

Silvana Castro Leandro

**BATIMENTOS QUÂNTICOS DEPENDENTES DO SPIN
VIA STM**

Ilha Solteira-SP
Junho, 2013



Silvana Castro Leandro

**BATIMENTOS QUÂNTICOS DEPENDENTES DO SPIN
VIA STM**

Dissertação de Mestrado submetida ao Programa de Pós-Graduação em Ciência dos Materiais da Faculdade de Engenharia de Ilha Solteira da UNESP, como parte dos requisitos para a obtenção do título de Mestre em Ciência dos Materiais.

Especialidade: Física da matéria condensada.

Dr. Antonio Carlos Ferreira Seridonio
Orientador

Ilha Solteira–SP
Junho, 2013

FICHA CATALOGRÁFICA

Elaborada pela Seção Técnica de Aquisição e Tratamento da Informação
Serviço Técnico de Biblioteca e Documentação da UNESP - Ilha Solteira.

L437b Leandro, Silvana Castro.
Batimentos quânticos dependentes do SPIN via STM / Silva Castro Leandro. -- Ilha Solteira : [s.n.], 2013
77 f. : il.

Dissertação (mestrado) - Universidade Estadual Paulista. Faculdade de Engenharia de Ilha Solteira. Área de conhecimento: Física da Matéria Condensada, 2013

Orientador: Antonio Carlos Ferreira Seridonio
Inclui bibliografia

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

CERTIFICADO DE APROVAÇÃO

TÍTULO: Batimentos quânticos dependentes do spin via STM

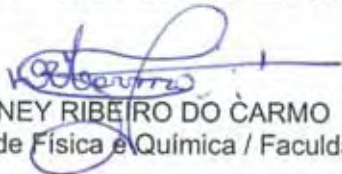
AUTORA: SILVANA CASTRO LEANDRO

ORIENTADOR: Prof. Dr. ANTONIO CARLOS FERREIRA SERIDONIO

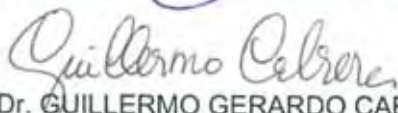
Aprovada como parte das exigências para obtenção do Título de Mestre em Ciência dos Materiais ,
Área: FÍSICA DA MATERIA CONDENSADA, pela Comissão Examinadora:



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



Prof. Dr. DEVANEY RIBEIRO DO CARMO
Departamento de Física e Química / Faculdade de Engenharia de Ilha Solteira



Prof. Dr. GUILLERMO GERARDO CABRERA OYARZUN
Departamento de Física da Matéria Condensada / Universidade Estadual de Campinas

Data da realização: 28 de junho de 2013.

DEDICO

Dedico este trabalho aos meus avós Antônio, Francisco e Alice “in Memoriam”, e à minha avó Maria, pois deles surgiram os sonhos que eu vivo hoje.

AGRADECIMENTOS

À Deus,

pela oportunidade.

Aos meus pais Cícero e Anézia,

pelo apoio, compreensão e carinho ao longo deste percurso.

Aos meus amigos e familiares,

pela cumplicidade, ajuda e amizade.

Aos professores e colegas de curso,

pelo conhecimento e colaboração.

Ao professor Antonio Seridonio,

pela dedicação e orientação deste trabalho.

RESUMO

Neste trabalho investigou-se teoricamente a densidade local de estados (LDOS) sondada por uma ponta de STM de metais hospedando um átomo adsorvido e uma impureza subsuperficial. Modelamos o sistema por meio do Hamiltoniano de Anderson de duas impurezas. Utilizando-se do procedimento da equação de movimento nas funções de Green, derivamos expressões analíticas para a LDOS de dois tipos de hospedeiro: uma superfície metálica e um fio quântico. A LDOS revela oscilações de Friedel e interferência Fano como função da posição da ponta. Essas oscilações dependem fortemente da dimensão do hospedeiro. Encontramos que os números de onda de Fermi dependentes do spin dão origem a batimentos quânticos spin-polarizados na LDOS. Embora a LDOS da superfície mostre um padrão de batimentos amortecidos, ela possui um comportamento oposto no fio quântico. Devido a ausência de amortecimento, o fio opera como um filtro de spins espacialmente resolvido com elevada eficiência.

Palavras chaves: Microscópio de varredura por tunelamento de elétrons. *Spintrônica*. Transporte quântico. Condutância diferencial.

ABSTRACT

We theoretically investigate the local density of states (LDOS) probed by an STM tip of ferromagnetic metals hosting a single adatom and a subsurface impurity. We model the system via the two-impurity Anderson Hamiltonian. By using the equation of motion with the relevant Green's functions, we derive analytical expressions for the LDOS of two host types: a surface and a quantum wire. The LDOS reveals Friedel-like oscillations and Fano interference as a function of the STM tip position. These oscillations strongly depend on the host dimension. Interestingly, we find that the spin-dependent Fermi wave numbers of the hosts give rise to spin-polarized quantum beats in the LDOS. Although the LDOS for the metallic surface shows a damped beating pattern, it exhibits the opposite behavior in the quantum wire. Due to this absence of damping, the wire operates as a spatially resolved spin filter with a high efficiency.

Keywords: Scanning tunneling microscope. Spintronics. Quantum transport. Differential conductance.

