparrow} (([d_{j'\bar{\sigma}}, d_{j\downarrow}^\dagger]_+ n_{j'\sigma'} - d_{j'\bar{\sigma}} [n_{j'\sigma'}, d_{j\downarrow}^\dagger]_+) d_{j\downarrow} \\
 &\quad + d_{j\downarrow}^\dagger ([d_{j'\bar{\sigma}}, d_{j\downarrow}]_+ n_{j'\sigma'} - d_{j'\bar{\sigma}} [n_{j'\sigma'}, d_{j\downarrow}]_+)) \\
 &= \sum_j \mathcal{U}_j (\delta_{jj'} \delta_{\bar{\sigma}\uparrow} n_{j'\sigma'} d_{j\uparrow}^\dagger d_{j\downarrow}^\dagger d_{j\downarrow} - d_{j'\bar{\sigma}} d_{j'\sigma'}^\dagger d_{j\uparrow}^\dagger d_{j\downarrow}^\dagger d_{j\downarrow} \delta_{jj'} \delta_{\sigma'\uparrow} \\
 &\quad - d_{j\uparrow}^\dagger d_{j'\bar{\sigma}} d_{j'\sigma'}^\dagger d_{j\downarrow}^\dagger d_{j\downarrow} \delta_{jj'} \delta_{\sigma'\uparrow} + \delta_{jj'} \delta_{\bar{\sigma}\downarrow} d_{j\uparrow}^\dagger d_{j\uparrow} n_{j'\sigma'} d_{j\downarrow} \\
 &\quad - d_{j\uparrow}^\dagger d_{j\uparrow} d_{j'\bar{\sigma}} d_{j'\sigma'}^\dagger d_{j\downarrow} \delta_{jj'} \delta_{\sigma'\downarrow} - d_{j\uparrow}^\dagger d_{j\uparrow} d_{j\downarrow}^\dagger d_{j'\bar{\sigma}} d_{j'\sigma'}^\dagger \delta_{jj'} \delta_{\sigma'\downarrow}),
 \end{aligned} \tag{5.18}$$

considerando $\bar{\sigma} = \uparrow$ e $\sigma' = \downarrow$, temos

$$\begin{aligned}
 \sum_j \mathcal{U}_j [d_{j'\bar{\sigma}} n_{j'\sigma'}, n_{j\uparrow} n_{j\downarrow}] &= \mathcal{U}_j d_{j\downarrow}^\dagger d_{j\downarrow} d_{j\uparrow} d_{j\downarrow}^\dagger d_{j\downarrow} - \mathcal{U}_j d_{j\uparrow}^\dagger d_{j\uparrow} d_{j\uparrow} d_{j\downarrow}^\dagger d_{j\downarrow} \\
 &\quad - \mathcal{U}_j d_{j\uparrow}^\dagger d_{j\uparrow} d_{j\downarrow}^\dagger d_{j\uparrow} d_{j\downarrow} \\
 &= \mathcal{U}_j d_{j\downarrow}^\dagger d_{j\downarrow} d_{j\uparrow} d_{j\downarrow}^\dagger d_{j\downarrow} \\
 &= \mathcal{U}_j d_{j\uparrow} (n_{j\downarrow})^2 \\
 &= \mathcal{U}_j d_{j\bar{\sigma}} n_{j\sigma'},
 \end{aligned} \tag{5.19}$$

pois $\hat{n}_i^2 = \hat{n}_i$,

$$\begin{aligned}
 \sum_{js\sigma} \int dk \mathcal{V}_{jk} [d_{j'\bar{\sigma}} n_{j'\sigma'}, c_{sk\sigma}^\dagger d_{j\sigma} + \text{H.c.}] &= \sum_{js\sigma} \int dk \mathcal{V}_{jk} ([d_{j'\bar{\sigma}} n_{j'\sigma'}, c_{sk\sigma}^\dagger d_{j\sigma}] + [d_{j'\bar{\sigma}} n_{j'\sigma'}, d_{j\sigma}^\dagger c_{sk\sigma}]) \\
 &= \sum_s \int dk \mathcal{V}_{jk} (-c_{sk\sigma'}^\dagger d_{j\sigma'} d_{j\bar{\sigma}} + d_{j\sigma'}^\dagger c_{sk\sigma'} d_{j\bar{\sigma}} \\
 &\quad + c_{sk\bar{\sigma}} d_{j\sigma'}^\dagger d_{j\sigma'}),
 \end{aligned} \tag{5.20}$$

onde utilizamos os seguintes anti-comutadores e comutadores:

$$\begin{aligned}
[n_{j'\sigma'}, d_{j\sigma}^\dagger]_+ &= [d_{j'\sigma'}^\dagger d_{j'\sigma'}, d_{j\sigma}^\dagger]_+ = d_{j'\sigma'}^\dagger d_{j'\sigma'} d_{j\sigma}^\dagger + d_{j\sigma}^\dagger d_{j'\sigma'}^\dagger d_{j'\sigma'} \\
&= d_{j'\sigma'}^\dagger (\delta_{jj'} \delta_{\sigma\sigma'} - d_{j\sigma}^\dagger d_{j'\sigma'}) + d_{j\sigma}^\dagger d_{j'\sigma'}^\dagger d_{j'\sigma'} = d_{j'\sigma'}^\dagger \delta_{jj'} \delta_{\sigma\sigma'}, \quad (5.21)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
[n_{j'\sigma'}, d_{j\sigma}]_+ &= [d_{j'\sigma'}^\dagger d_{j'\sigma'}, d_{j\sigma}]_+ = d_{j'\sigma'}^\dagger d_{j'\sigma'} d_{j\sigma} + d_{j\sigma} d_{j'\sigma'}^\dagger d_{j'\sigma'} \\
&= d_{j'\sigma'}^\dagger d_{j'\sigma'} d_{j\sigma} + (\delta_{jj'} \delta_{\sigma\sigma'} - d_{j'\sigma'}^\dagger d_{j\sigma}) d_{j'\sigma'} = d_{j'\sigma'} \delta_{jj'} \delta_{\sigma\sigma'}, \quad (5.22)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
[d_{j'\bar{\sigma}} n_{j'\sigma'}, c_{sk\sigma}^\dagger d_{j\sigma}] &= [d_{j'\bar{\sigma}} n_{j'\sigma'}, c_{sk\sigma}^\dagger] d_{j\sigma} + c_{sk\sigma}^\dagger [d_{j'\bar{\sigma}} n_{j'\sigma'}, d_{j\sigma}] \\
&= ([d_{j'\bar{\sigma}}, c_{sk\sigma}^\dagger]_+ n_{j'\sigma'} - d_{j'\bar{\sigma}} [n_{j'\sigma'}, c_{sk\sigma}^\dagger]_+) d_{j\sigma} \\
&+ c_{sk\sigma}^\dagger ([d_{j'\bar{\sigma}}, d_{j\sigma}]_+ n_{j'\sigma'} - d_{j'\bar{\sigma}} [n_{j'\sigma'}, d_{j\sigma}]_+) \\
&= -d_{j'\bar{\sigma}} d_{j'\sigma'}^\dagger d_{j'\sigma'} c_{sk\sigma}^\dagger d_{j\sigma} - d_{j'\bar{\sigma}} c_{sk\sigma}^\dagger d_{j\sigma} \\
&- d_{j'\bar{\sigma}} d_{j'\sigma'} c_{sk\sigma}^\dagger d_{j'\sigma'}^\dagger d_{j\sigma} - c_{sk\sigma}^\dagger d_{j'\bar{\sigma}} d_{j'\sigma'}^\dagger d_{j'\sigma'} d_{j\sigma} \\
&- c_{sk\sigma}^\dagger d_{j'\bar{\sigma}} \delta_{jj'} \delta_{\sigma\sigma'} d_{j'\sigma'} + c_{sk\sigma}^\dagger d_{j'\bar{\sigma}} d_{j'\sigma'}^\dagger d_{j\sigma} d_{j'\sigma'} \\
&= c_{sk\sigma}^\dagger d_{j'\bar{\sigma}} d_{j\sigma} - c_{sk\sigma}^\dagger d_{j'\bar{\sigma}} d_{j'\sigma'}^\dagger d_{j'\sigma'} d_{j\sigma} \\
&+ c_{sk\sigma}^\dagger d_{j'\bar{\sigma}} \delta_{jj'} \delta_{\sigma\sigma'} d_{j'\sigma'} - c_{sk\sigma}^\dagger d_{j'\bar{\sigma}} (1 - d_{j'\sigma'}^\dagger d_{j'\sigma'}) d_{j\sigma} \\
&= -c_{sk\sigma}^\dagger d_{j'\sigma'} d_{j'\bar{\sigma}} \delta_{jj'} \delta_{\sigma\sigma'} \quad (5.23)
\end{aligned}$$

e

$$\begin{aligned}
 [d_{j'\bar{\sigma}}n_{j'\sigma'}, d_{j\sigma}^\dagger c_{sk\sigma}] &= [d_{j'\bar{\sigma}}n_{j'\sigma'}, d_{j\sigma}^\dagger]c_{sk\sigma} + d_{j\sigma}^\dagger [d_{j'\bar{\sigma}}n_{j'\sigma'}, c_{sk\sigma}] \\
 &= ([d_{j'\bar{\sigma}}, d_{j\sigma}^\dagger]_+ n_{j'\sigma'} - d_{j'\bar{\sigma}} [n_{j'\sigma'}, d_{j\sigma}^\dagger]_+) c_{sk\sigma} \\
 &\quad + d_{j\sigma}^\dagger ([d_{j'\bar{\sigma}}, c_{sk\sigma}]_+ n_{j'\sigma'} - d_{j'\bar{\sigma}} [n_{j'\sigma'}, c_{sk\sigma}]_+) \\
 &= \delta_{jj'} \delta_{\sigma\bar{\sigma}} c_{sk\sigma} d_{j'\sigma'}^\dagger d_{j'\sigma'} - c_{sk\sigma} d_{j'\bar{\sigma}} d_{j'\sigma'}^\dagger d_{j'\sigma'} d_{j\sigma}^\dagger \\
 &\quad - c_{sk\sigma} d_{j'\bar{\sigma}} d_{j\sigma}^\dagger d_{j'\sigma'}^\dagger d_{j'\sigma'} - c_{sk\sigma} d_{j\sigma}^\dagger d_{j'\bar{\sigma}} d_{j'\sigma'}^\dagger d_{j'\sigma'} \\
 &\quad - c_{sk\sigma} d_{j\sigma}^\dagger d_{j'\bar{\sigma}} d_{j'\sigma'}^\dagger d_{j'\sigma'} \\
 &= c_{sk\sigma} (\delta_{jj'} \delta_{\sigma\bar{\sigma}} d_{j'\sigma'}^\dagger d_{j'\sigma'} - d_{j'\bar{\sigma}} d_{j'\sigma'}^\dagger d_{j'\sigma'} d_{j\sigma}^\dagger \\
 &\quad - (\delta_{jj'} \delta_{\sigma\bar{\sigma}} - d_{j\sigma}^\dagger d_{j'\bar{\sigma}}) d_{j'\sigma'}^\dagger d_{j'\sigma'} - d_{j\sigma}^\dagger d_{j'\bar{\sigma}} d_{j'\sigma'}^\dagger d_{j'\sigma'} \\
 &\quad - d_{j\sigma}^\dagger d_{j'\bar{\sigma}} d_{j'\sigma'}^\dagger d_{j'\sigma'}) \\
 &= c_{sk\sigma} (-d_{j'\bar{\sigma}} d_{j'\sigma'}^\dagger (\delta_{jj'} \delta_{\sigma\sigma'} - d_{j\sigma}^\dagger d_{j'\sigma'})) \\
 &\quad - (\delta_{jj'} \delta_{\sigma\bar{\sigma}} - d_{j'\bar{\sigma}} d_{j\sigma}^\dagger) d_{j'\sigma'}^\dagger d_{j'\sigma'} \\
 &= d_{j'\sigma'}^\dagger c_{sk\sigma} d_{j'\bar{\sigma}} \delta_{jj'} \delta_{\sigma\sigma'} + c_{sk\sigma} d_{j'\sigma'}^\dagger d_{j'\sigma'} \delta_{jj'} \delta_{\sigma\bar{\sigma}}.
 \end{aligned} \tag{5.24}$$

Logo podemos escrever

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial}{\partial t} d_{j\sigma}(t) n_{j\sigma'}(t) &= -\frac{i}{\hbar} (\varepsilon_{jd\sigma} d_{j\sigma} n_{j\sigma'} + \mathcal{U}_j d_{j\sigma} n_{j\sigma'} - \sum_s \int dk \mathcal{V}_{jk} c_{sk\sigma}^\dagger d_{j\sigma'} d_{j\sigma} \\
 &\quad + \sum_s \int dk \mathcal{V}_{jk} d_{j\sigma'}^\dagger c_{sk\sigma'} d_{j\sigma} + \sum_s \int dk \mathcal{V}_{jk} c_{sk\sigma} d_{j\sigma'}^\dagger d_{j\sigma'}). \tag{5.25}
 \end{aligned}$$

Substituindo a equação acima na equação (5.14), obtemos

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial}{\partial t} \mathcal{R}_{d_{j\sigma} n_{j\sigma'}, d_{l\sigma}}(t) &= -\frac{i}{\hbar} \delta(t) Z^{-1} \sum_n e^{-\beta \varepsilon_n} \langle n | [d_{j\sigma}(t) n_{j\sigma'}(t), d_{l\sigma}^\dagger(0)]_+ | n \rangle \\
 &\quad - \frac{i}{\hbar} \varepsilon_{jd\sigma} \mathcal{R}_{d_{j\sigma} n_{j\sigma'}, d_{l\sigma}} - \frac{i}{\hbar} \mathcal{U}_j \mathcal{R}_{d_{j\sigma} n_{j\sigma'}, d_{l\sigma}} \\
 &\quad - \frac{i}{\hbar} \sum_s \int dk \mathcal{V}_{jk} \mathcal{R}_{c_{sk\sigma} d_{j\sigma'}^\dagger d_{j\sigma'}, d_{l\sigma}} + \frac{i}{\hbar} \sum_s \int dk \mathcal{V}_{jk} \mathcal{R}_{c_{sk\sigma'}^\dagger d_{j\sigma'} d_{j\sigma}, d_{l\sigma}} \\
 &\quad - \frac{i}{\hbar} \sum_s \int dk \mathcal{V}_{jk} \mathcal{R}_{d_{j\sigma'}^\dagger c_{sk\sigma'} d_{j\sigma}, d_{l\sigma}}, \tag{5.26}
 \end{aligned}$$

cuja transformada de Fourier

$$-\frac{i}{\hbar}\varepsilon^+\tilde{\mathcal{R}}_{d_{j\sigma}n_{j\sigma'},d_{l\sigma}}(\varepsilon^+) = \int \frac{\partial}{\partial t}\mathcal{R}_{d_{j\sigma}n_{j\sigma'},d_{l\sigma}}(t)e^{\frac{i}{\hbar}\varepsilon^+t}dt \quad (5.27)$$

permite encontrar

$$\begin{aligned} (\varepsilon^+ - \varepsilon_{jd\sigma} - \mathcal{U}_j)\tilde{\mathcal{R}}_{d_{j\sigma}n_{j\sigma'},d_{l\sigma}} &= \delta_{jl}\langle n_{d_j\sigma'} \rangle + \sum_s \int dk \mathcal{V}_{jk}(\tilde{\mathcal{R}}_{c_{sk\sigma}d_{j\sigma'}^\dagger,d_{j\sigma'},d_{l\sigma}} \\ &- \tilde{\mathcal{R}}_{c_{sk\sigma'}^\dagger,d_{j\sigma'},d_{j\sigma},d_{l\sigma}} + \tilde{\mathcal{R}}_{d_{j\sigma'}^\dagger,c_{sk\sigma'},d_{j\sigma},d_{l\sigma}}), \end{aligned} \quad (5.28)$$

expressada em termos das novas funções de Green de mesma ordem de $\tilde{\mathcal{R}}_{d_{j\sigma}n_{j\sigma'},d_{l\sigma}}$, e da ocupação média do nível da impureza j

$$\langle n_{d_j\sigma'} \rangle = -\frac{1}{\pi} \int_{-D}^{\varepsilon_F=0} \text{Im}(\tilde{\mathcal{R}}_{d_j d_j}^{\sigma'}) d\varepsilon, \quad (5.29)$$

determinada de acordo com as referências [5] e [6]. Empregando a aproximação Hubbard I, desacoplamos as seguintes funções de Green da equação (5.28): $\tilde{\mathcal{R}}_{c_{sk\sigma'}^\dagger,d_{j\sigma'},d_{j\sigma},d_{l\sigma}} \simeq \langle c_{sk\sigma'}^\dagger d_{j\sigma'} \rangle \tilde{\mathcal{R}}_{d_j d_l}^\sigma$ e $\tilde{\mathcal{R}}_{d_{j\sigma'}^\dagger,c_{sk\sigma'},d_{j\sigma},d_{l\sigma}} \simeq \langle c_{sk\sigma'}^\dagger d_{j\sigma'} \rangle \tilde{\mathcal{R}}_{d_j d_l}^\sigma$. Como resultado, encontramos

$$(\varepsilon^+ - \varepsilon_{jd\sigma} - \mathcal{U}_j)\tilde{\mathcal{R}}_{d_{j\sigma}n_{j\sigma'},d_{l\sigma}} = \delta_{jl}\langle n_{d_j\sigma'} \rangle + \sum_s \int dk \mathcal{V}_{jk} \tilde{\mathcal{R}}_{c_{sk\sigma}d_{j\sigma'}^\dagger,d_{j\sigma'},d_{l\sigma}}. \quad (5.30)$$

Vemos que para fechar o cálculo, é preciso determinar $\tilde{\mathcal{R}}_{c_{sk\sigma}d_{j\sigma'}^\dagger,d_{j\sigma'},d_{l\sigma}}$. Por isso, vamos novamente aplicar a método da equação de movimento em

$$\mathcal{R}_{c_{sk\sigma}d_{j\sigma'}^\dagger,d_{j\sigma'},d_{l\sigma}}(t) = -\frac{i}{\hbar}\theta(t)Z^{-1}\sum_n e^{-\beta\varepsilon_n}\langle n|[c_{sk\sigma}(t)d_{j\sigma'}^\dagger(t)d_{j\sigma'}(t),d_{l\sigma}^\dagger(0)]_+|n\rangle. \quad (5.31)$$

Derivando obtemos

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial}{\partial t} \mathcal{R}_{c_{sk\sigma} d_{j'\sigma'}^\dagger, d_{j'\sigma'}, d_{l\sigma}}(t) &= -\frac{i}{\hbar} \delta(t) Z^{-1} \sum_n e^{-\beta \varepsilon_n} \langle n | [c_{sk\sigma}(t) d_{j'\sigma'}^\dagger(t) d_{j'\sigma'}(t), d_{l\sigma}^\dagger(0)]_+ | n \rangle \\
 &- \frac{i}{\hbar} \theta(t) Z^{-1} \sum_n e^{-\beta \varepsilon_n} \langle n | \left[\frac{\partial}{\partial t} c_{sk\sigma}(t) d_{j'\sigma'}^\dagger(t) d_{j'\sigma'}(t), d_{l\sigma}^\dagger(0) \right]_+ | n \rangle.
 \end{aligned} \tag{5.32}$$

Pela equação de Heisenberg podemos escrever

$$\begin{aligned}
 i\hbar \frac{\partial}{\partial t} c_{\bar{s}\bar{k}\bar{\sigma}}(t) d_{j'\sigma'}^\dagger(t) d_{j'\sigma'}(t) &= [c_{\bar{s}\bar{k}\bar{\sigma}} d_{j'\sigma'}^\dagger d_{j'\sigma'}, \mathcal{H}^{2D}] = \sum_{s\sigma} \int dk \varepsilon_k [c_{\bar{s}\bar{k}\bar{\sigma}} d_{j'\sigma'}^\dagger d_{j'\sigma'}, c_{sk\sigma}^\dagger c_{sk\sigma}] \\
 &+ \sum_{j\sigma} \varepsilon_{jd\sigma} [c_{\bar{s}\bar{k}\bar{\sigma}} d_{j'\sigma'}^\dagger d_{j'\sigma'}, d_{j\sigma}^\dagger d_{j\sigma}] + \sum_j \mathcal{U}_j [c_{\bar{s}\bar{k}\bar{\sigma}} d_{j'\sigma'}^\dagger d_{j'\sigma'}, n_{j\uparrow} n_{j\downarrow}] \\
 &+ \sum_{js\sigma} \int dk \mathcal{V}_{jk} [c_{\bar{s}\bar{k}\bar{\sigma}} d_{j'\sigma'}^\dagger d_{j'\sigma'}, c_{sk\sigma}^\dagger d_{j\sigma} + \text{H.c.}].
 \end{aligned} \tag{5.33}$$