LISTA DE ILUSTRAÇÕES

Figure 1 – Duas impurezas acopladas lateralmente na presença de uma ponta de STM. Γ_{tip} é o acoplamento ponta-metal.	12
Figure 2 – Painel da esquerda: perfil de uma superfície de Fermi esférica (isotrópica). Painel da direita: ondas eletrônicas esféricas espalhadas por uma impureza.	14
Figure 3 – Painel da esquerda: perfil de uma superfície de Fermi anisotrópica. Painel da direita: ondas eletrônicas unidimensionais espalhadas em direções preferenciais por uma impureza (efeito “electron focusing”).	15
Figure 4 – Níveis de energia de uma impureza no modelo de Anderson.	17
Figure 5 – $k_B T = 0, 1\Gamma$. LDOS (55) de uma superfície com $P = 0, 1$ em função de ε/Γ para diferentes valores de $k_F R$ no limite de curto alcance.	51
Figure 6 – $k_B T = 0, 1\Gamma$. Fixando-se a energia em $\varepsilon = -10\Gamma$, oscilações de Friedel aparecem na LDOS.	52
Figure 7 – $k_B T = 0, 1\Gamma$. LDOS (55) de uma superfície metálica com $P = 0, 1$, em função de ε/Γ para diferentes valores de $k_F R$ no limite de longo alcance.	53
Figure 8 – $k_B T = 0, 1\Gamma$. Batimentos quânticos spin-polarizados amortecidos emergem na LDOS da superfície metálica em função de $k_F R$ com $\varepsilon = \varepsilon_{1d} = -10\Gamma$.	54
Figure 9 – LDOS (55) em $k_B T = 0, 1\Gamma$ de um fio quântico spin-polarizado com $P = 0, 1$ em função de ε/Γ para diferentes valores de $k_F R$.	57
Figure 10 – Em oposição ao comportamento da superfície metálica, batimentos quânticos spin-polarizados não amortecidos aparecem na LDOS em $\varepsilon = \varepsilon_{1d} = -10\Gamma$.	58
Figure 11 – Polarização dada pela 56 com $k_B T = 0, 1\Gamma$ e voltagem $\phi = \varepsilon_{1d} = -10\Gamma$.	59
Figure 12 – Polarização dada pela 56 com $k_B T = 0, 1\Gamma$ e tensão $\phi = \varepsilon_{1d} = -10\Gamma$.	60

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO	10
2	EFEITO DE FOCALIZAÇÃO ELETRÔNICA	13
3	IMPUREZAS MAGNÉTICAS EM METAIS	16
3.1	HAMILTONIANO DE ANDERSON DE UMA IMPUREZA	16
3.2	DENSIDADE DE ESTADOS DA IMPUREZA	17
4	SISTEMAS DE DUAS IMPUREZAS NA PRESENÇA DE UM STM	22
4.1	MODELO DE ANDERSON DE DUAS IMPUREZAS	22
4.2	LDOS PARA SISTEMAS SPIN-POLARIZADOS	23
4.3	FUNÇÕES DE FANO E DE FRIEDEL	27
4.3.1	Superfície metálica	27
4.3.2	Fio quântico	29
5	FUNÇÕES DE GREEN DAS IMPUREZAS	31
5.1	FUNÇÕES DE GREEN DIAGONAIS	31
5.2	FUNÇÕES DE GREEN NÃO DIAGONAIS	34
6	RESULTADOS	50
6.1	PARÂMETROS	50
6.2	LDOS PARA A SUPERFÍCIE METÁLICA	51
6.3	LDOS PARA O FIO QUÂNTICO	55
6.4	POLARIZAÇÃO DE TRANSPORTE	56
7	CONCLUSÃO	61
	REFERÊNCIAS	62
	ANEXO A – PUBLICAÇÃO RELACIONADA AO TRABALHO	67

1 INTRODUÇÃO

A densidade local de estados (LDOS) de sistemas eletrônicos com impurezas pode apresentar várias formas de linha Fano, devido à interferência quântica entre diferentes caminhos eletrônicos. Essa interferência surge a partir dos elétrons itinerantes que viajam através do metal e tunelam para a impureza (FANO, 1961; MIROSHNICHENKO; FLACH; KIVSHAR, 2010). Para uma única impureza no regime Kondo (HEWSON, 1993), próxima a uma ponta de um microscópio de varredura por tunelamento de elétrons (STM), novos efeitos manifestam-se na presença de um reservatório de elétrons com polarização de spins. Aqui podemos citar a separação do pico de Kondo na condutância diferencial devido ao magnetismo itinerante do metal (SERIDONIO et al., 2012). Tal assinatura já foi encontrada experimentalmente no Fe com uma impureza de Co (KAWAHARA et al., 2010). Além disso, o sistema de STM também pode funcionar como um filtro de spins no regime Fano-Kondo, devido a uma ponta spin-polarizada e um metal não magnético (SERIDONIO; SOUZA; SHELYKH, 2009; SERIDONIO et al., 2009). E na ausência de um hospedeiro ferromagnético, o perfil Fano-Kondo torna-se duplamente degenerado (AGUIAR-HUALDE et al., 2007; CHIAPPE; LOUIS, 2006; FIGGINS; MORR, 2010; FU et al., 2007; KNORR et al., 2002; LIN; NETO; JONES, 2006; MADHAVAN et al., 1998; MADHAVAN et al., 2001; MANOHARAN; LUTZ; EIGLER, 2000; OTTE et al., 2008; PLIHAL; GADZUK, 2001; SCHILLER; HERSHFELD, 2000; TERNES; HEINRICH; SCHNEIDER, 2009; ÚJSÁGHY et al., 2000; WAHL et al., 2005; WÖLFLE; DUBI; BALATSKY, 2010). Fora do regime Kondo, um diodo de spins emerge (PENTEADO et al., 2011).