Calculando separadamente temos

$$\begin{aligned}
 \sum_{s\sigma} \int dk \varepsilon_k [c_{\bar{s}\bar{k}\bar{\sigma}} d_{j'\sigma'}^\dagger d_{j'\sigma'}, c_{sk\sigma}^\dagger c_{sk\sigma}] &= \sum_{s\sigma} \int dk \varepsilon_k (c_{\bar{s}\bar{k}\bar{\sigma}} d_{j'\sigma'}^\dagger d_{j'\sigma'} c_{sk\sigma}^\dagger c_{sk\sigma} - c_{sk\sigma}^\dagger c_{sk\sigma} c_{\bar{s}\bar{k}\bar{\sigma}} d_{j'\sigma'}^\dagger d_{j'\sigma'}) \\
 &= \sum_{s\sigma} \int dk \varepsilon_k (d_{j'\sigma'}^\dagger d_{j'\sigma'} (\delta_{s\bar{s}} \delta_{k\bar{k}} \delta_{\sigma\bar{\sigma}} - c_{sk\sigma}^\dagger c_{\bar{s}\bar{k}\bar{\sigma}}) c_{sk\sigma} \\
 &- c_{sk\sigma}^\dagger c_{sk\sigma} c_{\bar{s}\bar{k}\bar{\sigma}} d_{j'\sigma'}^\dagger d_{j'\sigma'}) \\
 &= \sum_{s\sigma} \int dk \varepsilon_k d_{j'\sigma'}^\dagger d_{j'\sigma'} c_{sk\sigma} \delta_{s\bar{s}} \delta_{k\bar{k}} \delta_{\sigma\bar{\sigma}} \\
 &= \varepsilon_k c_{sk\sigma} d_{j'\sigma'}^\dagger d_{j'\sigma'},
 \end{aligned} \tag{5.34}$$

$$\begin{aligned}
\sum_{j\sigma} \varepsilon_{jd\sigma} [c_{\bar{s}\bar{k}\bar{\sigma}} d_{j'\sigma'}^\dagger, d_{j'\sigma'}, d_{j\sigma}^\dagger d_{j\sigma}] &= \sum_{j\sigma} \varepsilon_{jd\sigma} (c_{\bar{s}\bar{k}\bar{\sigma}} d_{j'\sigma'}^\dagger d_{j'\sigma'} d_{j\sigma}^\dagger d_{j\sigma} - d_{j\sigma}^\dagger d_{j\sigma} c_{\bar{s}\bar{k}\bar{\sigma}} d_{j'\sigma'}^\dagger d_{j'\sigma'}) \\
&= \sum_{j\sigma} \varepsilon_{jd\sigma} c_{\bar{s}\bar{k}\bar{\sigma}} (d_{j'\sigma'}^\dagger d_{j'\sigma'} d_{j\sigma}^\dagger d_{j\sigma} - d_{j\sigma}^\dagger d_{j\sigma} d_{j'\sigma'}^\dagger d_{j'\sigma'}) \\
&= \sum_{j\sigma} \varepsilon_{jd\sigma} c_{\bar{s}\bar{k}\bar{\sigma}} (d_{j'\sigma'}^\dagger (\delta_{jj'} \delta_{\sigma\sigma'} - d_{j\sigma}^\dagger d_{j'\sigma'}) d_{j\sigma} - d_{j\sigma}^\dagger d_{j\sigma} d_{j'\sigma'}^\dagger d_{j'\sigma'}) \\
&= \sum_{j\sigma} \varepsilon_{jd\sigma} c_{\bar{s}\bar{k}\bar{\sigma}} (d_{j'\sigma'}^\dagger d_{j\sigma} \delta_{jj'} \delta_{\sigma\sigma'} - d_{j\sigma}^\dagger d_{j'\sigma'}^\dagger d_{j\sigma} d_{j'\sigma'} - d_{j\sigma}^\dagger d_{j\sigma} d_{j'\sigma'}^\dagger d_{j'\sigma'}) \\
&= \sum_{j\sigma} \varepsilon_{jd\sigma} c_{\bar{s}\bar{k}\bar{\sigma}} (d_{j'\sigma'}^\dagger d_{j\sigma} \delta_{jj'} \delta_{\sigma\sigma'} - d_{j\sigma}^\dagger (\delta_{jj'} \delta_{\sigma\sigma'} - d_{j\sigma}^\dagger d_{j'\sigma'})) d_{j'\sigma'} \\
&\quad - d_{j\sigma}^\dagger d_{j\sigma} d_{j'\sigma'}^\dagger d_{j'\sigma'} \\
&= \sum_{j\sigma} \varepsilon_{jd\sigma} c_{\bar{s}\bar{k}\bar{\sigma}} d_{j'\sigma'}^\dagger d_{j\sigma} \delta_{jj'} \delta_{\sigma\sigma'} - \sum_{j\sigma} \varepsilon_{jd\sigma} c_{\bar{s}\bar{k}\bar{\sigma}} d_{j'\sigma'}^\dagger d_{j\sigma} \delta_{jj'} \delta_{\sigma\sigma'} \\
&\quad + \sum_{j\sigma} \varepsilon_{jd\sigma} c_{\bar{s}\bar{k}\bar{\sigma}} (d_{j\sigma}^\dagger d_{j\sigma} d_{j'\sigma'}^\dagger d_{j'\sigma'} - d_{j\sigma}^\dagger d_{j\sigma} d_{j'\sigma'}^\dagger d_{j'\sigma'}) \\
&= 0,
\end{aligned} \tag{5.35}$$

$$\begin{aligned}
\sum_j \mathcal{U}_j [c_{\bar{s}\bar{k}\bar{\sigma}} d_{j'\sigma'}^\dagger, d_{j'\sigma'}, n_{j\uparrow} n_{j\downarrow}] &= \sum_j \mathcal{U}_j (c_{\bar{s}\bar{k}\bar{\sigma}} d_{j'\sigma'}^\dagger d_{j'\sigma'} d_{j\uparrow}^\dagger d_{j\downarrow}^\dagger d_{j\downarrow} - d_{j\uparrow}^\dagger d_{j\uparrow} d_{j\downarrow}^\dagger d_{j\downarrow} c_{\bar{s}\bar{k}\bar{\sigma}} d_{j'\sigma'}^\dagger d_{j'\sigma'}) \\
&= \sum_j \mathcal{U}_j c_{\bar{s}\bar{k}\bar{\sigma}} (d_{j'\sigma'}^\dagger d_{j'\sigma'} d_{j\uparrow}^\dagger d_{j\downarrow}^\dagger d_{j\downarrow} - d_{j\uparrow}^\dagger d_{j\uparrow} d_{j\downarrow}^\dagger d_{j\downarrow} d_{j'\sigma'}^\dagger d_{j'\sigma'}) \\
&= 0,
\end{aligned} \tag{5.36}$$

onde utilizamos

$$\begin{aligned}
&\sum_j \mathcal{U}_j c_{\bar{s}\bar{k}\bar{\sigma}} \left(d_{j'\downarrow}^\dagger d_{j'\downarrow} d_{j\uparrow}^\dagger d_{j\uparrow} d_{j\downarrow}^\dagger d_{j\downarrow} - d_{j\uparrow}^\dagger d_{j\uparrow} d_{j\downarrow}^\dagger d_{j\downarrow} d_{j'\downarrow}^\dagger d_{j'\downarrow} \right) \\
&= \mathcal{U}_{j'} c_{\bar{s}\bar{k}\bar{\sigma}} \left(d_{j'\downarrow}^\dagger d_{j'\downarrow} d_{j\uparrow}^\dagger d_{j\uparrow} d_{j\downarrow}^\dagger d_{j\downarrow} - d_{j\uparrow}^\dagger d_{j\uparrow} d_{j\downarrow}^\dagger d_{j\downarrow} d_{j'\downarrow}^\dagger d_{j'\downarrow} \right) \\
&\quad + \sum_{j \neq j'} \mathcal{U}_j c_{\bar{s}\bar{k}\bar{\sigma}} \left(d_{j'\downarrow}^\dagger d_{j'\downarrow} d_{j\uparrow}^\dagger d_{j\uparrow} d_{j\downarrow}^\dagger d_{j\downarrow} - d_{j\uparrow}^\dagger d_{j\uparrow} d_{j\downarrow}^\dagger d_{j\downarrow} d_{j'\downarrow}^\dagger d_{j'\downarrow} \right) \\
&= \mathcal{U}_{j'} c_{\bar{s}\bar{k}\bar{\sigma}} \left(d_{j\uparrow}^\dagger d_{j\uparrow} d_{j'\downarrow}^\dagger d_{j'\downarrow} d_{j\downarrow}^\dagger d_{j\downarrow} - d_{j\uparrow}^\dagger d_{j\uparrow} d_{j'\downarrow}^\dagger d_{j'\downarrow} d_{j\downarrow}^\dagger d_{j\downarrow} \right) \\
&\quad + \sum_{j \neq j'} \mathcal{U}_j c_{\bar{s}\bar{k}\bar{\sigma}} \left(d_{j\uparrow}^\dagger d_{j\uparrow} d_{j\downarrow}^\dagger d_{j\downarrow} d_{j'\downarrow}^\dagger d_{j'\downarrow} - d_{j\uparrow}^\dagger d_{j\uparrow} d_{j\downarrow}^\dagger d_{j\downarrow} d_{j'\downarrow}^\dagger d_{j'\downarrow} \right) = 0
\end{aligned} \tag{5.37}$$

e

$$\begin{aligned}
 & \sum_j \mathcal{U}_j c_{\bar{s}\bar{k}\downarrow} \left(d_{j'\uparrow}^\dagger d_{j'\uparrow} d_{j\uparrow}^\dagger d_{j\uparrow} d_{j\downarrow}^\dagger d_{j\downarrow} - d_{j\uparrow}^\dagger d_{j\uparrow} d_{j\downarrow}^\dagger d_{j\downarrow} d_{j'\uparrow}^\dagger d_{j'\uparrow} \right) \\
 &= \mathcal{U}_{j'} c_{\bar{s}\bar{k}\downarrow} \left(d_{j'\uparrow}^\dagger d_{j'\uparrow} d_{j'\uparrow}^\dagger d_{j'\uparrow} d_{j'\downarrow}^\dagger d_{j'\downarrow} - d_{j'\uparrow}^\dagger d_{j'\uparrow} d_{j'\downarrow}^\dagger d_{j'\downarrow} d_{j'\uparrow}^\dagger d_{j'\uparrow} \right) \\
 &+ \sum_{j \neq j'} \mathcal{U}_j c_{\bar{s}\bar{k}\downarrow} \left(d_{j'\uparrow}^\dagger d_{j'\uparrow} d_{j\uparrow}^\dagger d_{j\uparrow} d_{j\downarrow}^\dagger d_{j\downarrow} - d_{j\uparrow}^\dagger d_{j\uparrow} d_{j\downarrow}^\dagger d_{j\downarrow} d_{j'\uparrow}^\dagger d_{j'\uparrow} \right) \\
 &= \mathcal{U}_{j'} c_{\bar{s}\bar{k}\downarrow} \left(d_{j'\uparrow}^\dagger d_{j'\uparrow} d_{j'\uparrow}^\dagger d_{j'\uparrow} d_{j'\downarrow}^\dagger d_{j'\downarrow} - d_{j'\uparrow}^\dagger d_{j'\uparrow} d_{j'\uparrow}^\dagger d_{j'\uparrow} d_{j'\downarrow}^\dagger d_{j'\downarrow} \right) \\
 &+ \sum_{j \neq j'} \mathcal{U}_j c_{\bar{s}\bar{k}\downarrow} \left(d_{j'\uparrow}^\dagger d_{j'\uparrow} d_{j\uparrow}^\dagger d_{j\uparrow} d_{j\downarrow}^\dagger d_{j\downarrow} - d_{j\uparrow}^\dagger d_{j\uparrow} d_{j\downarrow}^\dagger d_{j\downarrow} d_{j'\uparrow}^\dagger d_{j'\uparrow} \right) = 0.
 \end{aligned} \tag{5.38}$$

Consideramos também

$$\begin{aligned}
 \sum_{js\sigma} \int dk \mathcal{V}_{jk} [c_{\bar{s}\bar{k}\bar{\sigma}}^\dagger d_{j'\sigma'}^\dagger d_{j'\sigma'}, c_{sk\sigma}^\dagger d_{j\sigma} + \text{H.c.}] &= \sum_{js\sigma} \int dk \mathcal{V}_{jk} ([c_{\bar{s}\bar{k}\bar{\sigma}}^\dagger d_{j'\sigma'}^\dagger d_{j'\sigma'}, c_{sk\sigma}^\dagger d_{j\sigma}] \\
 &+ [c_{\bar{s}\bar{k}\bar{\sigma}}^\dagger d_{j'\sigma'}^\dagger d_{j'\sigma'}, d_{j\sigma}^\dagger c_{sk\sigma}]) \\
 &= \sum_{js\sigma} \int dk \mathcal{V}_{jk} (\delta_{s\bar{s}} \delta_{k\bar{k}} \delta_{\sigma\bar{\sigma}} d_{j\sigma} d_{j'\sigma'}^\dagger d_{j'\sigma'} \\
 &- c_{sk\sigma}^\dagger d_{j'\sigma'} c_{\bar{s}\bar{k}\bar{\sigma}} \delta_{jj'} \delta_{\sigma\sigma'} + c_{\bar{s}\bar{k}\bar{\sigma}}^\dagger d_{j'\sigma'} c_{sk\sigma} \delta_{jj'} \delta_{\sigma\sigma'}) \\
 &= \sum_j \mathcal{V}_{jk} d_{j\sigma} d_{j'\sigma'}^\dagger d_{j'\sigma'} - \sum_s \int dk \mathcal{V}_{jk} c_{sk\sigma}^\dagger d_{j\sigma} c_{\bar{s}\bar{k}\bar{\sigma}} \\
 &+ \sum_s \int dk \mathcal{V}_{jk} c_{\bar{s}\bar{k}\bar{\sigma}}^\dagger d_{j\sigma} c_{sk\sigma} \\
 &= \mathcal{V}_{j'k} d_{j'\sigma} d_{j'\sigma'}^\dagger d_{j'\sigma'} + \sum_{j \neq j'} \mathcal{V}_{jk} d_{j\sigma} d_{j'\sigma'}^\dagger d_{j'\sigma'} \\
 &- \sum_s \int dk \mathcal{V}_{jk} c_{sk\sigma}^\dagger d_{j\sigma} c_{\bar{s}\bar{k}\bar{\sigma}} \\
 &+ \sum_s \int dk \mathcal{V}_{jk} c_{\bar{s}\bar{k}\bar{\sigma}}^\dagger d_{j\sigma} c_{sk\sigma},
 \end{aligned} \tag{5.39}$$

onde utilizamos os seguintes comutadores

$$\begin{aligned}
[c_{\bar{s}\bar{k}\bar{\sigma}} d_{j'\sigma'}^\dagger d_{j'\sigma'}, c_{s k \sigma}^\dagger d_{j\sigma}] &= c_{\bar{s}\bar{k}\bar{\sigma}} d_{j'\sigma'}^\dagger d_{j'\sigma'} c_{s k \sigma}^\dagger d_{j\sigma} - c_{s k \sigma}^\dagger d_{j\sigma} c_{\bar{s}\bar{k}\bar{\sigma}} d_{j'\sigma'}^\dagger d_{j'\sigma'} \\
&= c_{\bar{s}\bar{k}\bar{\sigma}} c_{s k \sigma}^\dagger d_{j'\sigma'}^\dagger d_{j'\sigma'} d_{j\sigma} + (\delta_{s\bar{s}} \delta_{k\bar{k}} \delta_{\sigma\bar{\sigma}} - c_{\bar{s}\bar{k}\bar{\sigma}} c_{s k \sigma}^\dagger) d_{j\sigma} d_{j'\sigma'}^\dagger d_{j'\sigma'} \\
&= \delta_{s\bar{s}} \delta_{k\bar{k}} \delta_{\sigma\bar{\sigma}} d_{j\sigma} d_{j'\sigma'}^\dagger d_{j'\sigma'} \\
&+ c_{\bar{s}\bar{k}\bar{\sigma}} c_{s k \sigma}^\dagger (d_{j'\sigma'}^\dagger d_{j'\sigma'} d_{j\sigma} - (\delta_{jj'} \delta_{\sigma\sigma'} - d_{j'\sigma'}^\dagger d_{j\sigma}) d_{j'\sigma'}) \\
&= \delta_{s\bar{s}} \delta_{k\bar{k}} \delta_{\sigma\bar{\sigma}} d_{j\sigma} d_{j'\sigma'}^\dagger d_{j'\sigma'} - c_{\bar{s}\bar{k}\bar{\sigma}} c_{s k \sigma}^\dagger d_{j'\sigma'} \delta_{jj'} \delta_{\sigma\sigma'} \quad (5.40)
\end{aligned}$$

e

$$\begin{aligned}
[c_{\bar{s}\bar{k}\bar{\sigma}} d_{j'\sigma'}^\dagger d_{j'\sigma'}, d_{j\sigma}^\dagger c_{s k \sigma}] &= c_{\bar{s}\bar{k}\bar{\sigma}} d_{j'\sigma'}^\dagger d_{j'\sigma'} d_{j\sigma}^\dagger c_{s k \sigma} - d_{j\sigma}^\dagger c_{s k \sigma} c_{\bar{s}\bar{k}\bar{\sigma}} d_{j'\sigma'}^\dagger d_{j'\sigma'} \\
&= c_{s k \sigma} c_{\bar{s}\bar{k}\bar{\sigma}} (d_{j'\sigma'}^\dagger d_{j'\sigma'} d_{j\sigma}^\dagger - d_{j\sigma}^\dagger d_{j'\sigma'}^\dagger d_{j'\sigma'}) \\
&= c_{s k \sigma} c_{\bar{s}\bar{k}\bar{\sigma}} (d_{j'\sigma'}^\dagger d_{j'\sigma'} d_{j\sigma}^\dagger + d_{j'\sigma'}^\dagger (\delta_{jj'} \delta_{\sigma\sigma'} - d_{j'\sigma'} d_{j\sigma}^\dagger)) \\
&= c_{s k \sigma} c_{\bar{s}\bar{k}\bar{\sigma}} d_{j'\sigma'}^\dagger \delta_{jj'} \delta_{\sigma\sigma'} \\
&= c_{\bar{s}\bar{k}\bar{\sigma}} d_{j'\sigma'}^\dagger c_{s k \sigma} \delta_{jj'} \delta_{\sigma\sigma'}. \quad (5.41)
\end{aligned}$$

Assim, podemos escrever a equação (5.33) da seguinte maneira

$$\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial t} c_{s k \sigma}(t) d_{j'\sigma'}^\dagger(t) d_{j\sigma}(t) &= -\frac{i}{\hbar} (\varepsilon_k c_{s k \sigma} d_{j'\sigma'}^\dagger d_{j'\sigma'} + \mathcal{V}_{j'k} d_{j'\sigma} d_{j'\sigma'}^\dagger d_{j'\sigma'} - \sum_{j \neq j'} \mathcal{V}_{jk} d_{j\sigma} d_{j'\sigma'}^\dagger d_{j'\sigma'}) \\
&- \sum_s \int dk \mathcal{V}_{jk} c_{\bar{s}\bar{k}\bar{\sigma}}^\dagger d_{j\sigma} c_{s k \sigma} + \sum_s \int dk \mathcal{V}_{jk} c_{s k \sigma} d_{j\sigma}^\dagger c_{\bar{s}\bar{k}\bar{\sigma}}. \quad (5.42)
\end{aligned}$$

Substituindo a equação acima na equação (5.32) obtemos

$$\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial t} \mathcal{R}_{c_{s k \sigma} d_{j'\sigma'}^\dagger d_{j\sigma}, d_{l\sigma}}(t) &= -\frac{i}{\hbar} \delta(t) Z^{-1} \sum_n e^{-\beta \varepsilon_n} \langle n | [c_{s k \sigma}(t) d_{j'\sigma'}^\dagger(t) d_{j\sigma}(t), d_{l\sigma}^\dagger(0)]_+ | n \rangle \\
&- \frac{i}{\hbar} \varepsilon_k \mathcal{R}_{c_{s k \sigma} d_{j'\sigma'}^\dagger d_{j\sigma}, d_{l\sigma}} - \frac{i}{\hbar} \mathcal{V}_{j'k} \mathcal{R}_{d_{j'\sigma} d_{j'\sigma'}^\dagger d_{j'\sigma'}, d_{l\sigma}} \\
&- \frac{i}{\hbar} \sum_{j \neq j'} \mathcal{V}_{jk} \mathcal{R}_{d_{j\sigma} d_{j'\sigma'}^\dagger d_{j'\sigma'}, d_{l\sigma}} + \frac{i}{\hbar} \sum_s \int dk \mathcal{V}_{jk} \mathcal{R}_{c_{\bar{s}\bar{k}\bar{\sigma}}^\dagger d_{j\sigma} c_{s k \sigma}, d_{l\sigma}} \\
&- \frac{i}{\hbar} \sum_s \int dk \mathcal{V}_{jk} \mathcal{R}_{c_{s k \sigma} d_{j\sigma}^\dagger c_{\bar{s}\bar{k}\bar{\sigma}}, d_{l\sigma}}. \quad (5.43)
\end{aligned}$$

Tomando sua transformada de Fourier

$$-\frac{i}{\hbar}\varepsilon^+\tilde{\mathcal{R}}_{c_{sk\sigma}d_{j\sigma'}^\dagger d_{j\sigma'},d_{l\sigma}}(\varepsilon^+) = \int \frac{\partial}{\partial t} \mathcal{R}_{c_{sk\sigma}d_{j\sigma'}^\dagger d_{j\sigma'},d_{l\sigma}}(t) e^{\frac{i}{\hbar}\varepsilon^+t} dt, \quad (5.44)$$

chegamos a

$$\begin{aligned} (\varepsilon^+ - \varepsilon_k) \tilde{\mathcal{R}}_{c_{sk\sigma}d_{j\sigma'}^\dagger d_{j\sigma'},d_{l\sigma}} &= \mathcal{V}_{j'k} \tilde{\mathcal{R}}_{d_{j'\sigma}d_{j'\sigma'}^\dagger d_{j'\sigma'},d_{l\sigma}} + \sum_{j \neq j'} \mathcal{V}_{jk} \tilde{\mathcal{R}}_{d_{j\sigma}d_{j'\sigma'}^\dagger d_{j'\sigma'},d_{l\sigma}} \\ &- \sum_s \int dk \mathcal{V}_{jk} \tilde{\mathcal{R}}_{c_{s\bar{k}\bar{\sigma}}^\dagger d_{j\bar{\sigma}} c_{sk\sigma},d_{l\sigma}} \\ &+ \sum_s \int dk \mathcal{V}_{jk} \tilde{\mathcal{R}}_{c_{sk\sigma}d_{j\bar{\sigma}}^\dagger c_{s\bar{k}\bar{\sigma}},d_{l\sigma}}. \end{aligned} \quad (5.45)$$

Empregando novamente a aproximação Hubbard I, desacoplamos as seguintes funções de Green na equação (5.45): $\tilde{\mathcal{R}}_{c_{sk\sigma}d_{j\bar{\sigma}}^\dagger c_{s\bar{k}\bar{\sigma}},d_{l\sigma}} \simeq \langle d_{j\bar{\sigma}}^\dagger c_{s\bar{k}\bar{\sigma}} \rangle \tilde{\mathcal{R}}_{c_{sk\sigma}d_{l\sigma}}$, $\tilde{\mathcal{R}}_{c_{s\bar{k}\bar{\sigma}}^\dagger d_{j\bar{\sigma}} c_{sk\sigma},d_{l\sigma}} \simeq \langle d_{j\bar{\sigma}}^\dagger c_{s\bar{k}\bar{\sigma}} \rangle \tilde{\mathcal{R}}_{c_{sk\sigma}d_{l\sigma}}$ e $\tilde{\mathcal{R}}_{d_{j\sigma}d_{j'\sigma'}^\dagger d_{j'\sigma'},d_{l\sigma}} \simeq \langle n_{j'\sigma'} \rangle \tilde{\mathcal{R}}_{d_j d_l}^\sigma$. Dessa forma ficamos com

$$\tilde{\mathcal{R}}_{c_{sk\sigma}d_{j\sigma'}^\dagger d_{j\sigma'},d_{l\sigma}} = \frac{\mathcal{V}_{j'k} \tilde{\mathcal{R}}_{d_{j'\sigma}d_{j'\sigma'}^\dagger d_{j'\sigma'},d_{l\sigma}}}{(\varepsilon^+ - \varepsilon_k)} + \frac{\sum_{j \neq j'} \mathcal{V}_{jk} \langle n_{j'\sigma'} \rangle \tilde{\mathcal{R}}_{d_j d_l}^\sigma}{(\varepsilon^+ - \varepsilon_k)}. \quad (5.46)$$

Substituindo a equação (5.46) na (5.30), obtemos

$$\begin{aligned} (\varepsilon^+ - \varepsilon_{jd\sigma} - \mathcal{U}_j) \tilde{\mathcal{R}}_{d_{j\sigma}n_{j\sigma'},d_{l\sigma}} &= \delta_{jl} \langle n_{d_j\sigma'} \rangle + \sum_s \int dk \mathcal{V}_{jk} \left(\frac{\mathcal{V}_{j'k} \tilde{\mathcal{R}}_{d_{j'\sigma}d_{j'\sigma'}^\dagger d_{j'\sigma'},d_{l\sigma}}}{(\varepsilon^+ - \varepsilon_k)} \right) \\ &+ \sum_s \int dk \mathcal{V}_{lk} \left(\frac{\sum_{j \neq j'} \mathcal{V}_{jk} \langle n_{j'\sigma'} \rangle \tilde{\mathcal{R}}_{d_j d_l}^\sigma}{(\varepsilon^+ - \varepsilon_k)} \right), \end{aligned} \quad (5.47)$$

logo

$$\begin{aligned} \left(\varepsilon^+ - \varepsilon_{jd\sigma} - \mathcal{U}_j - \sum_s \int dk \frac{\mathcal{V}_{jk}^2}{(\varepsilon^+ - \varepsilon_k)} \right) \tilde{\mathcal{R}}_{d_{j\sigma}n_{j\sigma'},d_{l\sigma}} &= \delta_{jl} \langle n_{d_j\sigma'} \rangle \\ &+ \sum_s \int dk \mathcal{V}_{lk} \\ &\times \left(\frac{\sum_{j \neq j'} \mathcal{V}_{jk} \langle n_{j'\sigma'} \rangle \tilde{\mathcal{R}}_{d_j d_l}^\sigma}{(\varepsilon^+ - \varepsilon_k)} \right), \end{aligned} \quad (5.48)$$

e

$$\tilde{\mathcal{R}}_{d_j\sigma n_{j\sigma'}, d_l\sigma} = \frac{\delta_{jl} \langle n_{d_j\sigma'} \rangle + \sum_{j' \neq j'} \langle n_{j'\sigma'} \rangle \sum_{\tilde{l}j} \tilde{\mathcal{R}}_{d_j d_l}^\sigma}{\varepsilon^+ - \varepsilon_{jd\sigma} - \mathcal{U}_j - \sum_{jj}}, \quad (5.49)$$

onde utilizamos a equação (4.51). Substituindo, então, a equação (5.49) na (5.12), temos

$$\begin{aligned} (\varepsilon^+ - \varepsilon_{jd\sigma}) \tilde{\mathcal{R}}_{d_j d_l}^\sigma &= \delta_{jl} + \sum_{\tilde{j}} \sum_{j\tilde{j}} \tilde{\mathcal{R}}_{d_j d_l}^\sigma + \mathcal{U}_j \frac{\delta_{jl} \langle n_{d_j\sigma'} \rangle}{\varepsilon^+ - \varepsilon_{jd\sigma} - \mathcal{U}_j - \sum_{jj}} \\ &+ \mathcal{U}_j \frac{\sum_{j' \neq j} \langle n_{j\sigma'} \rangle \sum_{\tilde{l}j'} \tilde{\mathcal{R}}_{d_j' d_l}^\sigma}{\varepsilon^+ - \varepsilon_{jd\sigma} - \mathcal{U}_j - \sum_{jj}}. \end{aligned} \quad (5.50)$$