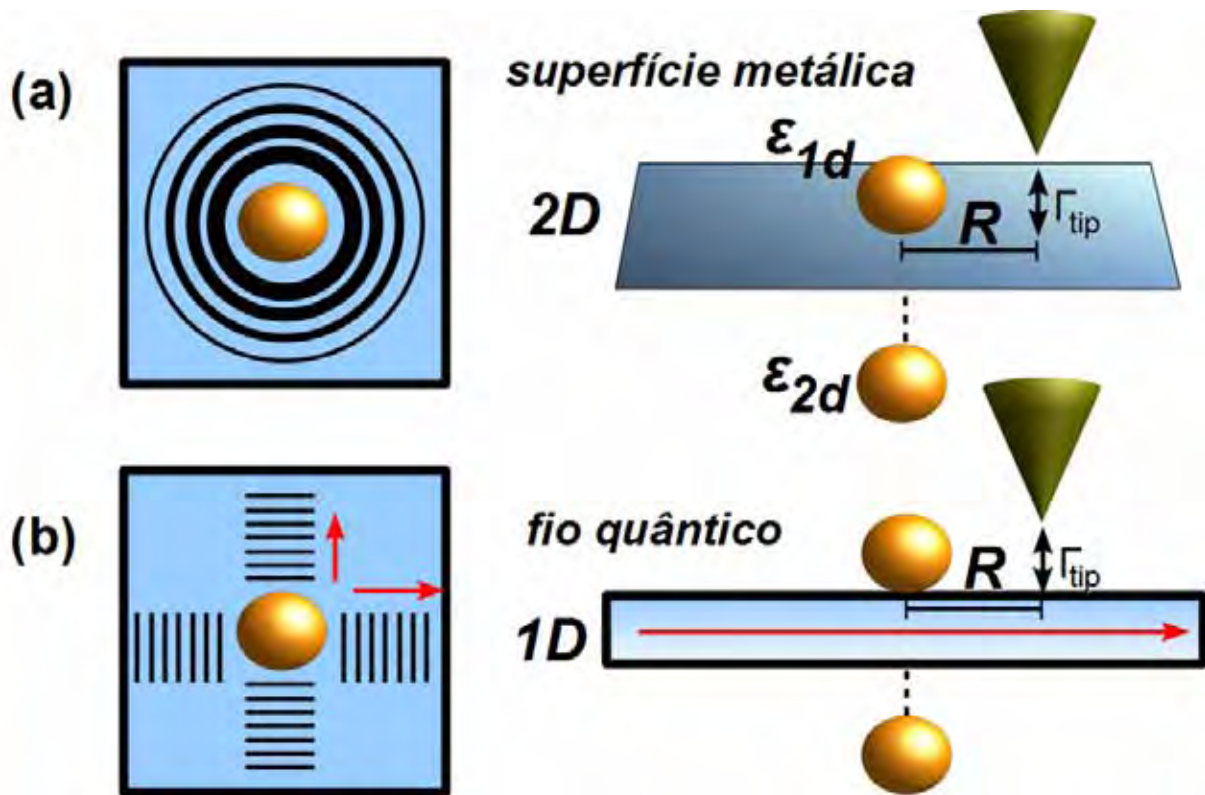
Na literatura de Física da Matéria Condensada sobre o STM, existe uma vasta quantidade de trabalhos que discutem fenômenos dependentes do spin empregando metais ferromagnéticos acoplados a pontos quânticos ou impurezas no regime Kondo (REYES et al., 2009; CHOI et al., 2004; GAASS et al., 2011; HAMAYA et al., 2007; HAMAYA et al., 2008; HAUPTMANN; PAASKE; LINDELOF, 2008; MARTINEK et al., 2003; MARTINEK et al., 2005; MARTINEK et al., 2003; MISIORNY; WEYMANN; BARNAŚ, 2011a; MISIORNY; WEYMANN; BARNAŚ, 2011b; NÉEL; KRÖGER; BERNDT, 2010; PASUPATHY et al., 2004; QI et al., 2008; SINDEL et al., 2007; SWIRKOWICZ et al., 2006; UTSUMI et al., 2005; WEYMANN, 2011; WEYMANN; BORDA, 2010; ZHANG et al., 2002). Aqui podemos citar aqueles com amostras metálicas e impurezas enterradas, em que a anisotropia da superfície de Fermi desempenha um importante papel no tunelamento de elétrons (LOUNIS, 2007; LOUNIS et al., 2011; PRÜSER et al., 2011; PRÜSER et al., 2012; WEISMANN, 2008; WEISMANN et al., 2009). Segundo o experimento feito por Prüser et al. (2012), tal anisotropia permite que os átomos de Fe e Co sob a superfície do Cu (100) espalhe elétrons em direções preferenciais do material devido a um efeito chamado de focalização eletrônica (“electron focusing”). Nesse cenário, o STM torna-se uma nova ferramenta para detectar as assinaturas da superfície de Fermi na estrutura real de um metal. Em contraste, menor atenção tem sido dada a sistemas

spin-polarizados fora do regime Kondo e com duas impurezas.