Realizando a soma em \tilde{j} , podemos escrever

$$\begin{aligned} (\varepsilon^+ - \varepsilon_{jd\sigma} - \sum_{jj}) \tilde{\mathcal{R}}_{d_j d_l}^\sigma &= \delta_{jl} + \sum_{\tilde{j} \neq j} \sum_{j\tilde{j}} \tilde{\mathcal{R}}_{d_j d_l}^\sigma + \mathcal{U}_j \frac{\delta_{jl} \langle n_{d_j\sigma'} \rangle}{\varepsilon^+ - \varepsilon_{jd\sigma} - \mathcal{U}_j - \sum_{jj}} \\ &+ \mathcal{U}_j \frac{\sum_{j' \neq j} \langle n_{j\sigma'} \rangle \sum_{\tilde{l}j'} \tilde{\mathcal{R}}_{d_j' d_l}^\sigma}{\varepsilon^+ - \varepsilon_{jd\sigma} - \mathcal{U}_j - \sum_{jj}}. \end{aligned} \quad (5.51)$$

Fazendo $j = l = 1$, obtemos

$$\begin{aligned} (\varepsilon^+ - \varepsilon_{1d\sigma} - \sum_{11}) \tilde{\mathcal{R}}_{d_1 d_1}^\sigma &= 1 + \sum_{12} \tilde{\mathcal{R}}_{d_2 d_1}^\sigma + \mathcal{U}_1 \frac{\langle n_{d_1\sigma'} \rangle}{\varepsilon^+ - \varepsilon_{1d\sigma} - \mathcal{U}_1 - \sum_{11}} \\ &+ \mathcal{U}_1 \frac{\langle n_{d_1\sigma'} \rangle \sum_{12} \tilde{\mathcal{R}}_{d_2 d_1}^\sigma}{\varepsilon^+ - \varepsilon_{1d\sigma} - \mathcal{U}_1 - \sum_{11}}. \end{aligned} \quad (5.52)$$

Por uma questão de simplicidade, tomamos o limite $\mathcal{U}_j \rightarrow \infty$, e como $\eta \rightarrow 0^+$, podemos escrever

$$\begin{aligned} (\varepsilon - \varepsilon_{1d\sigma} - \sum_{11}) \tilde{\mathcal{R}}_{d_1 d_1}^\sigma &= 1 + \sum_{12} \tilde{\mathcal{R}}_{d_2 d_1}^\sigma - \langle n_{d_1\sigma'} \rangle - \langle n_{d_1\sigma'} \rangle \sum_{12} \tilde{\mathcal{R}}_{d_2 d_1}^\sigma \\ &= 1 - \langle n_{d_1\sigma'} \rangle + \sum_{12} \tilde{\mathcal{R}}_{d_2 d_1}^\sigma (1 - \langle n_{d_1\sigma'} \rangle). \end{aligned} \quad (5.53)$$

Para obtermos a $\tilde{\mathcal{R}}_{d_2 d_1}^\sigma$, basta tomarmos $j = 2$ e $l = 1$ na equação (5.51), assim

$$(\varepsilon^+ - \varepsilon_{2d\sigma} - \Sigma_{21}) \tilde{\mathcal{R}}_{d_2 d_1}^\sigma = \Sigma_{21} \tilde{\mathcal{R}}_{d_1 d_1}^\sigma + \mathcal{U}_2 \frac{\langle n_{d_2 \sigma'} \rangle \Sigma_{21} \tilde{\mathcal{R}}_{d_1 d_1}^\sigma}{\varepsilon^+ - \varepsilon_{2d\sigma} - \mathcal{U}_2 - \Sigma_{22}} \quad (5.54)$$

como $\mathcal{U}_j \rightarrow \infty$ e $\eta \rightarrow 0^+$, temos

$$(\varepsilon - \varepsilon_{2d\sigma} - \Sigma_{21}) \tilde{\mathcal{R}}_{d_2 d_1}^\sigma = \Sigma_{21} \tilde{\mathcal{R}}_{d_1 d_1}^\sigma (1 - \langle n_{d_2 \sigma'} \rangle) \quad (5.55)$$

logo

$$\tilde{\mathcal{R}}_{d_2 d_1}^\sigma = (1 - \langle n_{d_2 \sigma'} \rangle) \frac{\Sigma_{21}}{(\varepsilon - \varepsilon_{2d\sigma} - \Sigma_{21})} \tilde{\mathcal{R}}_{d_1 d_1}^\sigma. \quad (5.56)$$

Substituindo a expressão obtida para $\tilde{\mathcal{R}}_{d_2 d_1}^\sigma$ na $\tilde{\mathcal{R}}_{d_1 d_1}^\sigma$, obtemos

$$\tilde{\mathcal{R}}_{d_1 d_1}^\sigma = \frac{1 - \langle n_{d_1 \sigma'} \rangle}{\varepsilon - \varepsilon_{1d\sigma} - \Sigma_{11} - \lambda_{12}^{\sigma'} \left(\frac{(\Sigma_{11})^2}{\varepsilon - \varepsilon_{2d\sigma} - \Sigma_{11}} \right)} \quad (5.57)$$

onde $\lambda_{12}^{\sigma'} = (1 - \langle n_{d_1 \sigma'} \rangle)(1 - \langle n_{d_2 \sigma'} \rangle)$, $\Sigma_{jl} = \Sigma_{jj}$, e Σ_{jl} pode ser determinado pela equação (4.51). As outras funções de Green $\tilde{\mathcal{R}}_{d_2 d_2}^\sigma$ e $\tilde{\mathcal{R}}_{d_1 d_2}^\sigma$ podem ser obtidas pela permutação dos índices $1 \leftrightarrow 2$ nas equações (5.57) e (5.56), respectivamente. Vamos introduzir ainda a densidade de estados adimensional para as impurezas:

$$\text{DOS}_{jj}^\sigma = -\frac{1}{\pi \rho^{\text{GS}}(D)} \text{Im}(\tilde{\mathcal{R}}_{d_j d_j}^\sigma) \quad (5.58)$$

onde nós aplicamos a equação (4.8) na borda D da banda.

6 Auto-energias não interagente e parâmetros de Fano

Neste capítulo realizamos o cálculo da auto-energia não interagente definida pela equação (4.51) e dos parâmetros de Fano definidos pelas equações (4.15), (4.49) e (4.54). A equação (4.51) é dada por

$$\Sigma_{lj} = \sum_s \int dk \frac{\mathcal{V}_{lk} \mathcal{V}_{jk}}{\varepsilon^+ - \varepsilon_k}, \quad (6.1)$$

com $\varepsilon^+ = \varepsilon + i\eta$ e $\eta \rightarrow 0^+$. Separando a equação (6.1) em partes real e imaginária, obtemos

$$\Sigma_{lj} = \sum_s \int dk \frac{\mathcal{V}_{lk} \mathcal{V}_{jk}}{\varepsilon - \varepsilon_k} - i\pi \sum_s \int dk \mathcal{V}_{lk} \mathcal{V}_{jk} \delta(\varepsilon - \varepsilon_k), \quad (6.2)$$

onde novamente utilizamos a função delta $\delta(\varepsilon - \varepsilon_k) = \frac{1}{\pi} \frac{\eta}{(\varepsilon - \varepsilon_k)^2 + \eta^2}$. A hibridização \mathcal{V}_{jk} foi definida na equação (4.5) da seguinte maneira

$$\mathcal{V}_{jk} = \frac{v_0}{2\pi} \sqrt{\frac{\pi\Omega_0}{\mathcal{N}}} \sqrt{|k|}. \quad (6.3)$$

Assim, para o sistema com o grafeno como hospedeiro, podemos escrever a equação (6.2) como

$$\begin{aligned}
 \Sigma_{l_j}^{GS} &= \left(\frac{v_0}{2\pi}\right)^2 \frac{\pi\Omega_0}{\mathcal{N}} \sum_s \int \frac{|k|}{\varepsilon - \varepsilon_k} dk - i\pi \left(\frac{v_0}{2\pi}\right)^2 \frac{\pi\Omega_0}{\mathcal{N}} \sum_s \int |k| \delta(\varepsilon - \varepsilon_k) dk \\
 &= -\left(\frac{v_0}{2\pi}\right)^2 \frac{\pi\Omega_0}{\mathcal{N}} \frac{1}{(\hbar v_F)^2} \sum_s \int_{-D}^D \frac{|\varepsilon_k|}{\varepsilon_k - \varepsilon} d\varepsilon_k \\
 &\quad - i\pi \left(\frac{v_0}{2\pi}\right)^2 \frac{\pi\Omega_0}{\mathcal{N}} \frac{1}{(\hbar v_F)^2} \sum_s \int_{-D}^D |\varepsilon_k| \delta(\varepsilon_k - \varepsilon) d\varepsilon_k \\
 &= -\left(\frac{v_0}{2\pi}\right)^2 \frac{2\pi\Omega_0}{\mathcal{N}} \frac{1}{(\hbar v_F)^2} \int_{-D}^D |\varepsilon_k| d(\ln |\varepsilon_k - \varepsilon|) \\
 &\quad - i\pi \left(\frac{v_0}{2\pi}\right)^2 \frac{2\pi\Omega_0}{\mathcal{N}} \frac{1}{(\hbar v_F)^2} |\varepsilon| \\
 &= \frac{\Omega_0}{2\pi\mathcal{N}} \frac{v_0^2}{(\hbar v_F)^2} \left(-\varepsilon \ln \left(\frac{|D^2 - \varepsilon^2|}{\varepsilon^2} \right) - i\pi |\varepsilon| \right) \\
 &= \eta^{\text{GS}} \left(\varepsilon \ln \left| \frac{\varepsilon^2}{\varepsilon^2 - D^2} \right| - i\pi |\varepsilon| \right) \tag{6.4}
 \end{aligned}$$

onde $\eta^{\text{GS}} = \frac{\Omega_0}{2\pi\mathcal{N}} \frac{v_0^2}{(\hbar v_F)^2} = \frac{v_0^2}{D^2}$, e utilizamos a seguinte integral

$$\begin{aligned}
 \int_{-D}^D |\varepsilon_k| d(\ln |\varepsilon_k - \varepsilon|) &= |\varepsilon_k| \ln |\varepsilon_k - \varepsilon| \Big|_{-D}^D - \int_{-D}^D \ln |\varepsilon_k - \varepsilon| d\varepsilon_k \\
 &= |\varepsilon_k| \ln |\varepsilon_k - \varepsilon| \Big|_0^{-D} + |\varepsilon_k| \ln |\varepsilon_k - \varepsilon| \Big|_0^D \\
 &\quad - \int_0^{-D} \ln |\varepsilon_k - \varepsilon| d\varepsilon_k - \int_0^D \ln |\varepsilon_k - \varepsilon| d\varepsilon_k \\
 &= -D \ln |D + \varepsilon| + D \ln |D - \varepsilon| - [(-D - \varepsilon) \ln |D + \varepsilon| \\
 &\quad - (-D - \varepsilon) + \varepsilon \ln |\varepsilon| - \varepsilon] - [(D - \varepsilon) \ln |D - \varepsilon| \\
 &\quad - (D - \varepsilon) + \varepsilon \ln |\varepsilon| - \varepsilon] \\
 &= \varepsilon \ln |D + \varepsilon| - \varepsilon \ln |\varepsilon| + \varepsilon \ln |D - \varepsilon| - \varepsilon \ln |\varepsilon| \\
 &= \varepsilon (\ln |(D + \varepsilon)(D - \varepsilon)| - \ln |\varepsilon^2|) \\
 &= \varepsilon \ln \left| \frac{D^2 - \varepsilon^2}{\varepsilon^2} \right|. \tag{6.5}
 \end{aligned}$$

No caso do sistema com o 2DEG, podemos escrever a equação (6.2) como

$$\begin{aligned}
 \Sigma_{l_j}^{2DEG} &= \left(\frac{v_0}{2\pi}\right)^2 \frac{\pi\Omega_0}{\mathcal{N}} \int \frac{|k|}{\varepsilon - \varepsilon_k} dk - i\pi \left(\frac{v_0}{2\pi}\right)^2 \frac{\pi\Omega_0}{\mathcal{N}} \int |k| \delta(\varepsilon - \varepsilon_k) dk \\
 &= -\left(\frac{v_0}{2\pi}\right)^2 \frac{\pi\Omega_0}{\mathcal{N}} \frac{m}{\hbar^2} \int_{-D}^D \frac{1}{\varepsilon_k - \varepsilon} d\varepsilon_k \\
 &\quad - i\pi \left(\frac{v_0}{2\pi}\right)^2 \frac{\pi\Omega_0}{\mathcal{N}} \frac{m}{\hbar^2} \int_{-D}^D \delta(\varepsilon_k - \varepsilon) d\varepsilon_k \\
 &= -\left(\frac{v_0}{2\pi}\right)^2 \frac{\pi\Omega_0}{\mathcal{N}} \frac{m}{\hbar^2} (\ln|D - \varepsilon| - \ln|D + \varepsilon|) \\
 &\quad - i\pi \left(\frac{v_0}{2\pi}\right)^2 \frac{\pi\Omega_0}{\mathcal{N}} \frac{m}{\hbar^2} \\
 &= \frac{\Omega_0}{2\pi\mathcal{N}} \frac{v_0^2}{(\hbar v_F)^2} \left(-D \ln \left| \frac{D - \varepsilon}{D + \varepsilon} \right| - i\pi D \right) \\
 &= \eta^{2DEG} \left(D \ln \left| \frac{D + \varepsilon}{D - \varepsilon} \right| - i\pi D \right), \tag{6.6}
 \end{aligned}$$

onde $\eta^{2DEG} = \frac{\Omega_0}{2\pi\mathcal{N}} \frac{v_0^2}{(\hbar v_F)^2} = \frac{v_0^2}{2D^2}$. Note que para $\varepsilon \ll D$, temos que: $\text{Re}(\Sigma_{l_j}^{GS}) = \text{Re}(\Sigma_{l_j}^{2DEG}) \rightarrow 0$. A expressão obtida para a auto-energia na equação (6.4) está em acordo com a correspondente determinada nas referências [5-7]. Para o 2DEG, obtemos o resultado encontrado na referência [33]. Para os parâmetros de Fano, a partir das equações (4.15), (4.49) e (4.54) podemos escrever

$$q_{Tj} = \frac{1}{\pi\rho_0 v_0^2} \text{Re}\Sigma_{jj} + (\pi\rho_0 v_0)^{-1} \left(\frac{t_{dj}}{t_c} \right), \tag{6.7}$$

pelas equações (6.2) e (6.3), para o sistema com o grafeno podemos escrever

$$\begin{aligned}
 q_{Tj}^{GS} &= \left(\frac{1}{\pi\rho_0 v_0^2} \right) \left(\frac{v_0}{2\pi} \right)^2 \frac{\pi\Omega_0}{\mathcal{N}} \sum_s \int \frac{|k|}{\varepsilon - \varepsilon_k} dk + \left(\frac{1}{\pi\rho_0 v_0} \right) \left(\frac{t_{dj}}{t_c} \right) \\
 &= -\left(\frac{1}{\pi\rho_0} \right) \frac{1}{4\pi^2} \frac{2\pi\Omega_0}{\mathcal{N}} \frac{1}{(\hbar v_F)^2} \int \frac{|\varepsilon_k|}{\varepsilon_k - \varepsilon} dk + \left(\frac{1}{\pi\rho_0 v_0} \right) \left(\frac{t_{dj}}{t_c} \right) \\
 &= -\frac{\Omega_0}{2\pi^2\rho_0\mathcal{N}} \frac{1}{(\hbar v_F)^2} \int_{-D}^D |\varepsilon_k| d(\ln|\varepsilon - \varepsilon_k|) + \left(\frac{1}{\pi\rho_0 v_0} \right) \left(\frac{t_{dj}}{t_c} \right) \\
 &= -\frac{1}{\pi} \ln \left| \frac{D^2 - \varepsilon^2}{\varepsilon^2} \right| + \left(\frac{1}{\pi v_0} \right) \frac{D^2}{|\varepsilon|} \left(\frac{t_{dj}}{t_c} \right) \\
 &= \frac{1}{\pi} \ln \left| \frac{\varepsilon^2}{\varepsilon^2 - D^2} \right| + \left(\frac{t_{dj}}{t_c} \right) \frac{D^2}{\pi v_0 |\varepsilon|}, \tag{6.8}
 \end{aligned}$$

enquanto que o parâmetro \mathcal{F}_j definido pela equação (4.50) se torna

$$\begin{aligned}
 \mathcal{F}_j^{GS} &= \left(\frac{1}{\pi\rho_0 v_0^2} \right) \pi \left(\frac{v_0}{2\pi} \right)^2 \frac{\pi\Omega_0}{\mathcal{N}} \sum_s \int |k| \delta(\varepsilon - \varepsilon_k) dk \\
 &= \left(\frac{1}{\rho_0} \right) \frac{1}{4\pi^2} \frac{2\pi\Omega_0}{\mathcal{N}} \frac{1}{(\hbar v_F)^2} \int_{-D}^D |\varepsilon_k| \delta(\varepsilon_k - \varepsilon) d\varepsilon_k \\
 &= 1,
 \end{aligned} \tag{6.9}$$

onde utilizamos as equações (6.5) e (4.8). No caso do sistema com o 2DEG, a equação (6.7) pode ser escrita como

$$\begin{aligned}
 q_{T_j}^{2DEG} &= \left(\frac{1}{\pi\rho_0 v_0^2} \right) \left(\frac{v_0}{2\pi} \right)^2 \frac{\pi\Omega_0}{\mathcal{N}} \int \frac{|k|}{\varepsilon - \varepsilon_k} dk + \left(\frac{1}{\pi\rho_0 v_0} \right) \left(\frac{t_{dj}}{t_c} \right) \\
 &= - \left(\frac{1}{\pi\rho_0} \right) \frac{1}{4\pi^2} \frac{\pi\Omega_0}{\mathcal{N}} \frac{m}{\hbar^2} \int_{-D}^D \frac{1}{\varepsilon_k - \varepsilon} d\varepsilon_k + \left(\frac{1}{\pi\rho_0 v_0} \right) \left(\frac{t_{dj}}{t_c} \right) \\
 &= - \frac{\Omega_0}{4\pi^2 \rho_0 \mathcal{N}} \frac{m}{\hbar^2} (\ln |D - \varepsilon| - \ln |D + \varepsilon|) + \left(\frac{1}{\pi\rho_0 v_0} \right) \left(\frac{t_{dj}}{t_c} \right) \\
 &= - \frac{1}{\pi} \ln \left| \frac{D - \varepsilon}{D + \varepsilon} \right| + \left(\frac{2D}{\pi v_0} \right) \left(\frac{t_{dj}}{t_c} \right) \\
 &= \frac{1}{\pi} \ln \left| \frac{D + \varepsilon}{D - \varepsilon} \right| + \left(\frac{t_{dj}}{t_c} \right) \frac{2D}{\pi v_0},
 \end{aligned} \tag{6.10}$$

e para o parâmetro \mathcal{F}_j temos

$$\begin{aligned}
 \mathcal{F}_j^{2DEG} &= \left(\frac{1}{\pi\rho_0 v_0^2} \right) \pi \left(\frac{v_0}{2\pi} \right)^2 \frac{\pi\Omega_0}{\mathcal{N}} \int |k| \delta(\varepsilon - \varepsilon_k) dk \\
 &= \left(\frac{1}{\rho_0} \right) \frac{1}{4\pi^2} \frac{\pi\Omega_0}{\mathcal{N}} \frac{m}{\hbar^2} \int_{-D}^D \delta(\varepsilon_k - \varepsilon) d\varepsilon_k \\
 &= 1
 \end{aligned} \tag{6.11}$$

onde utilizamos a equação (4.9). Enfatizamos que, para $t_{dj}/t_c \ll 1$ e energias $\varepsilon \ll D$ as equações (6.8) e (6.10) exibem comportamentos opostos: $|q_{T_j}^{GS}| \rightarrow \infty$ e $|q_{T_j}^{2DEG}| \rightarrow 0$.

7 Resultados e Discussões

Neste capítulo apresentamos os resultados numéricos, obtidos a partir do modelo teórico que foi desenvolvido nos capítulos 4, 5 e 6, bem como as discussões acerca dos mesmos.

7.1 Parâmetros

A presente aproximação é para $T \gg T_K$, isto é, o sistema estudado se encontra fora do regime Kondo, e dentro de um intervalo de temperaturas em que podemos seguramente definir a função degrau como a distribuição de Fermi no hospedeiro. Esta suposição foi anteriormente considerada nas referências [5] e [6]. Aqui, medimos as densidades e energias em unidades da $\rho^{\text{GS}}(D)$ e $[\rho^{\text{GS}}(D)]^{-1}$, respectivamente, onde utilizamos a equação (4.8) na borda $D = 7\text{eV}$ da banda [5,6]. Para as energias Zeeman, utilizamos $\Delta_1 = -\Delta_2 = 2 \times 10^{-5}$ na equação (4.4), isso corresponde a um campo magnético de aproximadamente 2.4 T. Para a hibridização entre o hospedeiro e as impurezas, na equação (4.5) utilizamos $v_0 = 0.14$ [5,6]. Os níveis das impurezas são ajustados em $\varepsilon_{1d} = \varepsilon_{2d} = 0$.

7.2 Sistema com o grafeno

Nesta seção analisamos o sistema em que o grafeno é o hospedeiro. Aqui, empregamos a equação (4.58) em combinação com as equações (4.8), (5.56), (5.57), (6.4), (6.8) e (6.9).

Na figura 7.1, apresentamos o valor absoluto do parâmetro de Fano $|q_{T_j}^{\text{GS}}|$, obtido na equação (6.10), em função da energia ε . Podemos perceber que todas as curvas exibem um padrão geral em que o parâmetro de Fano tende ao infinito quando a energia se aproxima do nível de Fermi $\varepsilon = 0$, e decai a valores finitos quando ε aumenta em direção as bordas da banda. Aumentando a razão t_{dj}/t_c o parâmetro de Fano diverge mais rapidamente. Na figura 7.1(a) a curva para $|q_{T_1}^{\text{GS}}|$ (curva azul

sólida) torna-se mais ampla do que a curva para $|q_{T2}^{\text{GS}}|$ (curva vermelha pontilhada) para $|\varepsilon| \lesssim 0.2$ e continua a aumentar quando $\varepsilon \rightarrow 0$. Este comportamento torna-se ainda mais pronunciado na figura 7.1 (b) onde a razão t_{d1}/t_c é aumentada dez vezes, enquanto a razão t_{d2}/t_c é mantida fixa. Como resultado, $|q_{T1}^{\text{GS}}|$ encontra-se acima do $|q_{T2}^{\text{GS}}|$ por quase todo o intervalo, exceto nas fronteiras da escala para $|\varepsilon| \gtrsim 1.7$. As regiões sombreadas na figura 7.1 correspondem aos intervalos em que $|q_{T2}^{\text{GS}}| < |q_{T1}^{\text{GS}}|$, enquanto que fora destas regiões a relação oposta é satisfeita $|q_{T2}^{\text{GS}}| > |q_{T1}^{\text{GS}}|$. No último caso, onde $|q_{T2}^{\text{GS}}|$ se torna dominante ao $|q_{T1}^{\text{GS}}|$, o comportamento resultante produz uma interferência Fano na LDOS governada pela segunda impureza. É válido mencionar, que apesar da condição $t_{d1}/t_c > t_{d2}/t_c$ ser mantida para todas as curvas na figura 7.1, há intervalos de energia em que a condição oposta ($|q_{T2}^{\text{GS}}| > |q_{T1}^{\text{GS}}|$) é satisfeita. Esta característica inesperada é um resultado da interferência quântica no sistema com duas impurezas e o comportamento peculiar da densidade de estados do grafeno. Devo ressaltar que tal comportamento não está presente no sistema com o 2DEG, como será discutido na seção 1.3.