O objetivo deste trabalho foi apresentar uma descrição teórica dos sistemas esboçados na 1. Mostramos que novos fenômenos como batimentos quânticos spin-polarizados e o efeito de filtro de spins aparecem na densidade local de estados (LDOS) de tais materiais. Para esse fim, consideramos duas geometrias distintas consistentes com experimentos recentes: uma superfície metálica e um fio quântico. O caso 2D simula a ilha de Fe (KAWAHARA et al., 2010). O fio quântico, por outro lado, emula o efeito de “electron focusing” (PRÜSER et al., 2012). É importante mencionar que a modelagem por um fio quântico para o efeito “electron focusing” foi inicialmente proposta (WEISMANN, 2008). Nesse tratamento, o modelo de Anderson não interagente de uma impureza (ANDERSON, 1961) foi resolvido em uma dimensão considerando-se a impureza acima do fio. Devemos também ressaltar que o cálculo “ab initio” para o “electron focusing” (PRÜSER et al., 2012) pode ser qualitativamente recuperado pelo modelo do fio quântico (WEISMANN, 2008).

Aqui estendemos esse tratamento de uma dimensão para o Hamiltoniano de Anderson, introduzindo: uma DOS dependente do spin para os hospedeiros, uma segunda impureza abaixo dos mesmos e interação de Coulomb em ambas as impurezas. Adotamos o modelo de Anderson de duas impurezas, utilizando-se da equação de movimento para calcular a LDOS do sistema. Mostramos que a LDOS pode ser escrita em termos do fator de Fano, da função de Friedel para oscilações de carga e dos números de onda de Fermi dependentes do spin para o hospedeiro. Tais quantidades levam a batimentos quânticos spin-polarizados na LDOS. Mostramos também, que esse efeito é fortemente dependente à dimensionalidade do metal. Assim, os batimentos quânticos na LDOS da superfície metálica apresentam um comportamento amortecido a longa distância em contraste com o não amortecido encontrado no sistema do fio quântico. Tais características opostas originam-se das formas específicas assumidas pelo fator de Fano e função de Friedel, os quais dependem da dimensionalidade do hospedeiro. Portanto, a superfície metálica e o fio quântico tornam-se filtros de spins com resolução espacial, sendo que esse último apresenta uma maior eficiência devido à LDOS não amortecida.

Figura 1 – Duas impurezas acopladas lateralmente na presença de uma ponta de STM. Γ_{tip} é o acoplamento ponta-metal.



(a) a esquerda do painel: ondas 2D evanescentes aparecem na LDOS de uma superfície metálica. O sistema é tratado como um gás de elétrons bidimensional, mostrado no painel da direita. (b) painel da esquerda: o confinamento de ondas 1D em direções específicas (frentes de onda perpendiculares) é devido ao efeito “electron focusing” (veja Ref. (PRÜSER et al., 2012)). Neste trabalho, cada direção é modelada por um fio quântico como ilustrado no painel da direita.

Fonte: Elaboração da autora.

Esta dissertação está organizada da seguinte forma. No Capítulo 2, apresentamos o efeito de focalização eletrônica. Uma introdução ao Hamiltoniano de Anderson de uma impureza é feita no Capítulo 3. Depois no Capítulo 4, introduzimos o Hamiltoniano de Anderson de duas impurezas no contexto do STM. Os sistemas de STM na presença de hospedeiros ferromagnéticos como os da geometria da 1 são estudados. Derivamos também nesse capítulo, a fórmula da LDOS para ambos os sistemas: a superfície metálica e o fio quântico. As funções de Green que determinam a LDOS são calculadas no Capítulo 5 dentro da aproximação de Hubbard I (HAUG; ANTTI-PEKKA, 1996). No Capítulo 6, discutimos os batimentos quânticos na LDOS e o filtro de spins obtido. A conclusão é apresentada no Capítulo 7, seguida da publicação associada a esse trabalho.

2 EFEITO DE FOCALIZAÇÃO ELETRÔNICA

O STM tem sido usado para manipular átomos e criar estruturas que permitem a visualização de ondas eletrônicas. Em um metal com impurezas, as ondas rearranjam-se devido as perturbações causadas por tais átomos adicionados. Como veremos a seguir, essa resposta depende da anisotropia da superfície de Fermi. Essa por sua vez, favorece a propagação de elétrons em certas direções do material.

Para compreender esse efeito, devemos evocar a definição de velocidade de grupo para os elétrons, ou seja, $\mathbf{v}_g = \hbar^{-1} \nabla_{\mathbf{k}} E(\mathbf{k})$, onde \hbar é a razão entre a constante de Planck e 2π , $\nabla_{\mathbf{k}}$ é o gradiente em relação ao vetor de onda \mathbf{k} e $E(\mathbf{k})$ é a estrutura da banda. Essa velocidade é um vetor normal à superfície de Fermi do sistema. Portanto, se as linhas desse campo de velocidade concentram-se mais em uma dada direção, então há um fluxo maior de elétrons ao longo da mesma. A esse comportamento, chamamos de focalização eletrônica ou de “electron focusing”. Nesse cenário, a LDOS sondada pelo STM fornece uma visualização indireta no espaço real de uma dada superfície de Fermi.