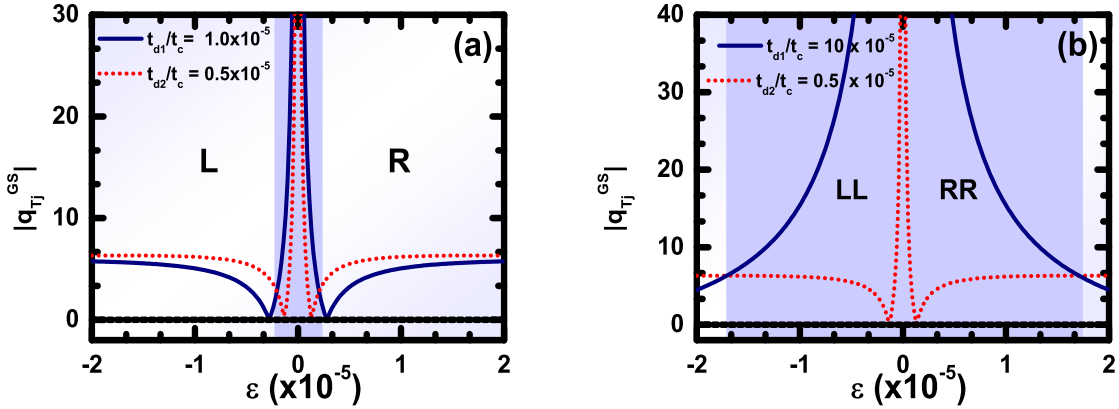


Figura 7.1: Valor absoluto do parâmetro de Fano da equação (6.10) em função da energia ε para $v_0 = 0.14$ e $t_{d2}/t_c = 0.5 \times 10^{-5}$. (a) Para $t_{d1}/t_c = 1 \times 10^{-5}$. (b) Para $t_{d1}/t_c = 10 \times 10^{-5}$. Nestes gráficos definimos a região sombreada segundo a condição: $|q_{T2}^{\text{GS}}| < |q_{T1}^{\text{GS}}|$. Aumentando a razão t_{d1}/t_c a partir de 1×10^{-5} até 10×10^{-5} esta região é ampliada, como mostrado na figura (b). Em ambos os casos é observado que o parâmetro de Fano tende ao infinito quando a energia se aproxima do nível de Fermi.

Na figura 7.1 (b), aproximamos a ponta do STM do sistema fazendo $t_{d1}/t_c = 10 \times 10^{-5}$. Dentro da região sombreada, o adatom governa a interferência Fano e $|q_{T1}^{\text{GS}}|$ (curva azul sólida) domina $|q_{T2}^{\text{GS}}|$ (curva vermelha pontilhada). Quando $t_{dj}/t_c \ll 1$, espera-se que o perfil da LDOS para o grafeno apresente ressonâncias. Este perfil é oposto ao esperado para o sistema com o 2DEG, já que a teoria de Fano prevê

antiressonâncias. De fato, a equação (6.10) nos mostra que $|d_{Tj}^{2\text{DEG}}| \rightarrow 0$ para $\varepsilon \rightarrow 0$ [31,32].

Como mencionado anteriormente, a densidade de estados para as impurezas podem ser obtidas pela equação (5.58) e como a equação (4.4) nos mostra, suas componentes de spin se deslocam em direções opostas em relação ao nível de Fermi ($\varepsilon = 0$). Na figura 7.2 (a), a energia Zeeman é $\Delta_1 = 2 \times 10^{-5}$, assim a ressonância do estado localizado no adatom para spin up (curva vermelha pontilhada) se desloca para a esquerda, enquanto que a equivalente para spin down se desloca para a direita (veja as setas “up” e “down” desenhadas nesta figura). Nós identificamos tais ressonâncias pelas letras “AA” e “BB”. Para a segunda impureza, $\Delta_2 = -\Delta_1$, logo, os picos se deslocam em sentido contrário (spin down para a esquerda e spin up para a direita), como nos mostra a figura 7.2 (b). Estes picos são rotulados como “A” e “B”. Os parâmetros de Fano apresentados na figura 7.1 e os picos “A”, “B”, “AA” e “BB” para as ressonâncias dependentes do spin nos ajudarão a perceber, no limite assimétrico $t_{d1}/t_c \neq t_{d2}/t_c$, a inversão da componente de spin majoritário na LDOS.

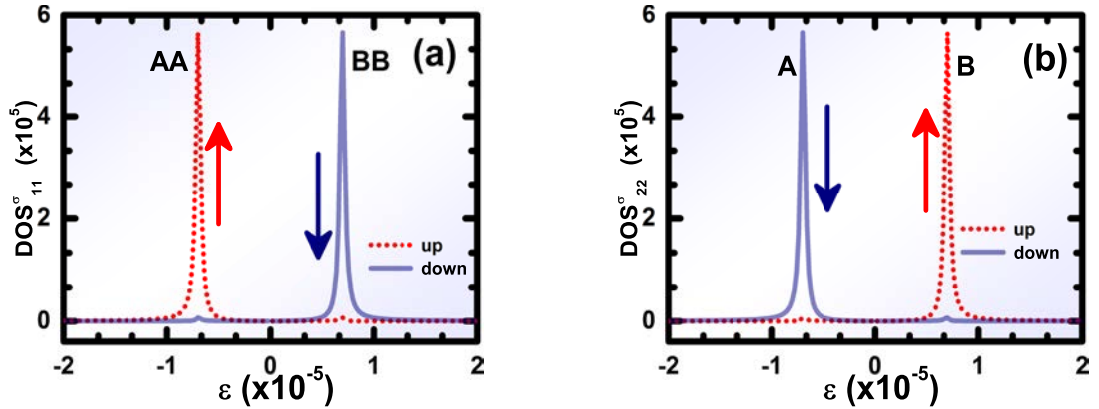


Figura 7.2: Aqui utilizamos a equação (5.58) para a densidade de estados das impurezas. (a) Densidade de estados para o adatom, com energia Zeeman $\Delta_1 = 2 \times 10^{-5}$. (b) Densidade de estados para a segunda impureza com energia Zeeman $\Delta_2 = -\Delta_1$ (campos magnéticos antiparalelos). As setas (vermelha e azul) indicam o spin correspondente as ressonâncias.

Como temos campos magnéticos antiparalelos, estabelecido pela restrição $\Delta_1 = -\Delta_2 = 2 \times 10^{-5}$ nas energias Zeeman, a LDOS não exibe dependência de spin no caso do limite simétrico dos parâmetros de Fano, limite este determinado pelas proporções $t_{d1}/t_c = t_{d2}/t_c$. O limite simétrico dos parâmetros de Fano pode ser alcançado assumindo que a integral de superposição t_{d2} entre a ponta e a segunda impureza

tem uma função de onda mais ampla, que surge a partir da última, que compensa a menor proximidade da ponta do STM, levando assim a mesma superposição t_{d1} com o adatom.

Assim, o perfil da LDOS é spin degenerado, como podemos ver na figura 7.3 (a) para $t_{d1}/t_c = t_{d2}/t_c = 1 \times 10^{-5}$, onde as curvas para ambos spins estão sobrepostas. Apesar do perfil não polarizado da LDOS, devo ressaltar que o par de ressonâncias obtidos é um resultado direto do efeito Zeeman no sítios das impurezas. Caso contrário, para níveis $\varepsilon_{1d\sigma} = \varepsilon_{2d\sigma} = 0$, as impurezas estariam completamente desacopladas do grafeno e a LDOS da superfície seria descrita pela equação (4.8), cujo perfil é descrito pela curva verde com quadrados, também ilustrado na figura 7.3 (a).

A figura 7.3 (b) mostra a LDOS total (curva preta sólida) obtida pela equação (4.58). Podemos observar que ambos estados de spin contribuem igualmente a LDOS total para todos os valores da energia ε . Isto está representado pelas duas setas antiparalelas em ambos os picos na curva da LDOS total. Aqui explicitamos também o efeito do termo misto $\Sigma_{\sigma}\rho_{1221}^{\sigma}$, obtido pela equação (4.57), sobre a LDOS determinada pela equação (4.55). A curva cinza pontilhada na figura 7.3 (b) descreve a quantidade $\Sigma_{\sigma}\rho_{1221}^{\sigma}$, e ela nos mostra que o efeito do termo misto é suprimir o termo direto $\Sigma_{\sigma}\rho_{1122}^{\sigma}$ que pode ser calculado pela equação (4.56). O último exhibe duas ressonâncias (curva cinza tracejada), enquanto que o primeiro é caracterizado por duas antiressonâncias. Os picos no termo direto caracterizam a interferência construtiva, que se opõem as antiressonâncias fano encontradas no termo misto, que são as assinaturas da interferência destrutiva. Como resultado, a LDOS total da equação (4.58) é dada pela curva preta sólida. A curva verde com quadrados descreve $\Sigma_{\sigma}\rho^{\text{GS}}(\varepsilon)$ determinada pela equação (4.8), que representa a densidade de estados do grafeno na ausência das impurezas, onde não há os picos, como esperado.

Na figura 7.4, analisamos o limite assimétrico dos parâmetros de Fano estabelecido pela condição $t_{d1}/t_c \neq t_{d2}/t_c$. Nesta situação, com $t_{d1}/t_c = 1 \times 10^{-5}$ e $t_{d2}/t_c = 0.5 \times 10^{-5}$, podemos observar que a LDOS total se torna dependente de spin. Tal característica aparece na figura 7.4 (a), onde a distinção entre as componentes up e down da LDOS está evidente ($\rho_{\text{LDOS}}^{\uparrow} \neq \rho_{\text{LDOS}}^{\downarrow}$). No intervalo de energia negativas, há dois picos com diferentes amplitudes, mas o pico para spin down (curva azul sólida) é mais pronunciado em relação ao correspondente para spin up (curva vermelha pontilhada), isto é, $\rho_{\text{LDOS}}^{\downarrow} > \rho_{\text{LDOS}}^{\uparrow}$. Já no intervalo de energias positivas este padrão é invertido ($\rho_{\text{LDOS}}^{\uparrow} > \rho_{\text{LDOS}}^{\downarrow}$). Assim, dependendo do pico de ressonância que é

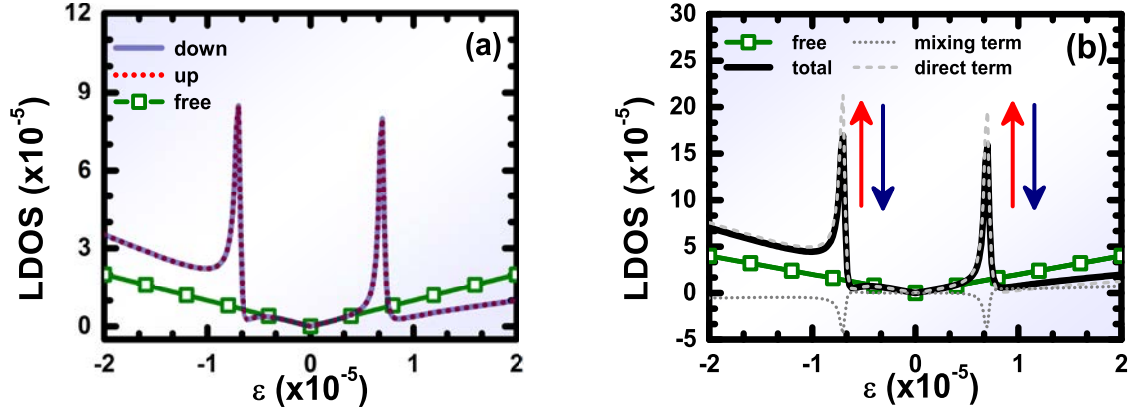


Figura 7.3: Limite simétrico dos parâmetros de Fano: $t_{d1}/t_c = t_{d2}/t_c = 1 \times 10^{-5}$. (a) No limite simétrico, $\rho_{\text{LDOS}}^\sigma$ é spin degenerada. Como resultado, a curva vermelha pontilhada e a curva azul sólida para spins up e down, respectivamente, estão sobrepostas. A densidade de estados para o grafeno livre das impurezas é representada pela curva verde com quadrados. (b) A curva sólida preta representa a LDOS total, dada pela soma das contribuições de spin up e down. As setas foram incluídas a fim de ilustrar os spins correspondentes as ressonâncias. Adicionalmente, as curvas cinzas pontilhada e tracejada descrevem os termos misto e direto, respectivamente.

sondado pela ponta do STM, localizado em $\varepsilon \simeq -0.7 \times 10^{-5}$ ou em $\varepsilon \simeq 0.7 \times 10^{-5}$, o sistema filtra predominantemente spin down ou spin up, respectivamente.

A origem de tal filtro está dentro do termo direto $\Sigma_\sigma \rho_{1122}^\sigma$ determinado pela equação (4.56); em particular, ele surge a partir da contribuição $-(q_{T2}^{\text{GS}})^2 \text{Im}(\tilde{\mathcal{R}}_{d_2 d_2}^\sigma) = (q_{T2}^{\text{GS}})^2 \pi \rho^{\text{GS}}(D) \text{DOS}_{22}^\sigma$, onde usamos a equação (5.58). Como fora da região sombreada (lados “L” e “R”) na figura 7.1 (a) temos $|q_{T2}^{\text{GS}}| > |q_{T1}^{\text{GS}}|$, o parâmetro $(q_{T2}^{\text{GS}})^2$ amplifica as ressonâncias “A” e “B” da figura 7.2 (b), resultando assim nos picos “L.A” e “R.B” na figura 7.4 (a). Na figura 7.4 (b), realizamos a mesma análise como feito na figura 7.3 (b). Podemos observar que no limite assimétrico ($t_{d1}/t_c \neq t_{d2}/t_c$), o termo misto $\Sigma_\sigma \rho_{1221}^\sigma$ (curva cinza pontilhada) suprime o pico do termo direto $\Sigma_\sigma \rho_{1122}^\sigma$ assim como no regime simétrico ($t_{d1}/t_c = t_{d2}/t_c$) da figura 7.3 (b). Esta supressão leva a curva preta sólida, que é obtida pela equação (4.56). Contrário ao resultado da figura 7.3 (b), na figura 7.4 (b) cada pico da LDOS total exibe uma polarização finita, cujo spin majoritário é indicado pela seta ao lado de cada pico.

Com o intuito de analisar o papel do termo misto $\Sigma_\sigma \rho_{1221}^\sigma$ sobre a LDOS total, consideramos na figura 7.5 a ponta do STM mais próxima à superfície do hospedeiro com as impurezas. Para realizar tal situação, aumentamos a razão t_{d1}/t_c para 10×10^{-5} , mas mantemos fixa a razão t_{d2}/t_c em 0.5×10^{-5} . Consequentemente, o valor de

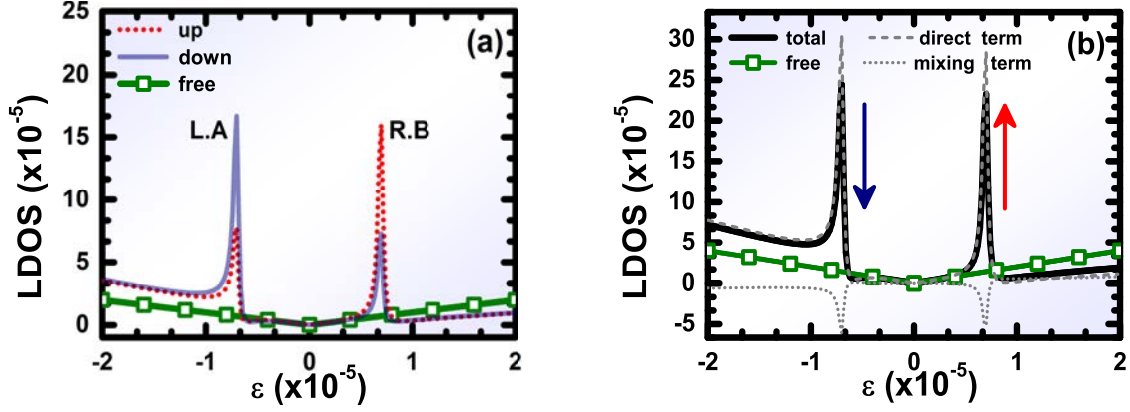


Figura 7.4: Limite assimétrico dos parâmetros de Fano: $t_{d1}/t_c = 1 \times 10^{-5}$ e $t_{d2}/t_c = 0.5 \times 10^{-5}$. (a) No limite assimétrico, $\rho_{\text{LDOS}}^\sigma$ torna-se dependente de spin, que está evidente pelos picos com diferentes amplitudes para spin up (curva vermelha pontilhada) e spin down (curva azul sólida). A densidade de estados para o grafeno livre das impurezas é representada pela curva verde com quadrados. (b) Somando as curvas de (a) para spin up e spin down, obtém-se a curva preta sólida para a LDOS total. As setas ilustram a polarização de spin. Também são ilustradas as curvas cinza pontilhada e tracejada para os termos misto e direto, respectivamente.

t_{d1}/t_c é dez vezes maior do que o correspondente valor utilizado na figura 7.4, o que torna o termo misto mais relevante neste caso. A figura 7.5 (a) exibe ressonâncias mais pronunciadas com respeito aquelas encontradas na figura 7.4 (a). Observe que a escala do eixo da LDOS também é aumentada dez vezes, assim a densidade de estados original do grafeno (não ilustrada na figura 7.5 (a)) atua como uma banda chata nesta escala. Além disso, a principal diferença entre as figuras 7.4 (a) e 7.5 (a) é a inversão do spin majoritário nas posições das ressonâncias.

Na figura 7.5 (a), o pico em $\varepsilon \simeq -0.7 \times 10^{-5}$ é dominado por elétrons spin-up ($\rho_{\text{LDOS}}^\uparrow > \rho_{\text{LDOS}}^\downarrow$), enquanto que o correspondente pico em $\varepsilon \simeq +0.7 \times 10^{-5}$ se deve aos elétrons spin-down ($\rho_{\text{LDOS}}^\downarrow > \rho_{\text{LDOS}}^\uparrow$). Na figura 7.4 (a) temos exatamente o padrão oposto. A origem de tal comportamento está dentro do termo $-(q_{T1}^{\text{GS}})^2 \text{Im}(\tilde{\mathcal{R}}_{d_1 d_1}^\sigma) = (q_{T1}^{\text{GS}})^2 \pi \rho^{\text{GS}}(D) \text{DOS}_{11}^\sigma$.

No caso da figura 7.5 (a), os correspondentes parâmetros de Fano são descritos pelas curvas na figura 7.1 (b), onde $|q_{T1}^{\text{GS}}| > |q_{T2}^{\text{GS}}|$ para todo o intervalo de energia (região sombreada na figura 7.1 (b)). Assim, os picos “AA” e “BB” da figura 7.2 (a) são intensificados por $(q_{T1}^{\text{GS}})^2$ e leva as novas ressonâncias “LL.AA” e “RR.BB” na figura 7.5 (a).

A figura 7.5 (b) nos mostra que não é apenas o efeito do filtro que tem seu spin majoritário invertido, mas também a interferência Fano que surge a partir de $\Sigma_\sigma \rho_{1221}^\sigma$

dados pela equação (4.57), já que agora, o termo misto (curva cinza pontilhada) é formado por um par de ressonâncias, que é o padrão oposto quando comparado ao encontrado nas figuras 7.3 (b) e 7.4 (b). Isso significa que a interferência destrutiva é substituída por uma construtiva. Como resultado, o termo misto (curva cinza pontilhada) contribui para o termo direto (curva cinza tracejada) levando a LDOS total, que é representada pela curva preta sólida. Novamente, utilizamos uma seta ao lado de cada pico para indicar o spin majoritário, up ou down. Em síntese, a quebra da degenerescência de spin no dispositivo “hospedeiro+impurezas” não é estabelecido pelo efeito Zeeman $\Delta_1 = -\Delta_2$, mas sim pelas razões assimétricas nos parâmetros de Fano ($t_{d1}/t_c \neq t_{d2}/t_c$). Neste trabalho, propomos a interferência Fano como mecanismo para filtrar spins no grafeno. Adicionalmente, este filtro de spins com duas impurezas apresenta um comportamento oposto daquele com um único adatom [6], em que a polarização de spin do sistema é destruída pela proximidade da ponta do STM.

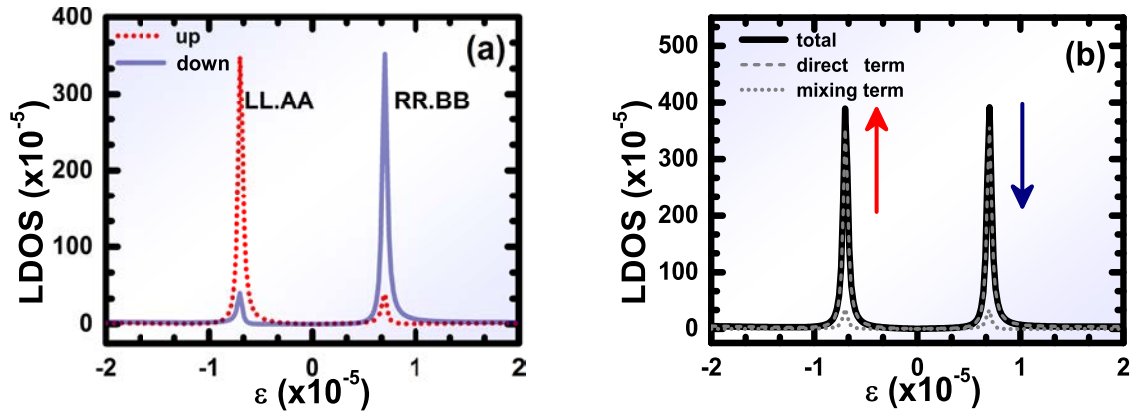


Figura 7.5: Limite assimétrico dos parâmetros de Fano: $t_{d1}/t_c = 10 \times 10^{-5}$ e $t_{d2}/t_c = 0.5 \times 10^{-5}$. (a) No limite assimétrico, $\rho_{\text{LDOS}}^\sigma$ torna-se dependente de spin, que está evidente pelos picos com diferentes amplitudes para spin up (curva vermelha pontilhada) e spin down (curva azul sólida). (b) A LDOS total (curva preta sólida) e as contribuições dos termos direto (curva cinza tracejada) e misto (curva cinza pontilhada). As setas indicam o spin majoritário correspondente a ressonância.

O grau de polarização de spin para o transporte através do sistema considerado, dado pela equação (4.59), em função da energia ε está ilustrado na figura 7.6. Nesta figura analisamos os casos $t_{d1}/t_c = 1 \times 10^{-5}$ (curva preta sólida) e $t_{d1}/t_c = 10 \times 10^{-5}$ (curva vermelha pontilhada). Na primeira situação, para valores de energia abaixo e próximas ao nível de Fermi, encontramos valores de polarização positivos ($\mathcal{G}^\uparrow > \mathcal{G}^\downarrow$) e negativos ($\mathcal{G}^\downarrow > \mathcal{G}^\uparrow$), enquanto que acima do nível de Fermi, a polarização é sempre

positiva. Entretanto, seu valor nunca ultrapassa $|0.5|$. No caso em que aproximamos a ponta do STM ao hospedeiro, isto é, $t_{d1}/t_c = 10 \times 10^{-5}$, o padrão de polarização observado para $t_{d1}/t_c = 1 \times 10^{-5}$ é invertido. Além disso, ela atinge seu valor máximo $+1$ em $\varepsilon \simeq -0.5 \times 10^{-5}$ e se aproxima de -1 para $\varepsilon \simeq +0.8 \times 10^{-5}$ (veja as setas horizontais na figura).

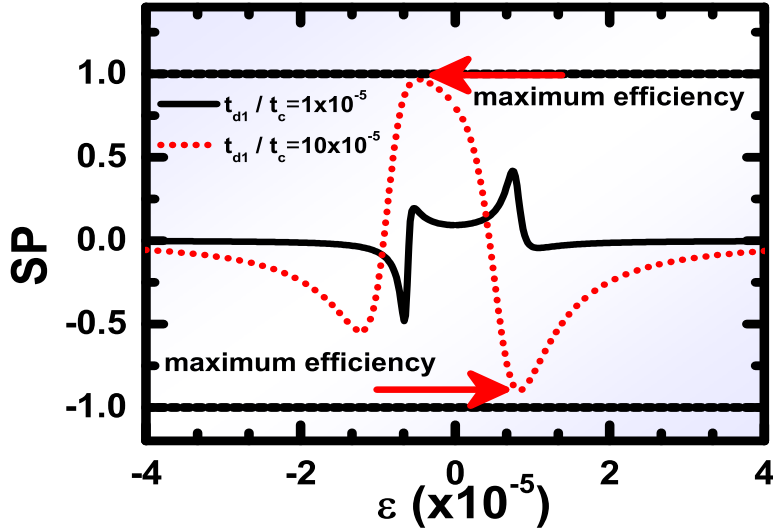


Figura 7.6: Polarização de transporte em função da energia ε . $t_{d1}/t_c = 1 \times 10^{-5}$ para a curva preta sólida. $t_{d1}/t_c = 10 \times 10^{-5}$ para a curva vermelha pontilhada. Aumentando o valor de t_{d1}/t_c para 10×10^{-5} é possível obter dois pontos em que a eficiência atinge um valor máximo. Em particular, para $\varepsilon \simeq -0.5 \times 10^{-5}$ a eficiência é 100%, que leva a uma corrente completamente polarizada através do sistema.