Esse efeito está relacionado com a propagação dos elétrons, os quais podem ser teoricamente descritos por uma função de Green retardada $G(x, x', \varepsilon)$. Essa quantidade descreve como os elétrons de energia ε propagam-se a partir de uma origem pontual x' em direção a outra posição x . Essa função (ou propagador) é definida como

$$G_0(x, x', \varepsilon) = \lim_{\eta \rightarrow 0} \int d^3\vec{k} \frac{\Psi_{\mathbf{k}}(x) \Psi_{\mathbf{k}}^*(x')}{\varepsilon + i\eta - E(\mathbf{k})}, \quad (1)$$

onde $\Psi_{\mathbf{k}}(x)$ é a função de onda do elétron e η é uma quantidade infinitesimal positiva. A parte imaginária da 1 representa uma superposição de todas as funções de onda com energia $E(\mathbf{k})$. Assim, o propagador está diretamente associada a geometria do espaço recíproco.

Para elétrons livres, a superfície de Fermi é uma esfera com raio dado pelo módulo do vetor de onda de Fermi \mathbf{k}_F , cuja função de Green correspondente é uma onda esférica com decaimento da forma $|x - x'|^{-1}$. O “electron focusing” deve-se a uma superfície de Fermi que difere do caso esférico. No caso limite de uma superfície de Fermi composta por áreas planas, as funções de onda interferem construtivamente em regiões perpendiculares a essas facetas e destrutivamente no resto do espaço. Em contraste com o caso isotrópico, a amplitude dos feixes não decai com o aumento da distância, tal como é o caso da função de Green em uma dimensão. Assim, sempre que os elétrons são emitidos ou espalhados por impurezas, eles não se propagam na forma de onda esférica como no espaço livre (veja 2), mas em vez disso são focalizados em orientações preferenciais (veja 3). Os mesmos são detectáveis a distâncias muito maiores a partir da fonte do que no caso isotrópico.

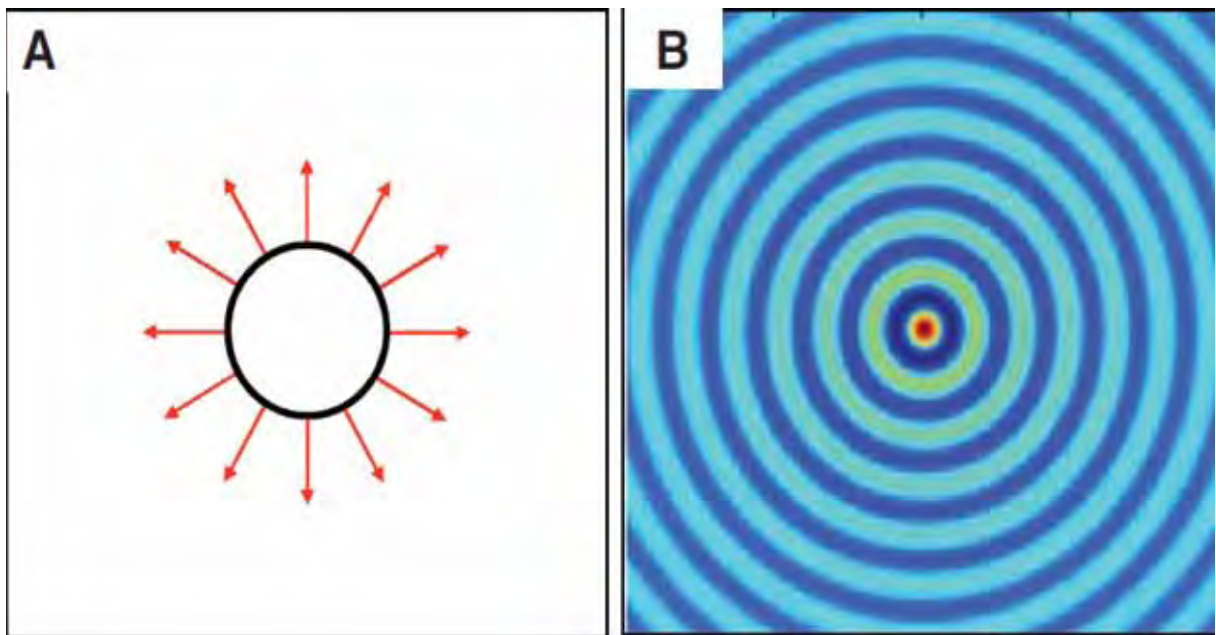
Como exemplo, citemos o cobre, cuja superfície de Fermi é bastante esférica, mas ainda assim possui áreas com curvatura fortemente reduzida. A sua função de onda pode ser calculada considerando-se ondas planas e a dispersão $E(\mathbf{k})$ da banda pode ser obtida pelo método “tight-binding”. É dessa forma que a função de Green pode mostrar a existência do efeito

“electron focusing” . Com o STM, é possível detectar esse fenômeno na densidade de estados $\Delta LDOS(x, \epsilon)$ induzida por uma impureza enterrada no material, dada pela relação

$$\Delta LDOS(x, \epsilon) = -\frac{1}{\pi} \Im \int \int dx_i dx_j G_0(x, x_i, \epsilon) t(x_i, x_j, \epsilon) G_0(x_j, x, \epsilon), \quad (2)$$