7.3 Sistema com o 2DEG

Nesta seção, analisamos o sistema em que o 2DEG é o hospedeiro, por isso, os portadores de carga neste sistema apresentam uma relação de dispersão quadrática padrão. Para tal situação, empregamos a equação (4.58) para a LDOS, levando em conta as equações (4.9), (5.56), (5.57), (6.6), (6.10) e (6.11).

A figura 7.7 nos revela, que mesmo no limite assimétrico, em que $t_{d1}/t_c = 1 \times 10^{-5}$ e $t_{d2}/t_c = 0.5 \times 10^{-5}$, não há uma dependência de spin no perfil de Fano da LDOS. Tal característica pode ser visualizada pelas curvas vermelha pontilhada e azul sólida, que são caracterizadas por antiressonâncias degeneradas para spin up e down, respectivamente. Estas antiressonâncias são previsíveis devido a equação

(6.10) para o parâmetro de Fano, já que $|q_{Tj}^{2\text{DEG}}| \rightarrow 0$ para $\varepsilon \rightarrow 0$ (veja a forma das curvas cinza e azul no gráfico inserido na figura 7.7, para $t_{d1}/t_c = 1 \times 10^{-5}$ e $t_{d2}/t_c = 0.5 \times 10^{-5}$, respectivamente). É válido mencionar que para o 2DEG, diferente do sistema com o grafeno, não há intervalo de ε em que $|q_{T2}^{2\text{DEG}}| > |q_{T1}^{2\text{DEG}}|$ para $t_{d1}/t_c > t_{d2}/t_c$. Como resultado, o sistema com o 2DEG não opera como filtro de spins. Tal comportamento, se deve ao fato de o campo magnético \vec{B} aplicado as impurezas não ser suficiente para resolver a dependência de spin do sistema, já que, para este efeito ocorrer, a energia Zeeman fornecida por \vec{B} deve ser da ordem do parâmetro de Anderson Γ , logo

$$\Delta_j \sim \Gamma \quad (7.1)$$

assim temos

$$\mu_B |\vec{B}| \sim \pi v_0^2 \rho_0 \quad (7.2)$$

onde μ_B é o magneton de Bohr, que vale $\mu_B = 5,789 \times 10^{-5} eV.T^{-1}$. Como ρ_0 para o 2DEG é uma constante (veja equação (4.9)), podemos perceber que a relação acima nos conduz a um campo magnético com intensidade da ordem de $10^5 T$, o que nos leva a concluir que o sistema com o 2DEG como hospedeiro é inviável para a realização de um filtro de spins.

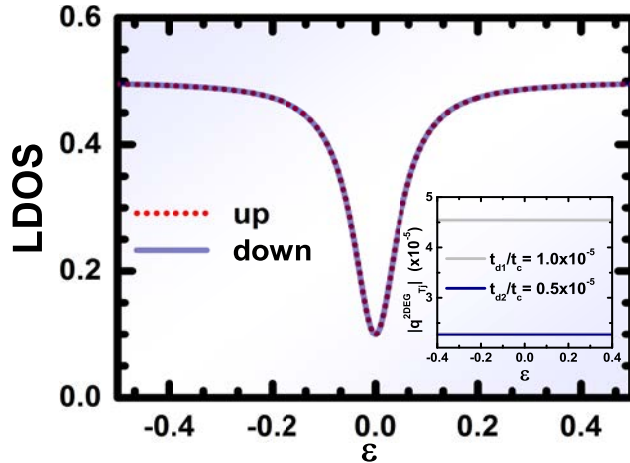


Figura 7.7: Limite assimétrico dos parâmetros de Fano: $t_{d1}/t_c = 1 \times 10^{-5}$ e $t_{d2}/t_c = 0.5 \times 10^{-5}$. A $\rho_{\text{LDOS}}^{\sigma}$ é apresentada em função da energia ε para o 2DEG. A LDOS total não depende de spin, em oposição ao observado para o grafeno. Diferente do grafeno, no 2DEG sempre temos $|q_{T1}^{2\text{DEG}}| > |q_{T2}^{2\text{DEG}}|$ para $t_{d1}/t_c > t_{d2}/t_c$.

8 Conclusões

Neste trabalho, propusemos um filtro de spins relativístico, que consiste em um arranjo STM com um plano de grafeno hospedando duas impurezas lateralmente acopladas. O mecanismo pelo qual o STM seleciona o spin majoritário é baseado na interferência quântica Fano. Uma característica particular, fornecida por este sistema, é a possibilidade de escolher qual spin filtrar pelo deslocamento vertical entre a ponta do STM e o adatom. Em condições particulares, uma corrente completamente polarizada pode ser gerada no sistema proposto, o que lhe torna atrativo para possíveis aplicações no emergente campo da spintrônica.

É válido mencionar que a segunda impureza desempenha um importante papel nas propriedades de transporte apesar do fraco acoplamento com a ponta do STM. De fato, na figura 7.1 há regiões em que a condição $|q_{T2}^{GS}| > |q_{T1}^{GS}|$ é verificada mesmo com $t_{d1}/t_c > t_{d2}/t_c$. Este é um surpreendente resultado de interferência quântica e ilustra mais uma das fantásticas propriedades quânticas de estruturas baseadas no grafeno. Estes resultados são contrários aos do sistema com o 2DEG, onde o parâmetro de Fano apresenta sempre o mesmo padrão: $|q_{T1}^{2DEG}| > |q_{T2}^{2DEG}|$ para $t_{d1}/t_c > t_{d2}/t_c$.

Referências Bibliográficas

- [1] K. S. Novoselov, *Rev. Mod. Phys.* **83**, 837 (2011).
- [2] S. Das Sarma, Shaffique Adam, E. H. Hwang, and Enrico Rossi, *Rev. Mod. Phys.* **83**, 407 (2011).
- [3] N. M. R. Peres, *Rev. Mod. Phys.* **82**, 2673 (2010).
- [4] A. H. Castro Neto, F. Guinea, N. M. R. Peres, K. S. Novoselov, and A. K. Geim, *Rev. Mod. Phys.* **81**, 109 (2009).
- [5] B. Uchoa, V. N. Kotov, N. M. R. Peres, and A. H. Castro Neto, *Phys. Rev. Lett.* **101**, 026805 (2008).
- [6] B. Uchoa, L. Yang, S.-W. Tsai, N. M. R. Peres, and A. H. Castro Neto, *Phys. Rev. Lett.* **103**, 206804 (2009).
- [7] Z. G. Zhu, and J. Berakdar, *Phys. Rev. B* **84**, 165105 (2011).
- [8] M. P. Lima, A. J. R. da Silva, and A. Fazzio, *Phys. Rev. B* **84**, 245411 (2009).
- [9] V. W. Brar, R. Decker, H. M. Solowan, Y. Wang, L. Maserati, K. T. Chan, H. Lee, Ç. O. Girit, A. Zettl, S. G. Louie, M. L. Cohen, and M. F. Crommie, *Nat. Phys.* **7**, 43 (2011).
- [10] A. Saffarzadeh, and G. Kirczenow, *Phys. Rev. B* **85**, 245429 (2012).
- [11] F. Hiebel, P. Mallet, J. Y. Veullen, and L. Magaud, *Phys. Rev. B* **86**, 205421 (2012).
- [12] P. S. Cornaglia, G. Usaj, and C. A. Balseiro, *Phys. Rev. Lett.* **102**, 046801 (2009).

- [13] T. Eelbo, M. Wasniowska, M. Gyamfi, S. Forti, U. Starke, and R. Wiesendanger, *Phys. Rev. B* **87**, 205443 (2013).
- [14] T. Eelbo, M. Wasniowska, P. Thakur, M. Gyamfi, B. Sachs, T. O. Wehling, S. Forti, U. Starke, C. Tieg, A. I. Lichtenstein, and R. Wiesendanger, *Phys. Rev. Lett.* **110**, 136804 (2013).
- [15] T. P. Hardcastle, C. R. Seabourne, R. Zan, R. M. D. Brydson, U. Bangert, Q. M. Ramasse, K. S. Novoselov, and A. J. Scott, *Phys. Rev. B* **87**, 195430 (2013).
- [16] Y. Virgus, W. Purwanto, H. Krakauer, and S. Zhang, *Phys. Rev. B* **86**, 241406 (2013).
- [17] A. N. Rudenko, F. J. Keil, M. I. Katsnelson, and A. I. Lichtenstein, *Phys. Rev. B* **86**, 075422 (2012).
- [18] K.T. Chan, J.B. Neaton, and M.L. Cohen, *Phys. Rev. B* **77**, 235430 (2008).
- [19] Bing Huang, Jaejun Yu, and Su-Huai Wei, *Phys. Rev. B* **84**, 075415 (2011).
- [20] X. Hong, S.-H. Cheng, C. Herding, and J. Zhu, *Phys. Rev. B* **83**, 085410 (2011).
- [21] P. O. Lehtinen, A. S. Foster, A. Ayuela, A. Krasheninnikov, K. Nordlund, and R. M. Nieminen, *Phys. Rev. Lett.* **91**, 017202 (2003).
- [22] J.H. Chen, C. Jang, S. Adam, M.S. Fuhrer, E.D. Williams, and M. Ishigami, *Nature Phys.* **4**, 377 (2008).
- [23] K. Pi, K. M. McCreary, W. Bao, W. Han, Y. F. Chiang, Y. Li, S.-W. Tsai, C. N. Lau, and R. K. Kawakami, *Phys.Rev.B* **80**, 075406 (2009).
- [24] M. Alemani, A. Barfuss, B. Geng, C. Girit, P. Reisenauer, M. F. Crommie, F. Wang, A. Zettl, and F. Hellman, *Phys. Rev. B* **86**, 075433 (2012).
- [25] F. Schedin, A. Geim, S. Morozov, E. Hill, P. Blake, M. Katsnelson, and K. Novoselov, *Nature Mater.* **6**, 652 (2007).

-
- [26] T.O. Wehling, K.S. Novoselov, S.V. Morozov, E.E. Vdovin, M.I. Katsnelson, A. K. Geim, and A. I. Lichtenstein, *Nano Lett.* **8**, 173 (2008).
- [27] M. Gyamfi, T. Eelbo, M. Wasniowska, T. O. Wehling, S. Forti, U. Starke, A. I. Lichtenstein, M.I. Katsnelson, and R. Wiesendanger, *Phys. Rev. B* **85**, 161406 (2012).
- [28] M. Gyamfi, T. Eelbo, M. Wasniowska, and R. Wiesendanger, *Phys. Rev. B* **84**, 113403 (2011).
- [29] J. Tersoff, and D. R. Hamann, *Phys. Rev. Lett.* **50**, 1998 (1983).
- [30] J. Tersoff, and D. R. Hamann, *Phys. Rev. B* **31**, 805 (1985).
- [31] U. Fano, *Phys. Rev.* **124**, 1866 (1961).
- [32] A. E. Miroshnichenko, S. Flach, and Y. S. Kivshar, *Rev. Mod. Phys.* **82**, 2257 (2010).
- [33] A. C. Hewson, *The Kondo Problem to Heavy Fermions*, (Cambridge University Press, Cambridge, England 1993).
- [34] H. C. Manoharan, C. P. Lutz, and D. M. Eigler, *Nature* **403**, 512 (2000).
- [35] V. Madhavan, W. Chen, T. Jamneala, and F. Crommie, *Phys. Rev. B* **64**, 165412 (2001).
- [36] N. Knorr, M. A. Schneider, L. Diekhöner, P. Wahl and K. Kern, *Phys. Rev. Lett.* **88**, 096804 (2002).
- [37] A. F. Otte, M. Ternes, K. V. Bergmann, S. Loth, H. Brune, C. P. Lutz, C. F. Hirjibehedin, and A. J. Heinrich, *Nature Physics* **4**, 847 (2008).
- [38] M. Ternes, A. J. Heinrich and W. D. Schneider, *J. Phys.: Condens. Matter* **21**, 053001 (2009).
- [39] A. C. Seridonio, F. S. Orahcio, F. M. Souza, and M. S. Figueira, *Phys. Rev. B* **85**, 165109 (2012).
- [40] S. L. Kawahara, J. Lagoute, C. Chacon, Y. Girard, J. Klein and S. Rousset, *Phys. Rev. B* **82** 020406R (2010).

- [41] A. C. Seridonio, F. M. Souza, and I. A. Shelykh, *J. Phys.: Condens. Matter* **21**, 095003 (2009).
- [42] A. C. Seridonio, F. M. Souza, J. Del Nero, and I. A. Shelykh, *Physica E* **41**, 1611 (2009).
- [43] P. H. Penteado, F. M. Souza, A. C. Seridonio, E. Vernek, and J. C. Egues, *Phys. Rev. B* **84**, 125439, (2011).
- [44] N. Néel, J. Kröger, and R. Berndt, *Phys. Rev. B* **82**, 233401 (2010).
- [45] Y. Qi, J. X. Zhu, S. Zhang, and C. S. Ting, *Phys. Rev. B* **78** 045305 (2008).
- [46] M. Sindel, L. Borda, J. Martinek, R. Bulla, J. König, G. Schön, S. Maekawa, and J. von Delft, *Phys. Rev. B* **76**, 045321 (2007).
- [47] K. Hamaya, M. Kitabatake, K. Shibata, M. Jung, M. Kawamura, K. Hirakawa, T. Machida, and T. Taniyama, *Appl. Phys. Lett.* **91**, 232105 (2007).
- [48] K. Hamaya, M. Kitabatake, K. Shibata, M. Jung, M. Kawamura, S. Ishida, T. Taniyama, K. Hirakawa, Y. Arakawa, and T. Machida, *Phys. Rev. B* **77**, 081302(R) (2008).
- [49] M. R. Calvo, J. F. Rossier, J.J. Palacios, D. Jacob, D. Natelson, and C. Untiedt, *Nature* **458**, 1150 (2009).
- [50] J. Hauptmann, J. Paaske, and P. Lindelof, *Nature Phys.* **4**, 373 (2008).
- [51] I. Weymann, and L. Borda, *Phys. Rev. B* **81**, 115445 (2010).
- [52] I. Weymann, *Phys. Rev. B* **83**, 113306 (2011).
- [53] M. Misiorny, I. Weymann and J. Barnaś, *Phys. Rev. Lett.* **106**, 126602 (2011).
- [54] M. Gaass, A. K. Hütel, K. Kang, I. Weymann, J. von Delft, and Ch. Strunk, *Phys. Rev. Lett.* **107**, 176808 (2011).
- [55] M. Misiorny, I. Weymann, and J. Barnaś, *Phys. Rev. B* **84**, 035445 (2011).

- [56] C. A. Büsser, A. E. Feiguin, and G. A. Martins, *Phys. Rev. B* **85**, 241310(R) (2012).
- [57] E. Vernek, C. A. Büsser, E. V. Anda, A. E. Feiguin, and G. B. Martins, **arXiv: 1308.4746v1** [cond-mat.str-el] (2013).
- [58] M. E. Torio, K. Hallberg, S. Flach, A. E. Miroshnichenko, and M. Titov, *Eur. Phys. J. B* **37**, 399 (2004).
- [59] P. W. Anderson, *Phys. Rev.* **124**, 41 (1961).
- [60] D. Goldhaber-Gordon, H. Shtrikman, D. Mahalu, D. Abusch-Magder, U. Meirav, and M. A. Kastner, *Nature* **391**, 156 (1998).
- [61] S. M. Cronenwett, T. H. Oosterkamp, and L. P. Kouwenhoven, *Science* **281**, 540 (1998).
- [62] H. Haug and A. P. Jauho, *Quantum Kinetics in Transport and Optics of Semiconductors*, Springer series in Solid-State Sciences 123 (Springer, New York, 1996).
- [63] Novoselov, K. S., A. K. Geim, S. V. Morozov, D. Jiang, Y. Zhang, S. V. Dubonos, I. V. Gregorieva, and A. A. Firsov, *Science* 306, 666 (2004).
- [64] M. Plihal and J. W. Gadzuk, *Phys. Rev. B* **63**, 85404 (2001).
- [65] C.-Y. Lin, A. H. Castro Neto, and B. A. Jones, *Phys. Rev. Lett.* **97**, 156102 (2006).

Graphene sheet versus two-dimensional electron gas: A relativistic Fano spin filter via STM and AFM tips

A. C. Seridonio,^{1,2} E. C. Siqueira,² F. M. Souza,³ R. S. Machado,² S. S. Lyra,² and I. A. Shelykh^{4,5}

¹*Instituto de Geociências e Ciências Exatas–IGCE, Departamento de Física, Universidade Estadual Paulista, 13506-970, Rio Claro, São Paulo, Brazil*

²*Departamento de Física e Química, Universidade Estadual Paulista, 15385-000, Ilha Solteira, São Paulo, Brazil*

³*Instituto de Física, Universidade Federal de Uberlândia, 38400-902, Uberlândia, Minas Gerais, Brazil*

⁴*Division of Physics and Applied Physics, Nanyang Technological University, Singapore 637371, Singapore*

⁵*Science Institute, University of Iceland, Dunhagi-3, IS-107, Reykjavik, Iceland*

(Received 13 August 2013; revised manuscript received 18 October 2013; published 12 November 2013)

We explore theoretically the density of states (LDOS) probed by a scanning tunneling microscope (STM) tip of two-dimensional systems hosting an adatom and a subsurface impurity, both capacitively coupled to atomic force microscope (AFM) tips and traversed by antiparallel magnetic fields. Two kinds of setups are analyzed, a monolayer of graphene and a two-dimensional electron gas (2DEG). The AFM tips set the impurity levels at the Fermi energy, where two contrasting behaviors emerge: The Fano factor for the graphene diverges, while in the 2DEG it approaches zero. As result, the spin degeneracy of the LDOS is lifted exclusively in the graphene system, in particular, for the asymmetric regime of Fano interference. The aftermath of this limit is a counterintuitive phenomenon, which consists of a dominant Fano factor due to the subsurface impurity even with a stronger STM-adatom coupling. Thus we find a full polarized conductance, achievable just by displacing vertically the position of the STM tip. Our work proposes the Fano effect as the mechanism to filter spins in graphene. This feature arises from the massless Dirac electrons within the band structure and allows us to employ the graphene host as a relativistic Fano spin filter.

DOI: [10.1103/PhysRevB.88.195122](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.88.195122)

PACS number(s): 07.79.Cz, 72.80.Vp, 05.60.Gg, 72.25.–b

I. INTRODUCTION

Graphene is a two-dimensional layer of atoms organized in a honeycomb lattice. Its peculiar band structure, consisting of two Dirac cones placed at the corners of the Brillouin zone and characterized by a massless relativistic dispersion relation, provides the opportunity for scientists to explore relativistic phenomena in the domain of condensed matter physics. In the past decade graphene was in focus of the physical community, both theoretically and experimentally. In particular, transport properties of graphene and other carbon-based nanostructures attracted the vivid interest of researchers.^{1–12}

Recent experimental^{13,14} and theoretical^{15–18} studies reveal the possibility of the effective absorption of the individual magnetic impurities by single graphene sheets. The presence of such impurities (adatoms) strongly modifies the magnetic^{19–21} and transport properties of graphene^{22–24} which can be used for a variety of technological applications including chemical sensing.^{25,26} The convenient experimental techniques for the investigation of the properties of individual adatoms is provided by a scanning tunneling microscope (STM).^{27,28} The latter is made by a metallic tip that probes, for low enough temperatures, the local density of states (LDOS) of a sample by measuring the differential conductance.^{29,30} In this scenario, the STM of impurities adsorbed on graphene reveals the scattering of electrons in a relativistic environment.

The LDOS of metallic systems coupled to impurities displays Fano profiles^{31,32} resulting from the quantum interference between competing channels in the electron transport. Such an effect arises from the interplay between the paths of itinerant electrons that travel from the tip directly to the conduction band of the host and those that tunnel via impurity.

The total Fano factor, established by the superposition of these electron paths, defines the shape of the profiles of the differential conductance.

In the past decade particular attention has been devoted to the Fano effect in regular metals with magnetic adatoms in the Kondo limit.³³ In this situation, the description of the host as a two-dimensional electron gas (2DEG) has been successfully verified.^{34–38}

Additionally, in the emerging field of spintronics, the presence of spin-polarized hosts gives rise to interesting new features.^{39–55} For these cases, the splitting of the Kondo peak in the conductance characterizes the fingerprint of itinerant magnetism in the host.^{39,40} A spin-polarized tip and a nonmagnetic host also lead to a spin-dependent STM setup. Particularly, the aforementioned system behaves either as a spin filter in the Kondo regime or as a spin diode away from it.^{41–43} Moreover, a Fano spin filter can in principle be realized even in the absence of ferromagnetism^{56,57} and the Kondo effect. This can be achieved in the side-coupled geometry of a quantum wire hybridized with a quantum dot (QD) where spin degeneracy is lifted by the external magnetic field applied at the QD region.⁵⁸

The properties of individual magnetic adatoms hosted by graphene were previously investigated theoretically by using the single-impurity Anderson Hamiltonian,⁵⁹ both in the regime of high temperatures $T \gg T_K$ (the Kondo temperature) when the Hartree-Fock approach can be used^{5,6} and for $T \ll T_K$ when Kondo correlations become important. In the latter case, by changing the adatom level in the vicinity of the Fermi energy, it has been predicted that the Kondo peak arises in a narrower energy range than in normal metals.⁷ This is due to the difference in the dispersion of the carriers in

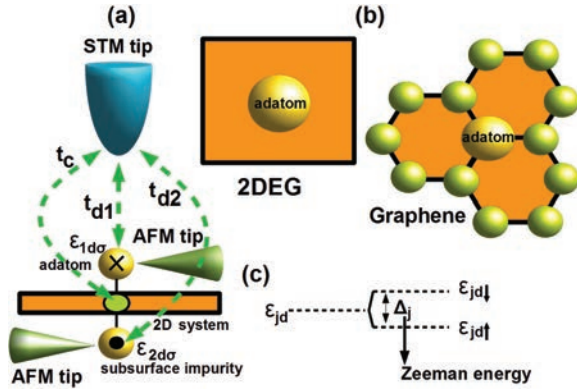


FIG. 1. (Color online) (a) A schematic diagram of the system considered in this paper. An STM tip is coupled to the atom adsorbed (adatom) in a 2D host which may be a 2D electron gas (2DEG) or a graphene sheet. A subsurface impurity is also considered which lies beneath the 2D system. The AFM tips allow us to control the energy levels of the impurities which are under the presence of antiparallel magnetic fields. The cross and dot at each impurity indicate the orientation of the magnetic field. (b) The top views of the setups considered: a 2DEG and a graphene sheet, respectively. (c) The Zeeman splitting caused by the magnetic field in both impurities.

the two systems: While the 2DEG is described by a parabolic dispersion, the honeycomb lattice of graphene leads to a linear dispersion relation near the Fermi level.

In the current paper we compare further the manifestations of spin-related phenomena in normal metals and graphene in the geometry of the two side-coupled impurities traversed by antiparallel magnetic fields [Figs. 1(a) and 1(b)]. These fields introduce a Zeeman splitting of the impurity levels as depicted in Fig. 1(c). Additionally, two atomic force microscope (AFM) tips are capacitively coupled to the impurities in order to set their energies at the host Fermi energy.⁸ These tips play the role of metallic gates usually employed to tune the levels of QDs embedded in nanostructures.^{60,61}

The quantum interference between the alternative paths taken by the electrons rules the transport through the system and leads to the typical Fano shape of the profiles of the differential conductance of the system. They can be characterized in terms of Fano parameters which allow us to determine the relative impact of each path into the global response probed by the STM tip. The Fano parameters are dependent on the properties of the host and demonstrate opposite behavior in graphene and normal metals. In the former case, in the vicinity of the host Fermi energy, the Fano factor diverges, while in the latter case it approaches to zero. In order to explore such contrasting features, in our further consideration we set the levels of the impurities at the Fermi energy. As it will be shown in this paper, the lifting of the spin degeneracy of the LDOS is only feasible for the graphene system, in particular, in the asymmetric limit of Fano parameters. In this regime, a counterintuitive phenomenon is revealed, which is due to the Fano factor of the subsurface impurity that dominates the interference even with a stronger STM-adatom coupling. We find that the majority spin component of the LDOS can be tuned by displacing vertically the STM tip towards (or away from) the host. We also demonstrate that there is an STM tip

position where the conductance becomes full polarized. The graphene host thus allows us to emulate an ideal relativistic Fano spin filter on massless Dirac fermions.

In order to model the system illustrated in Fig. 1, an approach based on the two-impurity Anderson Hamiltonian and going beyond the Hartree-Fock approximation and valid away from the Kondo regime was developed. We consider both cases of 2DEG and a graphene monolayer. In the latter system, we follow the approach proposed in Ref. 7, where an impurity is adsorbed above a single site of the host. Additionally, we take into account a subsurface impurity, situated opposite to the adatom. By using an equation-of-motion technique for the Green's functions we derive a spin-resolved formula for the LDOS, characterized by Fano interference parameters.

The paper is organized as follows. In Sec. II we present the theoretical model of metallic surfaces with two impurities and derive the expression for spin-dependent LDOS for the setups shown in Fig. 1. The decoupling scheme Hubbard I⁶² for the calculation of the Green's functions is presented in Sec. III. In Sec. IV we derive the expressions of the noninteracting self-energies of the impurities as well as the Fano parameters for the graphene sheet and the 2DEG, respectively. The results of the calculations are presented and discussed in Sec. V. Conclusions are summarized in Sec. VI.

II. THEORETICAL MODEL

A. Hamiltonian

In order to probe the LDOS of metallic surfaces, we consider an STM tip weakly connected to hosts hybridized with a pair of side-coupled impurities as outlined in Fig. 1. The systems we investigate are described according to the Hamiltonian

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}^{\text{2D}} + \mathcal{H}_{\text{tip}} + \mathcal{H}_{\text{tun}}. \quad (1)$$

The first term represents the Anderson model⁷ given by

$$\begin{aligned} \mathcal{H}^{\text{2D}} = & \sum_{s\sigma} \int dk \epsilon_k c_{sk\sigma}^\dagger c_{sk\sigma} + \sum_{j\sigma} \epsilon_{jd\sigma} d_{j\sigma}^\dagger d_{j\sigma} \\ & + \sum_j \mathcal{U}_j n_{j\uparrow} n_{j\downarrow} + \sum_{j\sigma} \int dk \mathcal{V}_{jk} (c_{sk\sigma}^\dagger d_{j\sigma} + \text{H.c.}). \end{aligned} \quad (2)$$

The surface electrons forming the hosts are described by the operators $c_{sk\sigma}^\dagger$ ($c_{sk\sigma}$) for the creation (annihilation) of an electron in a quantum state labeled by the wave number k , spin σ , and in the case of the graphene, an additional index s standing for the valley index.⁴ For the 2DEG, the quantum number s does not exist. The dispersion relation for the graphene electrons is

$$\epsilon_k = \hbar v_F k, \quad (3)$$

with \hbar as the Planck constant divided by 2π and v_F as the Fermi velocity. For the impurities, $d_{j\sigma}^\dagger$ ($d_{j\sigma}$) creates (annihilates) an electron with spin σ in the state $\epsilon_{jd\sigma}$, with the index $j = 1, 2$ corresponding to the upper and lower impurities.

The magnetic fields split the energies $\varepsilon_{jd\sigma}$,

$$\varepsilon_{jd\sigma} = \varepsilon_{jd} - \sigma \frac{\Delta_j}{2}, \quad (4)$$

where Δ_j is the Zeeman energy. Here we employ antiparallel magnetic fields established by the condition $\Delta_1 = -\Delta_2$.

The third term in Eq. (2) accounts for the on-site Coulomb interaction U_j , with $n_{j\sigma} = d_{j\sigma}^\dagger d_{j\sigma}$. Finally, the last two terms mix the host continuum of states of the conduction band and the levels $\varepsilon_{jd\sigma}$, where H.c. stands for the Hermitian conjugate of the first term. This hybridization occurs at the impurity sites via the coupling

$$\mathcal{V}_{jk} = \frac{v_0}{2\pi} \sqrt{\frac{\pi\Omega_0}{\mathcal{N}}} \sqrt{|k|}, \quad (5)$$

where \mathcal{N} is the number of conduction states, and the parameters v_0 and Ω_0 denote the host-impurity hybridization in energy dimensions and the unit cell area, respectively.

The densities of states of the hosts per spin are different for graphene and 2DEG and are given by the expressions

$$\rho_0 = \rho^{\text{GS}}(\varepsilon) = \sum_s \frac{\Omega_0}{2\pi} \frac{|\varepsilon|}{(\hbar v_F)^2} = \frac{|\varepsilon|}{D^2} \quad (6)$$

and

$$\rho_0 = \rho^{2\text{DEG}}(\varepsilon) = \frac{\Omega_0}{2\pi} \frac{D}{(\hbar v_F)^2} = \frac{1}{2D}, \quad (7)$$

where $2D$ denotes the band width.

The second part of Eq. (1) is described by the Hamiltonian

$$\mathcal{H}_{\text{tip}} = \sum_{\vec{q}\sigma} \varepsilon_{\vec{q}} b_{\vec{q}\sigma}^\dagger b_{\vec{q}\sigma}, \quad (8)$$

which corresponds to free electrons in the STM tip with energy $\varepsilon_{\vec{q}}$ ruled by fermionic operators $b_{\vec{q}\sigma}^\dagger$ and $b_{\vec{q}\sigma}$.

To perform the coupling between Eqs. (2) and (8), we have to define the tunneling Hamiltonian, here expressed in two distinct forms,

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{\text{tun}} &= t_c \sum_{\sigma} \psi_{\text{tip},\sigma}^\dagger \psi_{\text{host},\sigma} + \sum_{j\sigma} t_{dj} \psi_{\text{tip},\sigma}^\dagger d_{j\sigma} + \text{H.c.} \\ &= t_c \sum_{\sigma} \psi_{\text{tip},\sigma}^\dagger \psi_{\sigma} + \text{H.c.}, \end{aligned} \quad (9)$$

where

$$\psi_{\text{tip},\sigma} = \frac{1}{\sqrt{\mathcal{N}}} \sum_{\vec{q}} b_{\vec{q}\sigma} \quad (10)$$

is the fermionic operator for the edge site of the tip,

$$\psi_{\text{host},\sigma} = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{\pi\Omega_0}{\mathcal{N}}} \sum_s \int \sqrt{|k|} dk c_{s k \sigma} \quad (11)$$

for the site of the host side-coupled to the impurities and

$$\psi_{\sigma} = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{\pi\Omega_0}{\mathcal{N}}} \sum_s \int \sqrt{|k|} dk c_{s k \sigma} + (\pi\rho_0 v_0) \sum_j q_j^e d_{j\sigma} \quad (12)$$

represents the operator that accounts Fano interference via the extrinsic Fano factor defined by

$$q_j^e = (\pi\rho_0 v_0)^{-1} \left(\frac{t_{dj}}{t_c} \right). \quad (13)$$

Notice that the electrons from the tip are able to tunnel directly to three different sites with different hopping terms denoted as: tunneling tip-host (t_c), tunneling tip-adatom (t_{d1}) and tip-subsurface impurity (t_{d2}). It is worth mentioning that according to Refs. 63 and 64, these amplitudes are overlap integrals that mixture the STM tip with the ‘‘host + impurities’’ system. Thus by changing such parameters, we mimic the vertical displacement of the STM tip.

B. LDOS for the ‘‘host + impurities’’ system in the presence of STM and AFM tips

By applying the linear response theory, in which the STM tip is considered as a probe, it is possible to show that the differential conductance per spin is determined by⁶

$$\mathcal{G}^\sigma(V) \sim \frac{e^2}{h} \pi \Gamma_c \rho_{\text{LDOS}}^\sigma(eV), \quad (14)$$

where e is the electron charge, $\Gamma_c = 4\pi t_c^2 \rho_{\text{tip}}$, t_c is the tunneling term between the STM tip and the host, ρ_{tip} is the DOS for the tip, V is the bias voltage, and $\rho_{\text{LDOS}}^\sigma$ is the spin-resolved LDOS of the ‘‘host + impurities’’ system.

To obtain the LDOS, we introduce for the operator of Eq. (12), the retarded Green’s function

$$\tilde{\mathcal{R}}_\sigma(t) = -\frac{i}{\hbar} \theta(t) \text{Tr}\{\rho_{2\text{D}}[\psi_\sigma(t), \psi_\sigma^\dagger(0)]_+\} \quad (15)$$

in the time domain, where $\theta(t)$ is the Heaviside function, $\rho_{2\text{D}}$ is the density matrix of the system described by the Hamiltonian [Eq. (2)], and $[\dots]_+$ is the anticommutator of the field operator taken in Heisenberg picture.³⁹

From Eq. (15), the spin-resolved LDOS of the host can be obtained as

$$\rho_{\text{LDOS}}^\sigma = -\frac{1}{\pi} \text{Im}(\tilde{\mathcal{R}}_\sigma), \quad (16)$$

where $\tilde{\mathcal{R}}_\sigma$ is the Fourier transform of $\mathcal{R}_\sigma(t)$. To obtain an analytical expression for the LDOS, we apply the equation-of-motion approach to Eq. (15). Substituting Eq. (12) in Eq. (15), one gets

$$\begin{aligned} \mathcal{R}_\sigma(t) &= \left(\frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{\pi\Omega_0}{\mathcal{N}}} \right)^2 \sum_{s\bar{s}} \int \sqrt{|k|} dk \sqrt{|q|} dq \mathcal{R}_{c_{s k} c_{\bar{s} q}}^\sigma \\ &+ (\pi\rho_0 v_0) \sum_{js} q_j^e \left(\frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{\pi\Omega_0}{\mathcal{N}}} \right) \int \sqrt{|k|} dk \\ &\times (\mathcal{R}_{d_j c_{s k}}^\sigma + \mathcal{R}_{c_{s k} d_j}^\sigma) + (\pi\rho_0 v_0)^2 \sum_{jl} q_j^e q_l^e \mathcal{R}_{d_j d_l}^\sigma, \end{aligned} \quad (17)$$

expressed in terms of the Green’s functions $\mathcal{R}_{c_{s k} c_{\bar{s} q}}^\sigma$, $\mathcal{R}_{d_j c_{s k}}^\sigma$, $\mathcal{R}_{c_{s k} d_j}^\sigma$, and $\mathcal{R}_{d_j d_l}^\sigma$.

First, we have to determine

$$\mathcal{R}_{c_{s k} c_{\bar{s} q}}^\sigma(t) = -\frac{i}{\hbar} \theta(t) \text{Tr}\{\rho_{2\text{D}}[c_{s k \sigma}(t), c_{\bar{s} q \sigma}^\dagger(0)]_+\} \quad (18)$$

by acting by the operator $\partial_t \equiv \frac{\partial}{\partial t}$ on Eq. (18). We find

$$\begin{aligned} \partial_t \mathcal{R}_{c_{sk}c_{sq}}^\sigma(t) &= -\frac{i}{\hbar} \delta(t) \text{Tr}\{\mathcal{Q}_{2D}[c_{sk\sigma}(t), c_{sq\sigma}^\dagger(0)]_+\} \\ &\quad - \frac{i}{\hbar} \varepsilon_k \mathcal{R}_{c_{sk}c_{sq}}^\sigma(t) - \frac{i}{\hbar} \sum_j \mathcal{V}_{jk} \mathcal{R}_{d_j c_{sq}}^\sigma(t), \end{aligned} \quad (19)$$

where we have used

$$i\hbar \partial_t c_{sk\sigma}(t) = [c_{sk\sigma}, \mathcal{H}^{2D}] = \varepsilon_k c_{sk\sigma}(t) + \sum_j \mathcal{V}_{jk} d_{j\sigma}(t). \quad (20)$$

In the energy domain, we solve Eq. (19) for $\tilde{\mathcal{R}}_{c_{sk}c_{sq}}^\sigma$ and obtain

$$\tilde{\mathcal{R}}_{c_{sk}c_{sq}}^\sigma = \frac{\delta(k-q)\delta_{s\bar{s}}}{\varepsilon^+ - \varepsilon_k} + \sum_j \frac{\mathcal{V}_{jk}}{\varepsilon^+ - \varepsilon_k} \tilde{\mathcal{R}}_{d_j c_{sq}}^\sigma, \quad (21)$$

where $\varepsilon^+ = \varepsilon + i\eta$ and $\eta \rightarrow 0^+$. Notice that we also need to calculate the mixed Green's function $\tilde{\mathcal{R}}_{d_j c_{sq}}^\sigma$. To this end, we define the advanced Green's function

$$\mathcal{A}_{d_j c_{sq}}^\sigma(t) = \frac{i}{\hbar} \theta(-t) \text{Tr}\{\mathcal{Q}_{2D}[d_{j\sigma}^\dagger(0), c_{sq\sigma}(t)]_+\}, \quad (22)$$

whose equation of motion reads

$$\begin{aligned} \partial_t \mathcal{A}_{d_j c_{sq}}^\sigma(t) &= -\frac{i}{\hbar} \delta(t) \text{Tr}\{\mathcal{Q}_{2D}[d_{j\sigma}^\dagger(0), c_{sq\sigma}(t)]_+\} \\ &\quad - \frac{i}{\hbar} \varepsilon_q \mathcal{A}_{d_j c_{sq}}^\sigma(t) - \frac{i}{\hbar} \sum_l \mathcal{V}_{lq} \mathcal{A}_{d_l d_j}^\sigma(t), \end{aligned} \quad (23)$$

where we have used once again Eq. (20), interchanging $k \leftrightarrow q$. The Fourier transform of Eq. (23) leads to

$$\varepsilon^- \tilde{\mathcal{A}}_{d_j c_{sq}}^\sigma = \varepsilon_q \tilde{\mathcal{A}}_{d_j c_{sq}}^\sigma + \sum_l \mathcal{V}_{lq} \tilde{\mathcal{A}}_{d_l d_j}^\sigma, \quad (24)$$

with $\varepsilon^- = \varepsilon - i\eta$. Applying the property $\tilde{\mathcal{R}}_{d_j c_{sq}}^\sigma = (\tilde{\mathcal{A}}_{d_j c_{sq}}^\sigma)^\dagger$ on Eq. (24), we show that

$$\varepsilon^+ \tilde{\mathcal{R}}_{d_j c_{sq}}^\sigma = \varepsilon_q \tilde{\mathcal{R}}_{d_j c_{sq}}^\sigma + \sum_l \mathcal{V}_{lq} \tilde{\mathcal{R}}_{d_l d_j}^\sigma, \quad (25)$$

$$\tilde{\mathcal{R}}_{d_j c_{sq}}^\sigma = \sum_l \frac{\mathcal{V}_{lq}}{\varepsilon^+ - \varepsilon_q} \tilde{\mathcal{R}}_{d_l d_j}^\sigma, \quad (26)$$

and analogously,

$$\tilde{\mathcal{R}}_{c_{sq} d_j}^\sigma = \sum_l \frac{\mathcal{V}_{lq}}{\varepsilon^+ - \varepsilon_q} \tilde{\mathcal{R}}_{d_l d_j}^\sigma. \quad (27)$$

Now we substitute Eq. (26) into Eq. (21) and the latter, together with Eq. (27), into Eq. (17) and determine

$$\begin{aligned} \tilde{\mathcal{R}}_\sigma &= \left(\frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{\pi \Omega_{20}}{\mathcal{N}}} \right)^2 \sum_s \int k dk \frac{1}{\varepsilon^+ - \varepsilon_k} \\ &\quad + (\pi \rho_0 v_0)^2 \sum_{jl} (q_j - i\mathcal{F}_j) \tilde{\mathcal{R}}_{d_j d_l}^\sigma (q_l - i\mathcal{F}_l) \\ &\quad + (\pi \rho_0 v_0)^2 \sum_{jl} q_j^e (q_l - i\mathcal{F}_l) (\tilde{\mathcal{R}}_{d_j d_l}^\sigma + \tilde{\mathcal{R}}_{d_l d_j}^\sigma) \\ &\quad + (\pi \rho_0 v_0)^2 \sum_{jl} q_j^e q_l^e \tilde{\mathcal{R}}_{d_j d_l}^\sigma, \end{aligned} \quad (28)$$

where

$$q_j = \frac{1}{\pi \rho_0 v_0^2} \text{Re} \Sigma_{jj} \quad (29)$$

is the Fano parameter⁶ due to the host-impurity coupling and

$$\mathcal{F}_j = -\frac{1}{\pi \rho_0 v_0^2} \text{Im} \Sigma_{jj}, \quad (30)$$

with

$$\Sigma_{l\bar{l}} = \sum_s \int dk \frac{\mathcal{V}_{lk} \mathcal{V}_{\bar{l}k}}{\varepsilon^+ - \varepsilon_k} \quad (31)$$

being the noninteracting self-energy of the impurities.⁶ From Eqs. (16) and (28), we finally derive the spin-resolved LDOS

$$\rho_{\text{LDOS}}^\sigma = \rho_{1122}^\sigma + \rho_{1221}^\sigma, \quad (32)$$

where

$$\begin{aligned} \rho_{1122}^\sigma &= \rho_0 + \rho_0 \Gamma \sum_j [(\mathcal{F}_j^2 - q_{Tj}^2) \text{Im}(\tilde{\mathcal{R}}_{d_j d_j}^\sigma) \\ &\quad + 2q_{Tj} \mathcal{F}_j \text{Re}(\tilde{\mathcal{R}}_{d_j d_j}^\sigma)] \end{aligned} \quad (33)$$

is the *direct term* of the LDOS and

$$\begin{aligned} \rho_{1221}^\sigma &= \rho_0 \Gamma \sum_{j \neq l} [(\mathcal{F}_j \mathcal{F}_l - q_{Tj} q_{Tl}) \text{Im}(\tilde{\mathcal{R}}_{d_j d_l}^\sigma) \\ &\quad + (q_{Tj} \mathcal{F}_l + q_{Tl} \mathcal{F}_j) \text{Re}(\tilde{\mathcal{R}}_{d_j d_l}^\sigma)] \end{aligned} \quad (34)$$

represents the *mixing term* that arises from the interference between the impurities, with

$$q_{Tj} = q_j + q_j^e \quad (35)$$

being the total Fano factor and $\Gamma = \pi v_0^2 \rho_0$ is the Anderson parameter.

Equation (32) is the main analytical result of this paper. It describes the spin-resolved LDOS of 2D systems with two impurities in the side-coupled geometry shown in Fig. 1. This equation shows the dependence of the LDOS on the direct and mixed Green's functions of the impurities $\tilde{\mathcal{R}}_{d_j d_j}^\sigma$ and $\tilde{\mathcal{R}}_{d_j d_l}^\sigma$, respectively, and on the total Fano parameter given by Eq. (35). We highlight that the Zeeman energy of the impurities determines the spin dependence of the LDOS and, therefore, the spin-filter behavior, in particular, only for the graphene system, as we will see.

In order to investigate the spin dependence of the LDOS as well as the spin-filter effect, we introduce the expression

$$\text{LDOS} = \frac{\rho_{\text{LDOS}}^\uparrow + \rho_{\text{LDOS}}^\downarrow}{\rho^{\text{GS}}(D)} \quad (36)$$

for the dimensionless LDOS, where we have used Eq. (6) for $\rho^{\text{GS}}(D)$ and

$$\text{SP} = \frac{\mathcal{G}^\uparrow - \mathcal{G}^\downarrow}{\mathcal{G}^\uparrow + \mathcal{G}^\downarrow} \quad (37)$$

for the transport polarization of the system settled from Eq. (14).

III. GREEN'S FUNCTIONS OF THE IMPURITIES

In the present section we calculate $\tilde{\mathcal{R}}_{d_j d_l}^\sigma$ ($j, l = 1, 2$) within the Hubbard I approximation.⁶² This approach provides reliable results away from the Kondo regime. Thus we begin by applying the equation-of-motion method on these Green's functions, which results in

$$(\varepsilon^+ - \varepsilon_{ld\sigma})\tilde{\mathcal{R}}_{d_l d_j}^\sigma = \delta_{lj} + \sum_l \Sigma_{ll} \tilde{\mathcal{R}}_{d_l d_j}^\sigma + \mathcal{U}_l \tilde{\mathcal{R}}_{d_{l\sigma} n_{d_l \bar{\sigma}}, d_{j\sigma}}. \quad (38)$$

In the equation above, $\tilde{\mathcal{R}}_{d_{l\sigma} n_{d_l \bar{\sigma}}, d_{j\sigma}}$ is a two-particle Green's function composed of four fermionic operators, obtained from the time Fourier transform of

$$\mathcal{R}_{d_{l\sigma} n_{d_l \bar{\sigma}}, d_{j\sigma}} = -\frac{i}{\hbar} \theta(t) \text{Tr}\{Q_{2D}[d_{l\sigma}(t) n_{d_l \bar{\sigma}}(t), d_{j\sigma}^\dagger(0)]_+\}, \quad (39)$$

with $n_{d_l \bar{\sigma}} = d_{l\bar{\sigma}}^\dagger d_{l\bar{\sigma}}$ and spin $\bar{\sigma}$ (opposite to σ).