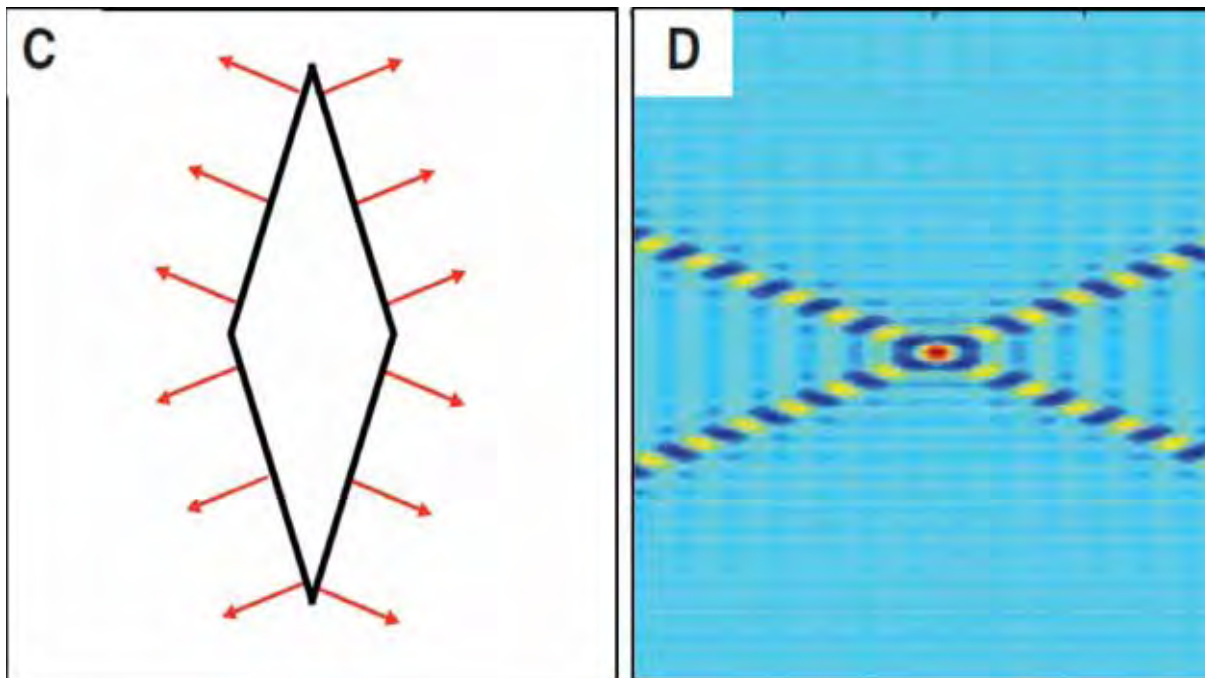
com x, x_i e x_j como posições arbitrárias no sistema e $t \propto \mathcal{G}_{dd}$. Assim, as oscilações da densidade de carga observadas na LDOS dependem fortemente da forma da superfície de Fermi.

Figura 2 – Painel da esquerda: perfil de uma superfície de Fermi esférica (isotrópica). Painel da direita: ondas eletrônicas esféricas espalhadas por uma impureza.



Fonte: Weismann et al. (2009)

Figura 3 – Paineis da esquerda: perfil de uma superfície de Fermi anisotrópica. Paineis da direita: ondas eletrônicas unidimensionais espalhadas em direções preferenciais por uma impureza (efeito “electron focusing”).



Fonte: Weismann et al. (2009)

3 IMPUREZAS MAGNÉTICAS EM METAIS

3.1 HAMILTONIANO DE ANDERSON DE UMA IMPUREZA

Uma impureza em um metal não magnético pode dar origem a um momento magnético localizado quando essa é ocupada por um elétron desemparelhado (metais de transição, terras raras). Anderson (1961) desenvolveu um modelo onde a banda de condução de um metal não magnético é representado por um conjunto de ondas planas. Nesse modelo,

$$\varepsilon_{\mathbf{k}} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} - \varepsilon_F \quad (3)$$

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 $\varepsilon_F = 0$, ε_d torna-se o custo em energia para introduzir o primeiro elétron na impureza. Para adicionar o segundo, com spin contrário conforme o princípio de exclusão de Pauli, o custo adicional fica estabelecido pela energia de repulsão Coulombiana dada por

$$U = \int d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 |\phi_d(\mathbf{r}_1)|^2 \frac{e^2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} |\phi_d(\mathbf{r}_2)|^2. \quad (4)$$