In order to close the system of Green's functions in Eq. (38), we calculate the time derivative of Eq. (39) and then its time Fourier transform, which leads to

$$\begin{aligned} & (\varepsilon^+ - \varepsilon_{ld\sigma} - \mathcal{U}_l) \tilde{\mathcal{R}}_{d_{l\sigma} n_{d_l \bar{\sigma}}, d_{j\sigma}} \\ &= \delta_{lj} \langle n_{d_l \bar{\sigma}} \rangle + \sum_s \int dk \mathcal{V}_{lk} (\tilde{\mathcal{R}}_{c_{s\sigma} d_{l\bar{\sigma}}^\dagger d_{l\bar{\sigma}}, d_{j\sigma}} \\ & \quad - \tilde{\mathcal{R}}_{c_{s\bar{\sigma}}^\dagger d_{l\bar{\sigma}} d_{l\sigma}, d_{j\sigma}} + \tilde{\mathcal{R}}_{d_{l\bar{\sigma}}^\dagger c_{s\bar{\sigma}} d_{l\sigma}, d_{j\sigma}}), \end{aligned} \quad (40)$$

expressed in terms of new Green's functions of the same order of $\tilde{\mathcal{R}}_{d_{l\sigma} n_{d_l \bar{\sigma}}, d_{j\sigma}}$ and the occupation number

$$\langle n_{d_l \bar{\sigma}} \rangle = -\frac{1}{\pi} \int_{-D}^{\varepsilon_F=0} \text{Im}(\tilde{\mathcal{R}}_{d_l d_l}^{\bar{\sigma}}) d\varepsilon, \quad (41)$$

determined in accordance with Refs. 5 and 6. By employing the Hubbard I approximation, we decouple the Green's functions in the right-hand side of Eq. (40) as follows: $\tilde{\mathcal{R}}_{c_{s\bar{\sigma}}^\dagger d_{l\bar{\sigma}} d_{l\sigma}, d_{j\sigma}} \simeq \langle c_{s\bar{\sigma}}^\dagger d_{l\bar{\sigma}} \rangle \tilde{\mathcal{R}}_{d_l d_j}^\sigma$ and $\tilde{\mathcal{R}}_{d_{l\bar{\sigma}}^\dagger c_{s\bar{\sigma}} d_{l\sigma}, d_{j\sigma}} \simeq \langle c_{s\bar{\sigma}}^\dagger d_{l\bar{\sigma}} \rangle \tilde{\mathcal{R}}_{d_l d_j}^\sigma$. As a result, we find

$$\begin{aligned} & (\varepsilon^+ - \varepsilon_{ld\sigma} - \mathcal{U}_l) \tilde{\mathcal{R}}_{d_{l\sigma} n_{d_l \bar{\sigma}}, d_{j\sigma}} \\ &= \delta_{lj} \langle n_{d_l \bar{\sigma}} \rangle + \langle n_{d_l \bar{\sigma}} \rangle \left(\sum_s \int dk \mathcal{V}_{lk} \right) \times \tilde{\mathcal{R}}_{c_{s\sigma} d_{l\bar{\sigma}}^\dagger d_{l\bar{\sigma}}, d_{j\sigma}}. \end{aligned} \quad (42)$$

To close the calculation, we need to determine $\tilde{\mathcal{R}}_{c_{s\sigma} d_{l\bar{\sigma}}^\dagger d_{l\bar{\sigma}}, d_{j\sigma}}$. Once again, employing the equation-of-motion approach for $\tilde{\mathcal{R}}_{c_{s\sigma} d_{l\bar{\sigma}}^\dagger d_{l\bar{\sigma}}, d_{j\sigma}}$, we find

$$\begin{aligned} & (\varepsilon^+ - \varepsilon_k) \tilde{\mathcal{R}}_{c_{s\sigma} d_{l\bar{\sigma}}^\dagger d_{l\bar{\sigma}}, d_{j\sigma}} \\ &= \mathcal{V}_{lk} \tilde{\mathcal{R}}_{d_{l\sigma} n_{d_l \bar{\sigma}}, d_{j\sigma}} + \sum_s \int dq \mathcal{V}_{lq} \tilde{\mathcal{R}}_{c_{s\sigma} d_{l\bar{\sigma}}^\dagger c_{s\bar{\sigma}q}, d_{j\sigma}} \\ & \quad + \sum_{\bar{j} \neq l} \mathcal{V}_{\bar{j}k} \tilde{\mathcal{R}}_{d_{\bar{j}\sigma} n_{d_l \bar{\sigma}}, d_{j\sigma}} - \sum_s \int dq \mathcal{V}_{lq} \tilde{\mathcal{R}}_{c_{s\bar{\sigma}}^\dagger d_{l\bar{\sigma}} c_{s\sigma}, d_{j\sigma}}. \end{aligned} \quad (43)$$

For the sake of simplicity, we take the limit $\mathcal{U}_l \rightarrow \infty$ and continue with the Hubbard I scheme by making $\tilde{\mathcal{R}}_{c_{s\sigma} d_{l\bar{\sigma}}^\dagger c_{s\bar{\sigma}q}, d_{j\sigma}} \simeq \langle d_{l\bar{\sigma}}^\dagger c_{s\bar{\sigma}q} \rangle \tilde{\mathcal{R}}_{c_{s\sigma} d_{j\sigma}}$, $\tilde{\mathcal{R}}_{c_{s\bar{\sigma}}^\dagger d_{l\bar{\sigma}} c_{s\sigma}, d_{j\sigma}} \simeq \langle d_{l\bar{\sigma}}^\dagger c_{s\bar{\sigma}q} \rangle \tilde{\mathcal{R}}_{c_{s\sigma} d_{j\sigma}}$, and $\tilde{\mathcal{R}}_{d_{\bar{j}\sigma} n_{d_l \bar{\sigma}}, d_{j\sigma}} \simeq \langle n_{d_l \bar{\sigma}} \rangle \tilde{\mathcal{R}}_{d_j d_j}^\sigma$ in Eq. (43),

which becomes

$$\begin{aligned} & \tilde{\mathcal{R}}_{c_{s\sigma} d_{l\bar{\sigma}}^\dagger d_{l\bar{\sigma}}, d_{j\sigma}} \\ &= \frac{\mathcal{V}_{lk}}{(\varepsilon^+ - \varepsilon_k)} \tilde{\mathcal{R}}_{d_{l\sigma} n_{d_l \bar{\sigma}}, d_{j\sigma}} + \frac{\sum_{\bar{j} \neq l} \mathcal{V}_{\bar{j}k}}{(\varepsilon^+ - \varepsilon_k)} \langle n_{d_l \bar{\sigma}} \rangle \tilde{\mathcal{R}}_{d_j d_j}^\sigma. \end{aligned} \quad (44)$$

Thus by solving the system of Green's functions composed by Eqs. (38), (42), (43), and (44), we obtain

$$\tilde{\mathcal{R}}_{d_1 d_1}^\sigma = \frac{1 - \langle n_{d_1 \bar{\sigma}} \rangle}{\varepsilon - \varepsilon_{1d\sigma} - \sum_{11} - \lambda_{12}^{\bar{\sigma}} \frac{(\sum_{11})^2}{\varepsilon - \varepsilon_{2d\sigma} - \sum_{11}}}, \quad (45)$$

where $\lambda_{12}^{\bar{\sigma}} = (1 - \langle n_{d_1 \bar{\sigma}} \rangle)(1 - \langle n_{d_2 \bar{\sigma}} \rangle)$ and

$$\tilde{\mathcal{R}}_{d_2 d_1}^\sigma = (1 - \langle n_{d_2 \bar{\sigma}} \rangle) \frac{\sum_{21}}{\varepsilon - \varepsilon_{2d\sigma} - \sum_{21}} \tilde{\mathcal{R}}_{d_1 d_1}^\sigma, \quad (46)$$

with \sum_{jl} determined by Eq. (31). We point out that the Green's functions $\tilde{\mathcal{R}}_{d_2 d_2}^\sigma$ and $\tilde{\mathcal{R}}_{d_1 d_2}^\sigma$ can be found by swapping $1 \leftrightarrow 2$ in Eqs. (45) and (46). As a result, Eq. (45) and $\tilde{\mathcal{R}}_{d_2 d_2}^\sigma$ allow us to introduce

$$\text{DOS}_{jj}^\sigma = -\frac{1}{\pi \rho^{\text{GS}}(D)} \text{Im}(\tilde{\mathcal{R}}_{d_j d_j}^\sigma) \quad (47)$$

as the dimensionless DOS for the impurities, where we have applied Eq. (6) at the band edge D .

IV. NONINTERACTING SELF-ENERGIES AND FANO PARAMETERS

In this section we present the calculations of the noninteracting self-energies of Eq. (31) and the Fano parameters within Eqs. (13), (29), and (35). Equation (31) allows us to find

$$\Sigma_{l\bar{l}} = \Sigma_{l\bar{l}}^{\text{GS}} = \eta^{\text{GS}} \left(\varepsilon \ln \left| \frac{\varepsilon^2}{\varepsilon^2 - D^2} \right| - i\pi |\varepsilon| \right) \quad (48)$$

for the graphene sheet, with

$$\eta^{\text{GS}} = \frac{\Omega_0}{2\pi \mathcal{N}} \frac{v_0^2}{(\hbar v_F)^2} = \frac{v_0^2}{D^2} \quad (49)$$

and

$$\Sigma_{l\bar{l}} = \Sigma_{l\bar{l}}^{2\text{DEG}} = \eta^{2\text{DEG}} \left(D \ln \left| \frac{D + \varepsilon}{D - \varepsilon} \right| - i\pi D \right) \quad (50)$$

for the case of the 2DEG, where

$$\eta^{2\text{DEG}} = \frac{\Omega_0}{2\pi \mathcal{N}} \frac{v_0^2}{(\hbar v_F)^2} = \frac{v_0^2}{2D^2}. \quad (51)$$

Notice that for $\varepsilon \ll D$, $\text{Re}(\Sigma_{l\bar{l}}^{\text{GS}}) = \text{Re}(\Sigma_{l\bar{l}}^{2\text{DEG}}) \rightarrow 0$.

The self-energy of Eq. (48) is in accordance with the corresponding determined in Refs. 5–7. For the 2DEG, we recover the result found in Ref. 33.

From Eqs. (13), (29), (30), and (35), we determine

$$q_{Tj}^{\text{GS}} = \frac{1}{\pi} \ln \left| \frac{\varepsilon^2}{\varepsilon^2 - D^2} \right| + \left(\frac{t_{dj}}{t_c} \right) \frac{D^2}{\pi v_0} \frac{1}{|\varepsilon|} \quad (52)$$

and

$$\mathcal{F}_j^{\text{GS}} = 1 \quad (53)$$

for the graphene system, while for the 2DEG we have

$$q_{Tj}^{2\text{DEG}} = \frac{1}{\pi} \ln \left| \frac{D + \varepsilon}{D - \varepsilon} \right| + \left(\frac{t_{dj}}{t_c} \right) \frac{2D}{\pi v_0} \quad (54)$$

and

$$\mathcal{F}_j^{2\text{DEG}} = 1. \quad (55)$$

We emphasize that for $t_{dj}/t_c \ll 1$ and energies $\varepsilon \ll D$, Eqs. (52) and (54) exhibit opposite behaviors: $|q_{Tj}^{\text{GS}}| \rightarrow \infty$ and $|q_{Tj}^{2\text{DEG}}| \rightarrow 0$.

V. NUMERICAL RESULTS

The present approach is for $T \gg T_K$ and within a range of temperatures where we can safely define the Heaviside step function as the Fermi distribution in the host. This assumption was previously considered in Refs. 5 and 6. We measure the densities and energies in units of $\rho^{\text{GS}}(D)$ and $[\rho^{\text{GS}}(D)]^{-1}$, respectively, where we have used Eq. (6) at the band edge $D = 7$ eV.^{5,6} For the Zeeman splittings, we employ $\Delta_1 = -\Delta_2 = 2 \times 10^{-5}$ in Eq. (4) corresponding to a magnetic field of ≈ 2.4 T. We have also used $v_0 = 0.14$ in Eq. (5).^{5,6} The levels of the impurities are set to $\varepsilon_{1d} = \varepsilon_{2d} = 0$.

A. Graphene system

Here we analyze the graphene system by employing Eq. (36) in combination with Eqs. (6), (45), (46), (48), (52), and (53).

In Fig. 2, we present the absolute value of the Fano parameter $|q_{Tj}^{\text{GS}}|$ of Eq. (52) as a function of the energy ε . All curves exhibit a general trend in which the Fano factor tends to infinity as the energy approaches the Fermi level ($\varepsilon = 0$) and decays to a finite value as ε increases towards the band edge. By increasing the ratio t_{dj}/t_c the Fano parameter diverges more rapidly. In Fig. 2(a) the curve for $|q_{T1}^{\text{GS}}|$ (solid blue curve) becomes broader than the curve for $|q_{T2}^{\text{GS}}|$ (dotted red curve) for $|\varepsilon| \lesssim 0.2$ and keeps increasing as $\varepsilon \rightarrow 0$. This behavior becomes even more pronounced in Fig. 2(b) where the ratio t_{d1}/t_c is increased ten times while t_{d2}/t_c is kept fixed. As a result, $|q_{T1}^{\text{GS}}|$ lies above the $|q_{T2}^{\text{GS}}|$ for almost the entire range except in the borders of the scale for $|\varepsilon| \gtrsim 1.7$. The shaded regions in Fig. 2 are defined in such a way that $|q_{T2}^{\text{GS}}| < |q_{T1}^{\text{GS}}|$ while out of these regions the opposite relation is verified, i.e., $|q_{T2}^{\text{GS}}| > |q_{T1}^{\text{GS}}|$. In the last case, the resulting behavior yields a Fano interference in the LDOS dictated by the subsurface impurity, where $|q_{T2}^{\text{GS}}|$ becomes dominant. It is worth mentioning that in spite of the condition $t_{d1}/t_c > t_{d2}/t_c$ which is maintained for all curves in Fig. 2, there are regions of ε in which the opposite condition ($|q_{T2}^{\text{GS}}| > |q_{T1}^{\text{GS}}|$) is verified. This unexpected feature is a result of the interplay between the quantum interference in the double impurity system and the peculiar behavior of the graphene density of states. We point out that such a behavior is not present in the 2DEG setup, as we will verify in Sec. VB.

In Fig. 2(b), we move the STM tip closer to the host by choosing $t_{d1}/t_c = 10 \times 10^{-5}$. Within the shaded regions, the adatom gives the dominant impact to the interference and $|q_{T1}^{\text{GS}}|$ (solid blue curve) overcomes $|q_{T2}^{\text{GS}}|$ (dotted red curve). When $t_{dj}/t_c \ll 1$, the profile of the LDOS for the graphene

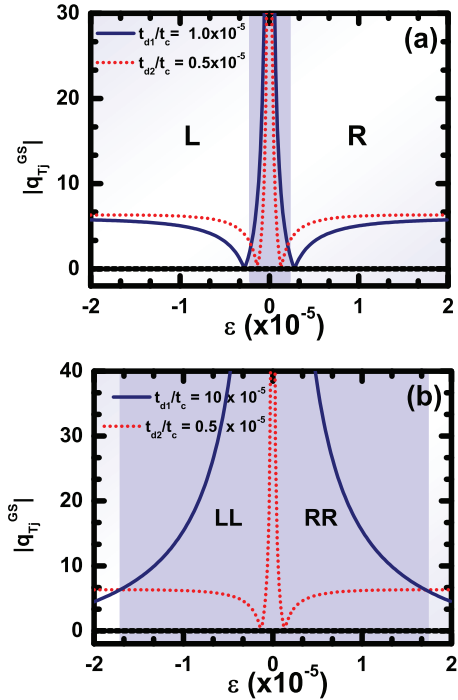


FIG. 2. (Color online) Absolute value of the Fano parameter of Eq. (52) as a function of the energy ε for $v_0 = 0.14$ and $t_{d2}/t_c = 0.5 \times 10^{-5}$. (a) $t_{d1}/t_c = 1 \times 10^{-5}$. (b) $t_{d1}/t_c = 10 \times 10^{-5}$. In these graphs we have defined a shaded region in which the condition $|q_{T2}^{\text{GS}}| < |q_{T1}^{\text{GS}}|$ is verified. By increasing the ratio t_{d1}/t_c from 1×10^{-5} to 10×10^{-5} , this region is enlarged as shown in (b). For both cases it is observed that the Fano factor tends to infinity as the energy approaches the Fermi level.

is expected to exhibit resonances. This result contrasts with the 2DEG system, where standard Fano's theory predicts antiresonances. In fact, Eq. (54) ensures $|q_{Tj}^{2\text{DEG}}| \rightarrow 0$ for $\varepsilon \rightarrow 0$.^{31,32}

As it was mentioned earlier, the spin components of the DOSs for the impurities [Eq. (47)] are displaced in opposite directions away from the Fermi level ($\varepsilon = 0$) as Eq. (4) ensures. In Fig. 3(a), the Zeeman energy is $\Delta_1 = 2 \times 10^{-5}$, thus the resonance of the localized state in the adatom for spin up (dotted red curve) moves to the left, while the corresponding for spin down (solid blue curve) goes to the right (see the “down” and “up” drawn arrows in this figure). We identify such resonances by the letters “AA” and “BB.” For the subsurface impurity, $\Delta_2 = -\Delta_1$ and the displacements of the peaks become reversed as displayed in Fig. 3(b) (the “down” and “up” drawn arrows illustrate such a process). These peaks are labeled as “A” and “B.” The Fano factors shown in Fig. 2 and the peaks “A,” “B,” “AA,” and “BB” for the spin-dependent resonances will help us to perceive, in the asymmetric limit $t_{d1}/t_c \neq t_{d2}/t_c$, the reversal of the majority spin component in the LDOS.

As we have antiparallel magnetic fields settled by the constraint $\Delta_1 = -\Delta_2 = 2 \times 10^{-5}$ for the Zeeman energies, the LDOS does not exhibit spin dependence in the case of the symmetric limit of Fano factors, determined by the ratios $t_{d1}/t_c = t_{d2}/t_c$. The symmetric limit of Fano factors can be achieved by assuming that the overlap integral t_{d2} between the

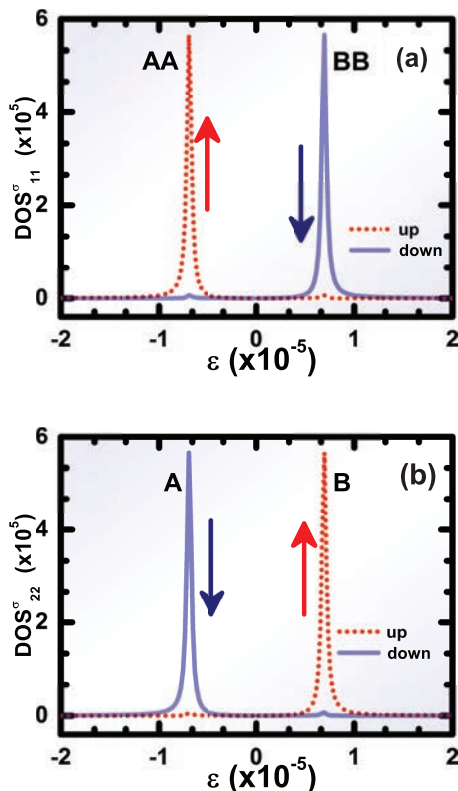


FIG. 3. (Color online) Parameters: $v_0 = 0.14$ and $\varepsilon_{1d} = \varepsilon_{2d} = 0$. Here we use Eq. (47) for the DOS of the impurities. (a) DOS for the adatom with Zeeman energy $\Delta_1 = 2 \times 10^{-5}$. (b) DOS for the subsurface impurity with Zeeman energy $\Delta_2 = -\Delta_1$ (antiparallel magnetic fields). The arrows (red and blue) indicate a given spin corresponding to the resonance.

tip and the subsurface impurity has a broader wave function that arises from the latter, which compensates the minor proximity of the STM tip, thus leading to the same overlap t_{d1} with the adatom.

Thus the profile of the LDOS is spin degenerate, as we can see in Fig. 4(a) for $t_{d1}/t_c = t_{d2}/t_c = 1 \times 10^{-5}$, in which the curves for both spins are superimposed. Despite the unpolarized profile of the LDOS, we highlight that the pair of resonances found is a direct result of the Zeeman splittings at the sites of the impurities. Otherwise, for levels $\varepsilon_{1d\sigma} = \varepsilon_{2d\sigma} = 0$, the host is completely decoupled from the impurities and the surface LDOS reduces to Eq. (6), whose form is illustrated by the green line with squares, also shown in Fig. 4(a).

In Fig. 4(b) we show the total LDOS (solid black curve) obtained from Eq. (36). It can be noted that both spin states contribute equally to the total LDOS for all values of energy ε . This is represented by two antiparallel arrows at both peaks for the total LDOS. Here we also make explicit the effect of the mixing term $\Sigma_\sigma \rho_{1221}^\sigma$ obtained from Eq. (34) upon the LDOS determined by Eq. (32). Figure 4(b) shows that the quantity $\Sigma_\sigma \rho_{1221}^\sigma$ (dotted gray curve) suppresses the direct term $\Sigma_\sigma \rho_{1122}^\sigma$ calculated from Eq. (33). The latter exhibits two resonances (dashed gray curve), while the former is characterized by two antiresonances. The peaks in the direct term are the hallmark of constructive interference, contrasting to the Fano

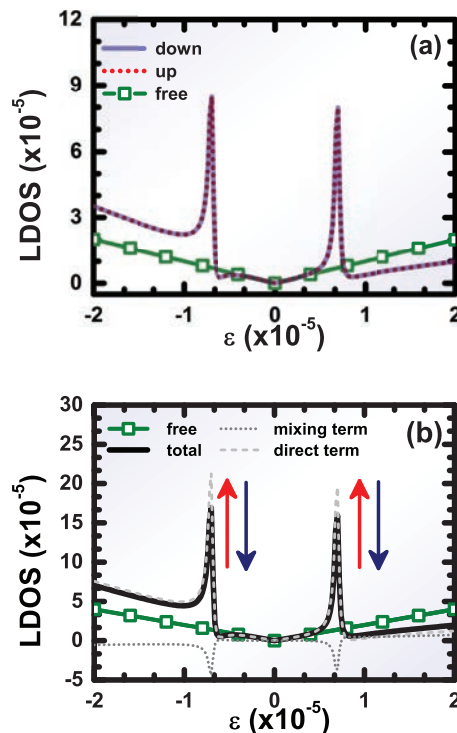


FIG. 4. (Color online) Parameters: $v_0 = 0.14$, $\varepsilon_{1d} = \varepsilon_{2d} = 0$, $t_{d1}/t_c = t_{d2}/t_c = 1 \times 10^{-5}$ (symmetric limit of Fano factors), and $\Delta_1 = -\Delta_2 = 2 \times 10^{-5}$ (antiparallel magnetic fields). (a) In the symmetric limit, $\rho_{\text{LDOS}}^\sigma$ [Eq. (32)] is spin degenerate. As a result, the dotted red curve and solid blue curve for spins up and down, respectively, are superimposed. For comparison, the DOS for graphene free of impurities [Eq. (6)] is represented by the green line with squares. (b) The solid black curve represents the total LDOS given by sum of spin-up and spin-down contributions [Eq. (36)]. Arrows are included in order to illustrate the spins corresponding to the resonance. The green curve with squares is the same as in (a). Additionally, the dashed gray and dotted gray lines are the plots of Eqs. (33) and (34), respectively. These equations correspond to the direct and mixed contributions for the total LDOS under the presence of the impurities.

antiresonances found in the mixing term, which are signatures of destructive interference. As a result, the total LDOS of Eq. (36) is given by the solid black curve. The green line with squares gives $\Sigma_\sigma \rho^{\text{GS}}(\varepsilon)$ determined by Eq. (6), which represents the DOS of the graphene system in the absence of the impurities where the peaks are absent as expected.

In Fig. 5, we analyze the asymmetric limit of the Fano factors established by the condition $t_{d1}/t_c \neq t_{d2}/t_c$. For this situation, with $t_{d1}/t_c = 1 \times 10^{-5}$ and $t_{d2}/t_c = 0.5 \times 10^{-5}$, we have verified that the total LDOS becomes spin dependent. Such a feature appears in Fig. 5(a), where the distinction between the up and down components of the LDOS is evident ($\rho_{\text{LDOS}}^\uparrow \neq \rho_{\text{LDOS}}^\downarrow$). In the range of negative energies, two aligned peaks with different amplitudes exist, but the corresponding for spin down (solid blue curve) is more pronounced in respect to the spin up (dotted red curve), i.e., $\rho_{\text{LDOS}}^\downarrow > \rho_{\text{LDOS}}^\uparrow$. At positive energies, this pattern is reversed ($\rho_{\text{LDOS}}^\downarrow < \rho_{\text{LDOS}}^\uparrow$). Thus, depending on which resonance peak is probed by the STM tip, placed at $\varepsilon \approx -0.7 \times 10^{-5}$ or at

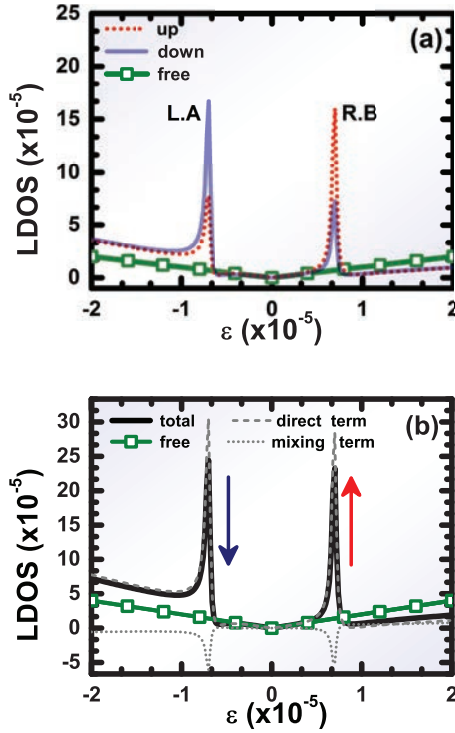


FIG. 5. (Color online) Parameters: $v_0 = 0.14$, $\varepsilon_{1d} = \varepsilon_{2d} = 0$, $t_{d1}/t_c = 1 \times 10^{-5}$, and $t_{d2}/t_c = 0.5 \times 10^{-5}$ (asymmetric limit of Fano factors), with $\Delta_1 = -\Delta_2 = 2 \times 10^{-5}$ (antiparallel magnetic fields). (a) In the asymmetric limit, $\rho_{\text{LDOS}}^\sigma$ [Eq. (32)] becomes spin dependent, which is evident by the peaks with different amplitudes for spin up (dotted red curve) and spin down (solid blue curve). For comparison, the DOS for graphene free of impurities [Eq. (6)] is represented by the green line with squares. (b) By summing the curves of (a) for spin up and spin down, one obtains the solid black curve for the total LDOS [Eq. (36)]. In contrast to the results of Fig. 4(b), now the total LDOS exhibits a spin polarization, as indicated by the arrows at each peak. Also shown are the dashed gray and dotted gray lines for the plots of Eqs. (33) and (34), respectively. Notice that in this case the direct contribution is stronger than the symmetric case of Fig. 4.

$\varepsilon \simeq 0.7 \times 10^{-5}$, the system filters predominantly spin down or spin up, respectively.