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

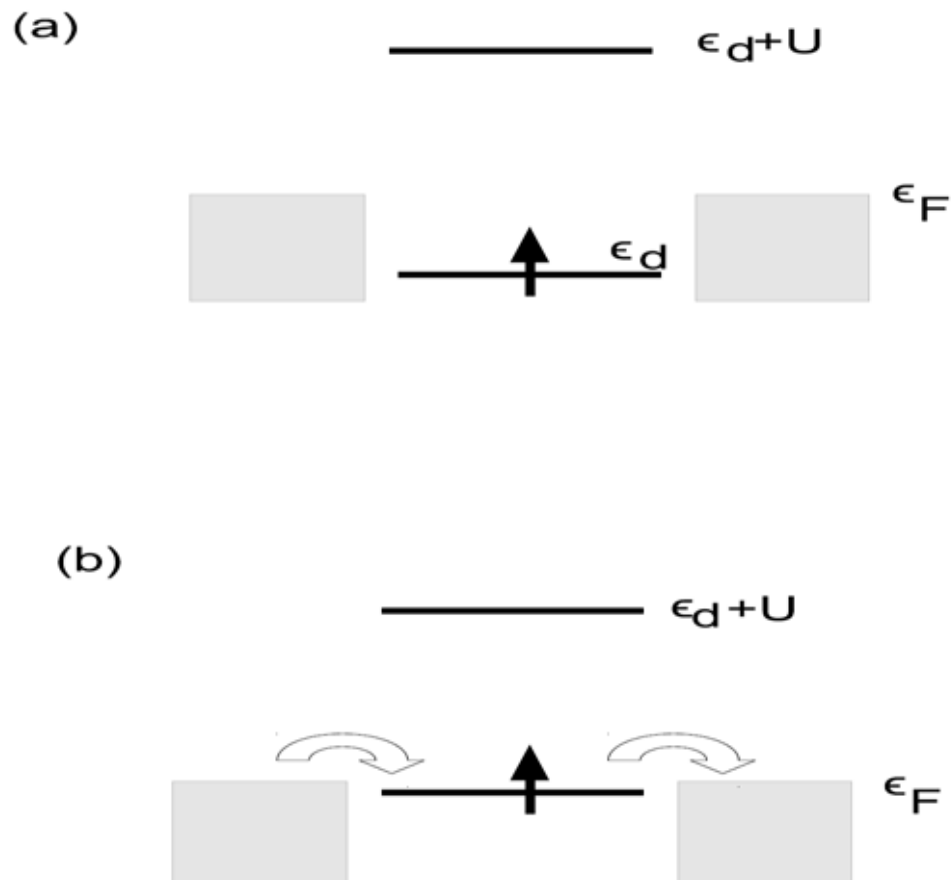
$$H^A = \sum_{\mathbf{k}\sigma} \varepsilon_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger a_{\mathbf{k}\sigma} + \sum_{\sigma} \varepsilon_d n_{d\sigma} + \sum_{\mathbf{k}\sigma} V_{\mathbf{k}d} (a_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger a_{d\sigma} + a_{d\sigma}^\dagger a_{\mathbf{k}\sigma}) + U n_{d\uparrow} n_{d\downarrow}, \quad (5)$$

onde $a_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger$ ($a_{\mathbf{k}\sigma}$) cria (aniquila) elétrons na banda de condução, $a_{d\sigma}^\dagger$ ($a_{d\sigma}$) cria (aniquila) um elétron com spin σ na impureza e $n_{d\sigma} = a_{d\sigma}^\dagger a_{d\sigma}$ 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, o acoplamento 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

$$W = 2\pi \frac{|V_{\mathbf{k}d}|^2 N(\varepsilon_F)}{\hbar} \equiv \frac{2\Delta}{\hbar}, \quad (6)$$

onde $N(\varepsilon_F)$ 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 $\Delta = \pi |V_{\mathbf{k}d}|^2 N(\varepsilon_F)$, a qual leva à hibridização entre a banda de condução e o estado da impureza.

Figura 4 – 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).

Fonte: Elaboração da autora.

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 4(a) e no caso (b), temos o regime conhecido pelo nome de intervalência, o qual não possui solução magnética.

3.2 DENSIDADE DE ESTADOS DA IMPUREZA

Aqui veremos como um momento magnético localizado pode forma-se dentro de um metal. Para esse fim, devemos calcular as ocupações eletrônicas de spins “up” e “down” da impureza. A ocupação eletrônica da impureza é obtida calculando-se a probabilidade de um elétron ser encontrado nessa impureza. Se $|n\rangle$ é um auto estado do Hamiltoniano H^A com energia $\epsilon_{n\sigma}$, então tal probabilidade é dada pelo elemento de matriz $|\langle n\sigma | d\sigma \rangle|^2$, onde $|d\sigma\rangle$

é um estado da impureza. Essa quantidade é diferente de zero como resultado da hibridização Δ .

Portanto, a ocupação de um elétron de spin σ na impureza em $T = 0$ é dada pela integral de sua densidade de estados sobre todos os estados ocupados com energia $\varepsilon \leq \varepsilon_F$, ou seja,

$$\langle n_{d\sigma} \rangle = \int_{-\infty}^{\varepsilon_F} d\varepsilon \rho_{d\sigma}(\varepsilon), \quad (7)$$

onde

$$\rho_{d\sigma}(\varepsilon) = \sum_n \delta(\varepsilon_{n\sigma} - \varepsilon) |\langle n\sigma | d\sigma \rangle|^2 \quad (8)$$

é a densidade de estados da impureza. Aqui para calcular essa quantidade, vamos tratar a interação de Coulomb na aproximação de Hartree-Fock. Primeiro, escrevemos o Hamiltoniano da 5 em uma base diagonal, isto é,

$$H_{HF}^A = \sum_{n\sigma} \varepsilon_{n\sigma} a_{n\sigma}^\dagger a_{n\sigma}, \quad (9)$$

onde

$$a_{n\sigma}^\dagger = \sum_{\mathbf{k}} \langle \mathbf{k}\sigma | n\sigma \rangle a_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger + \langle d\sigma | n\sigma \rangle a_{d\sigma}^\dagger \quad (10)$$