The origin of such a filtering lies within the direct term $\Sigma_\sigma \rho_{1122}^\sigma$ determined by Eq. (33); in particular, it arises from the contribution of $-(q_{T2}^{\text{GS}})^2 \text{Im}(\tilde{\mathcal{R}}_{d_2 d_2}^\sigma) = (q_{T2}^{\text{GS}})^2 \pi \rho^{\text{GS}}(D) \text{DOS}_{22}^\sigma$, where we have used Eq. (47). As $|q_{T2}^{\text{GS}}| > |q_{T1}^{\text{GS}}|$ is valid for the ranges out of the shaded regions (sides “L” and “R”) in Fig. 2(a), the parameter $(q_{T2}^{\text{GS}})^2$ enhances the resonances “A” and “B” of Fig. 3(b), thus resulting in the peaks “L.A” and “R.B” in Fig. 5(a).

In Fig. 5(b) we have performed the same analysis as done for Fig. 4(b). We have verified that in the asymmetric limit $t_{d1}/t_c \neq t_{d2}/t_c$, the mixing term $\Sigma_\sigma \rho_{1221}^\sigma$ calculated from Eq. (34) (dotted gray curve) suppresses the peaks of the direct term $\Sigma_\sigma \rho_{1122}^\sigma$ determined by Eq. (33) (dashed gray curve) as well as in the symmetric regime $t_{d1}/t_c = t_{d2}/t_c$ of Fig. 4(b). This suppression leads to the solid black curve, which is obtained from Eq. (36). In contrast to the results of Fig. 4(b), in Fig. 5(b) each black peak of the total LDOS exhibits a finite

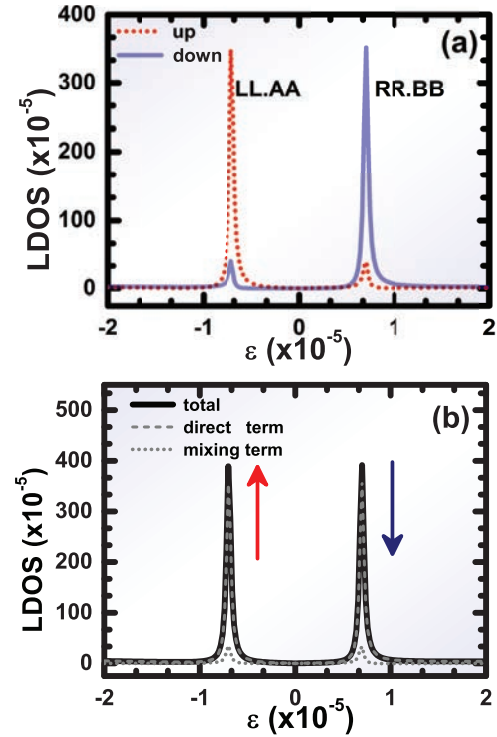


FIG. 6. (Color online) Parameters: $v_0 = 0.14$, $\varepsilon_{1d} = \varepsilon_{2d} = 0$, $t_{d1}/t_c = 10 \times 10^{-5}$, and $t_{d2}/t_c = 0.5 \times 10^{-5}$ (asymmetric limit of Fano factors), with $\Delta_1 = -\Delta_2 = 2 \times 10^{-5}$ (antiparallel magnetic fields). (a) In the asymmetric limit, $\rho_{\text{LDOS}}^\sigma$ [Eq. (32)] is spin dependent, as one can observe by comparing the curves for spin up (red dotted curve) and spin down (solid blue curve). (b) The total density of states LDOS of Eq. (36) (solid black curve) and the contributions of the direct (dashed gray curve) and mixing (dotted gray curve) LDOS obtained from Eqs. (33) and (34). The arrows indicate the majority spin corresponding to the resonance. The increase of $t_{d1}/t_c = 10 \times 10^{-5}$ leads to the inversion of the mixing curve which exhibits resonances instead of antiresonances, as previously shown in Fig. 5(b). As a consequence, the majority spin at each peak is also inverted, in comparison to Fig. 5(b). This shows that is possible to filter either spin up or spin down by just varying the distance between the STM tip and the adatom.

polarization whose majority spin is indicated by an arrow at each peak.

In order to investigate the role of the mixing term $\Sigma_\sigma \rho_{1221}^\sigma$ upon the total LDOS, we have considered in Fig. 6 the STM tip closer to the host surface. To accomplish this situation, we have increased t_{d1}/t_c to 10×10^{-5} , keeping t_{d2}/t_c fixed to 0.5×10^{-5} . Hence, the value of t_{d1}/t_c is ten times greater than the corresponding value used in Fig. 5, which makes the mixing term more relevant in this case. Figure 6(a) exhibits enhanced resonances with respect to those found in Fig. 5(a). Notice that the scale of the LDOS axis is also enlarged by a factor of ten, thus the background DOS of the graphene [not displayed in Fig. 6(a)] acts as a flat band within this scale. Moreover, the main difference between Figs. 5(a) and 6(a) is the reversal of the majority spin for the resonances.

In Fig. 6(a), the peak at $\varepsilon \simeq -0.7 \times 10^{-5}$ is dominated by spin-up electrons ($\rho_{\text{LDOS}}^\uparrow > \rho_{\text{LDOS}}^\downarrow$ in the dotted red curve), while the corresponding at $\varepsilon \simeq +0.7 \times 10^{-5}$ is due to spin

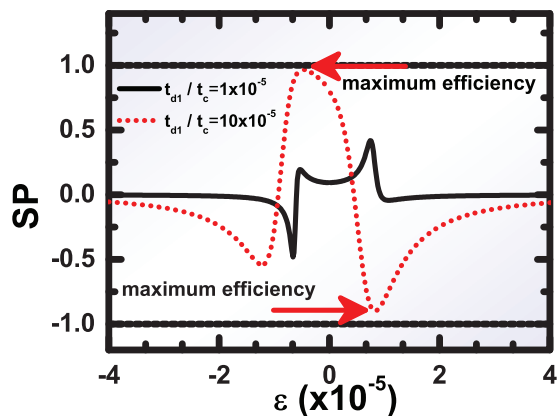


FIG. 7. (Color online) Parameters: $v_0 = 0.14$, $\varepsilon_{1d} = \varepsilon_{2d} = 0$, $t_{d1}/t_c = 0.5 \times 10^{-5}$, and $\Delta_1 = -\Delta_2 = 2 \times 10^{-5}$ (antiparallel magnetic fields). Transport polarization of Eq. (37) as a function of the energy ε . $t_{d1}/t_c = 1 \times 10^{-5}$ for the solid black curve. $t_{d1}/t_c = 10 \times 10^{-5}$ for the dotted red curve. By increasing the value of t_{d1}/t_c to 10×10^{-5} it is possible to obtain two points at which the efficiency reaches a maximum value. In particular, for $\varepsilon \simeq -0.5 \times 10^{-5}$ the efficiency is 100%, which leads to a full polarized current through the STM system.

down ($\rho_{\text{LDOS}}^\downarrow > \rho_{\text{LDOS}}^\uparrow$ in the solid blue curve). For Fig. 5(a), we have exactly the opposite. The origin lies within the term $-(q_{T1}^{\text{GS}})^2 \text{Im}(\tilde{\mathcal{R}}_{d_1 d_1}^\sigma) = (q_{T1}^{\text{GS}})^2 \pi \rho^{\text{GS}}(D) \text{DOS} \sigma_{11}$.

In the case of Fig. 6(a), the corresponding Fano parameters are described by the curves in Fig. 2(b) in which $|q_{T1}^{\text{GS}}| > |q_{T2}^{\text{GS}}|$ for the whole energy range [shaded regions “LL” and “RR” in Fig. 2(b)]. Thus, the peaks “AA” and “BB” of Fig. 3(a) are enhanced by $(q_{T1}^{\text{GS}})^2$ and lead to the new resonances “LL.AA” and “RR.BB” in Fig. 6(a).

We point out that not only does the spin-filtering effect becomes reversed, but also does the Fano interference arising from $\Sigma_\sigma \rho_{1221}^\sigma$ in Eq. (34). Figure 6(b) shows that the mixing term (dotted gray curve) is formed by a pair of resonances, which is the opposite pattern as compared to that found in Figs. 4(b) and 5(b). It means that the destructive interference is replaced by a constructive one. As a result, the direct and mixed terms (dashed and dotted gray curves, respectively) are now being summed, leading to the total LDOS [Eq. (36)] represented by the solid black curve. Once again, we have used an arrow at each peak to denote the down or up majority spin. In summary, the lifting of the spin degeneracy in the “host + impurities” device is not established by the Zeeman effect $\Delta_1 = -\Delta_2$, but is due to the asymmetric ratios $t_{d1}/t_c \neq t_{d2}/t_c$. Our work proposes the Fano interference as the mechanism to filter spins in graphene. Additionally, our spin filter exhibits the opposite behavior of that for a single adatom,⁶ in which the spin-polarized feature of the system is quenched by the proximity of the STM tip.

The degree of spin polarization for the transport through the considered setup given by Eq. (37) as a function of the energy ε is displayed in Fig. 7. We have analyzed the cases $t_{d1}/t_c = 1 \times 10^{-5}$ (solid black curve) and $t_{d1}/t_c = 10 \times 10^{-5}$ (dotted red curve). In the former situation, for energies below and near the Fermi level, values of positive polarizations ($\mathcal{G}^\uparrow > \mathcal{G}^\downarrow$) and negative ($\mathcal{G}^\downarrow > \mathcal{G}^\uparrow$) occur, while above the Fermi level,

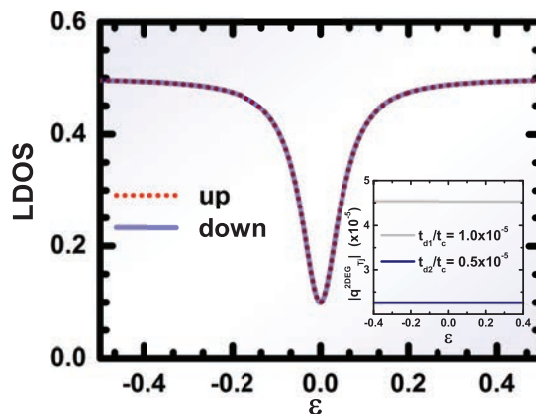


FIG. 8. (Color online) Parameters: $v_0 = 0.14$, $\varepsilon_{1d} = \varepsilon_{2d} = 0$, $t_{d1}/t_c = 1 \times 10^{-5}$, $t_{d2}/t_c = 0.5 \times 10^{-5}$, and $\Delta_1 = -\Delta_2 = 2 \times 10^{-5}$ (antiparallel magnetic fields). The $\rho_{\text{LDOS}}^\sigma$ [Eq. (32)] is presented as a function of the energy ε for the 2DEG. Since the curves for spin up (dotted red curve) and spin down (solid blue curve) are superimposed, the total LDOS does not depend on spin, as observed for the graphene sheet. Hence, the 2DEG system does not operate as a Fano spin filter. Unlike the graphene, in the 2DEG we always have $|q_{T1}^{2\text{DEG}}| > |q_{T2}^{2\text{DEG}}|$ for $t_{d1}/t_c > t_{d2}/t_c$ (inset).

polarization remains positive. However, it never exceeds $|0.5|$. In the case $t_{d1}/t_c = 10 \times 10^{-5}$, which mimics the STM tip closer to the host, the pattern of the polarization observed for $t_{d1}/t_c = 1 \times 10^{-5}$ is reversed. Moreover, it reaches the maximum value $+1$ at $\varepsilon \simeq -0.5 \times 10^{-5}$ and approaches -1 for $\varepsilon \simeq +0.8 \times 10^{-5}$ (see the horizontal arrows).

B. 2DEG system

In this section we explore the 2DEG system with standard quadratic dispersion. To this end, we employ Eq. (36) for the LDOS by taking into account Eqs. (7), (45), (46), (50), (54), and (55).

Figure 8 reveals that even in the asymmetric limit, for which $t_{d1}/t_c = 1 \times 10^{-5}$ and $t_{d2}/t_c = 0.5 \times 10^{-5}$, there is no resolved spin dependence in the Fano profile of the LDOS. Such a feature can be visualized via the dotted red and solid blue curves, which are characterized by degenerate antiresonances for spins up and down, respectively. These resonances are predictable due to Eq. (54) for the Fano parameter, which gives $|q_{Tj}^{2\text{DEG}}| \rightarrow 0$ for $\varepsilon \rightarrow 0$ (see the “gray” and “blue” line shapes in the inset, respectively, for $t_{d1}/t_c = 1 \times 10^{-5}$ and $t_{d2}/t_c = 0.5 \times 10^{-5}$). It is worth noting that for the 2DEG, unlike the graphene setup, there is no region in the Fano versus ε plot where the condition $|q_{T2}^{2\text{DEG}}| > |q_{T1}^{2\text{DEG}}|$ for $t_{d1}/t_c > t_{d2}/t_c$ is verified (compare the inset with the results in Fig. 2). As a result, the 2DEG setup does not operate as a spin filter.

VI. CONCLUSIONS

In this paper, we have proposed a relativistic spin filter consisting of an STM setup with a graphene hosting two lateral impurities. The mechanism through which the STM picks up preferentially a definite spin is based on quantum Fano interference. A particular feature provided by this system is the possibility to choose which spin to filter by tuning the distance

between the STM tip and the adatom. For particular conditions pure spin currents may be generated by the proposed setup, which makes it attractive for possible spintronics applications.

It is worth mentioning that the subsurface impurity plays an important role on the transport properties in spite of the weak coupling to the STM tip. In fact, in Fig. 2 there are regions in which the condition $|q_{T2}^{GS}| > |q_{T1}^{GS}|$ is verified even with $t_{d1}/t_c > t_{d2}/t_c$. This is a striking result of quantum interference and illustrates the subtle quantum properties of graphene based structures. These results contrast with 2DEG, where the Fano

factors always follow the same trend, i.e., $|q_{T1}^{2DEG}| > |q_{T2}^{2DEG}|$ when $t_{d1}/t_c > t_{d2}/t_c$.

ACKNOWLEDGMENT

This work has the support of the Brazilian agencies CNPq, CAPES, and PROPG-PROPe/UNESP, and FP7 IRSES project SPINMET. A. C. Seridonio thanks the University of Iceland for hospitality.

-
- ¹K. S. Novoselov, *Rev. Mod. Phys.* **83**, 837 (2011).
²S. Das Sarma, S. Adam, E. H. Hwang, and E. Rossi, *Rev. Mod. Phys.* **83**, 407 (2011).
³N. M. R. Peres, *Rev. Mod. Phys.* **82**, 2673 (2010).
⁴A. H. Castro Neto, F. Guinea, N. M. R. Peres, K. S. Novoselov, and A. K. Geim, *Rev. Mod. Phys.* **81**, 109 (2009).
⁵B. Uchoa, V. N. Kotov, N. M. R. Peres, and A. H. Castro Neto, *Phys. Rev. Lett.* **101**, 026805 (2008).
⁶B. Uchoa, L. Yang, S.-W. Tsai, N. M. R. Peres, and A. H. Castro Neto, *Phys. Rev. Lett.* **103**, 206804 (2009).
⁷Z. G. Zhu and J. Berakdar, *Phys. Rev. B* **84**, 165105 (2011).
⁸M. P. Lima, A. J. R. da Silva, and A. Fazio, *Phys. Rev. B* **84**, 245411 (2011).
⁹V. W. Brar, R. Decker, H. M. Solowan, Y. Wang, L. Maserati, K. T. Chan, H. Lee, Ç. O. Girit, A. Zettl, S. G. Louie, M. L. Cohen, and M. F. Crommie, *Nat. Phys.* **7**, 43 (2011).
¹⁰A. Saffarzadeh and G. Kirczenow, *Phys. Rev. B* **85**, 245429 (2012).
¹¹F. Hiebel, P. Mallet, J. Y. Veullen, and L. Magaud, *Phys. Rev. B* **86**, 205421 (2012).
¹²P. S. Cornaglia, G. Usaj, and C. A. Balseiro, *Phys. Rev. Lett.* **102**, 046801 (2009).
¹³T. Eelbo, M. Wasniowska, M. Gyamfi, S. Forti, U. Starke, and R. Wiesendanger, *Phys. Rev. B* **87**, 205443 (2013).
¹⁴T. Eelbo, M. Wasniowska, P. Thakur, M. Gyamfi, B. Sachs, T. O. Wehling, S. Forti, U. Starke, C. Tieg, A. I. Lichtenstein, and R. Wiesendanger, *Phys. Rev. Lett.* **110**, 136804 (2013).
¹⁵T. P. Hardcastle, C. R. Seabourne, R. Zan, R. M. D. Brydson, U. Bangert, Q. M. Ramasse, K. S. Novoselov, and A. J. Scott, *Phys. Rev. B* **87**, 195430 (2013).
¹⁶Y. Virgus, W. Purwanto, H. Krakauer, and S. Zhang, *Phys. Rev. B* **86**, 241406 (2012).
¹⁷A. N. Rudenko, F. J. Keil, M. I. Katsnelson, and A. I. Lichtenstein, *Phys. Rev. B* **86**, 075422 (2012).
¹⁸K. T. Chan, J. B. Neaton, and M. L. Cohen, *Phys. Rev. B* **77**, 235430 (2008).
¹⁹B. Huang, J. Yu, and S.-H. Wei, *Phys. Rev. B* **84**, 075415 (2011).
²⁰X. Hong, S.-H. Cheng, C. Herding, and J. Zhu, *Phys. Rev. B* **83**, 085410 (2011).
²¹P. O. Lehtinen, A. S. Foster, A. Ayuela, A. Krasheninnikov, K. Nordlund, and R. M. Nieminen, *Phys. Rev. Lett.* **91**, 017202 (2003).
²²J. H. Chen, C. Jang, S. Adam, M. S. Fuhrer, E. D. Williams, and M. Ishigami, *Nat. Phys.* **4**, 377 (2008).
²³K. Pi, K. M. McCreary, W. Bao, W. Han, Y. F. Chiang, Y. Li, S.-W. Tsai, C. N. Lau, and R. K. Kawakami, *Phys. Rev. B* **80**, 075406 (2009).
²⁴M. Alemani, A. Barfuss, B. Geng, C. Girit, P. Reisenauer, M. F. Crommie, F. Wang, A. Zettl, and F. Hellman, *Phys. Rev. B* **86**, 075433 (2012).
²⁵F. Schedin, A. Geim, S. Morozov, E. Hill, P. Blake, M. Katsnelson, and K. Novoselov, *Nat. Mater.* **6**, 652 (2007).
²⁶T. O. Wehling, K. S. Novoselov, S. V. Morozov, E. E. Vdovin, M. I. Katsnelson, A. K. Geim, and A. I. Lichtenstein, *Nano Lett.* **8**, 173 (2008).
²⁷M. Gyamfi, T. Eelbo, M. Wasniowska, T. O. Wehling, S. Forti, U. Starke, A. I. Lichtenstein, M. I. Katsnelson, and R. Wiesendanger, *Phys. Rev. B* **85**, 161406 (2012).
²⁸M. Gyamfi, T. Eelbo, M. Wasniowska, and R. Wiesendanger, *Phys. Rev. B* **84**, 113403 (2011).
²⁹J. Tersoff and D. R. Hamann, *Phys. Rev. Lett.* **50**, 1998 (1983).
³⁰J. Tersoff and D. R. Hamann, *Phys. Rev. B* **31**, 805 (1985).
³¹U. Fano, *Phys. Rev.* **124**, 1866 (1961).
³²A. E. Miroshnichenko, S. Flach, and Y. S. Kivshar, *Rev. Mod. Phys.* **82**, 2257 (2010).
³³A. C. Hewson, *The Kondo Problem to Heavy Fermions* (Cambridge University Press, Cambridge, UK, 1993).
³⁴H. C. Manoharan, C. P. Lutz, and D. M. Eigler, *Nature (London)* **403**, 512 (2000).
³⁵V. Madhavan, W. Chen, T. Jamneala, M. F. Crommie, and N. S. Wingreen, *Phys. Rev. B* **64**, 165412 (2001).
³⁶N. Knorr, M. A. Schneider, L. Diekhöner, P. Wahl, and K. Kern, *Phys. Rev. Lett.* **88**, 096804 (2002).
³⁷A. F. Otte, M. Ternes, K. V. Bergmann, S. Loth, H. Brune, C. P. Lutz, C. F. Hirjibehedin, and A. J. Heinrich, *Nat. Phys.* **4**, 847 (2008).
³⁸M. Ternes, A. J. Heinrich, and W. D. Schneider, *J. Phys.: Condens. Matter* **21**, 053001 (2009).
³⁹A. C. Seridonio, F. S. Orahcio, F. M. Souza, and M. S. Figueira, *Phys. Rev. B* **85**, 165109 (2012).
⁴⁰S. L. Kawahara, J. Lagoute, V. Repain, C. Chacon, Y. Girard, J. Klein, and S. Rousset, *Phys. Rev. B* **82**, 020406(R) (2010).
⁴¹A. C. Seridonio, F. M. Souza, and I. A. Shelykh, *J. Phys.: Condens. Matter* **21**, 095003 (2009).
⁴²A. C. Seridonio, F. M. Souza, J. Del Nero, and I. A. Shelykh, *Physica E* **41**, 1611 (2009).
⁴³P. H. Penteado, F. M. Souza, A. C. Seridonio, E. Vernek, and J. C. Egues, *Phys. Rev. B* **84**, 125439 (2011).

- ⁴⁴N. Néel, J. Kröger, and R. Berndt, *Phys. Rev. B* **82**, 233401 (2010).
- ⁴⁵Y. Qi, J. X. Zhu, S. Zhang, and C. S. Ting, *Phys. Rev. B* **78**, 045305 (2008).
- ⁴⁶M. Sindel, L. Borda, J. Martinek, R. Bulla, J. König, G. Schön, S. Maekawa, and J. von Delft, *Phys. Rev. B* **76**, 045321 (2007).
- ⁴⁷K. Hamaya, M. Kitabatake, K. Shibata, M. Jung, M. Kawamura, K. Hirakawa, T. Machida, and T. Taniyama, *Appl. Phys. Lett.* **91**, 232105 (2007).
- ⁴⁸K. Hamaya, M. Kitabatake, K. Shibata, M. Jung, M. Kawamura, S. Ishida, T. Taniyama, K. Hirakawa, Y. Arakawa, and T. Machida, *Phys. Rev. B* **77**, 081302(R) (2008).
- ⁴⁹M. R. Calvo, J. F. Rossier, J. J. Palacios, D. Jacob, D. Natelson, and C. Untiedt, *Nature (London)* **458**, 1150 (2009).
- ⁵⁰J. Hauptmann, J. Paaske, and P. Lindelof, *Nat. Phys.* **4**, 373 (2008).
- ⁵¹I. Weymann and L. Borda, *Phys. Rev. B* **81**, 115445 (2010).
- ⁵²I. Weymann, *Phys. Rev. B* **83**, 113306 (2011).
- ⁵³M. Misiorny, I. Weymann, and J. Barnaś, *Phys. Rev. Lett.* **106**, 126602 (2011).
- ⁵⁴M. Gaass, A. K. Hüttel, K. Kang, I. Weymann, J. von Delft, and Ch. Strunk, *Phys. Rev. Lett.* **107**, 176808 (2011).
- ⁵⁵M. Misiorny, I. Weymann, and J. Barnaś, *Phys. Rev. B* **84**, 035445 (2011).
- ⁵⁶C. A. Büsser, A. E. Feiguin, and G. B. Martins, *Phys. Rev. B* **85**, 241310(R) (2012).
- ⁵⁷E. Vernek, C. A. Büsser, E. V. Anda, A. E. Feiguin, and G. B. Martins, arXiv:1308.4746.
- ⁵⁸M. E. Torio, K. Hallberg, S. Flach, A. E. Miroshnichenko, and M. Titov, *Eur. Phys. J. B* **37**, 399 (2004).
- ⁵⁹P. W. Anderson, *Phys. Rev.* **124**, 41 (1961).
- ⁶⁰D. Goldhaber-Gordon, H. Shtrikman, D. Mahalu, D. Abusch-Magder, U. Meirav, and M. A. Kastner, *Nature (London)* **391**, 156 (1998).
- ⁶¹S. M. Cronenwett, T. H. Oosterkamp, and L. P. Kouwenhoven, *Science* **281**, 540 (1998).
- ⁶²H. Haug and A. P. Jauho, *Quantum Kinetics in Transport and Optics of Semiconductors*, Springer Series in Solid-State Sciences Vol. 123 (Springer, New York, 1996).
- ⁶³M. Plihal and J. W. Gadzuk, *Phys. Rev. B* **63**, 085404 (2001).
- ⁶⁴C.-Y. Lin, A. H. Castro Neto, and B. A. Jones, *Phys. Rev. Lett.* **97**, 156102 (2006).