é a combinação linear dos estados da banda de condução com o da impureza. Feito isso, substituímos o termo de interação $U n_{d\uparrow} n_{d\downarrow}$ por $U \langle n_{d\uparrow} \rangle n_{d\downarrow} + U \langle n_{d\downarrow} \rangle n_{d\uparrow}$ na 5, ou seja, renormalizamos a energia da impureza como $E_{d\sigma} = \varepsilon_d + U \langle n_{d-\sigma} \rangle$, onde $-\sigma$ significa spin oposto. Dessa forma, temos

$$H_{HF}^A = \sum_{\sigma} E_{d\sigma} n_{d\sigma} + \sum_{\mathbf{k}\sigma} \varepsilon_{\mathbf{k}} n_{\mathbf{k}\sigma} + \sum_{\mathbf{k}\sigma} V_{\mathbf{k}d} (a_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger a_{d\sigma} + a_{d\sigma}^\dagger a_{\mathbf{k}\sigma}). \quad (11)$$

O critério para a formação do momento magnético localizado é $\langle n_{d\sigma} \rangle \neq \langle n_{d-\sigma} \rangle$ ou de forma equivalente, $E_{d\sigma} \neq E_{d-\sigma}$. A energia $\varepsilon_{n\sigma}$ fica então definida por meio do comutador

$$[H_{HF}^A, a_{n\sigma}^\dagger] = \varepsilon_{n\sigma} a_{n\sigma}^\dagger. \quad (12)$$

Para encontrar o comutador da 12, devemos usar os seguintes comutadores

$$[H_{HF}^A, a_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger] = \sum_{\mathbf{k}'\sigma} \varepsilon_{\mathbf{k}'} [a_{\mathbf{k}'\sigma}^\dagger a_{\mathbf{k}'\sigma}, a_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger] + \sum_{\mathbf{k}'\sigma} V_{\mathbf{k}'d} [(a_{\mathbf{k}'\sigma}^\dagger a_{d\sigma} + a_{d\sigma}^\dagger a_{\mathbf{k}'\sigma}), a_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger] = \varepsilon_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger + V_{\mathbf{k}d} a_{d\sigma}^\dagger \quad (13)$$

e

$$[H_{HF}^A, a_{d\sigma}^\dagger] = E_{d\sigma} a_{d\sigma}^\dagger + \sum_{\mathbf{k}} V_{\mathbf{k}d} a_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger. \quad (14)$$

Como consequência, temos

$$\begin{aligned}
[H_{HF}^A, a_{n\sigma}^\dagger] &= \varepsilon_{n\sigma} \sum_{\mathbf{k}} \langle \mathbf{k}\sigma | n\sigma \rangle a_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger + \langle d\sigma | n\sigma \rangle a_{d\sigma}^\dagger \\
&= \sum_{\mathbf{k}} \langle \mathbf{k}\sigma | n\sigma \rangle (\varepsilon_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger + V_{\mathbf{k}d} a_{d\sigma}^\dagger) \\
&\quad + \langle d\sigma | n\sigma \rangle \left(E_{d\sigma} a_{d\sigma}^\dagger + \sum_{\mathbf{k}} V_{\mathbf{k}d} a_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger \right)
\end{aligned} \tag{15}$$

e portanto, o seguinte sistema dado por

$$\varepsilon_{n\sigma} \langle \mathbf{k}\sigma | n\sigma \rangle = \varepsilon_{\mathbf{k}} \langle n\sigma | \mathbf{k}\sigma \rangle + V_{\mathbf{k}d} \langle d\sigma | n\sigma \rangle \tag{16}$$

e

$$\varepsilon_{n\sigma} \langle n\sigma | d\sigma \rangle = E_{d\sigma} \langle d\sigma | n\sigma \rangle + \sum_{\mathbf{k}} \langle \mathbf{k}\sigma | n\sigma \rangle V_{\mathbf{k}d}. \tag{17}$$

Para resolvê-lo, precisamos introduzir

$$\delta(\varepsilon - \varepsilon_{n\sigma}) = \frac{1}{\pi} \frac{\Gamma}{(\varepsilon - \varepsilon_{n\sigma})^2 + \Gamma^2} = -\frac{1}{\pi} \Im \frac{1}{\varepsilon - \varepsilon_{n\sigma} + i\Gamma} \tag{18}$$

como representação para a função delta de Dirac, onde $\Gamma \rightarrow 0$ e \Im representa a parte imaginária. Assim, ao substituir a 18 na 8, obtemos a representação espectral

$$\rho_{d\sigma}(\varepsilon) = -\frac{1}{\pi} \Im \sum_n \frac{|\langle n\sigma | d\sigma \rangle|^2}{\varepsilon - \varepsilon_{n\sigma} + i\Gamma} \tag{19}$$

para a densidade de estados da impureza. Agora precisamos encontrar o elemento de matriz $|\langle n\sigma | d\sigma \rangle|^2$. Para esse fim, introduzimos o formalismo da função de Green, aqui expressa em duas notações:

$$G(E + i\Gamma) = \sum_n \frac{|n\rangle \langle n|}{E + i\Gamma - \varepsilon_{n\sigma}} \tag{20}$$

e

$$\sum_{\beta} (E + i\Gamma - H)_{\alpha\beta} G_{\beta\mu} = \delta_{\alpha\mu}, \tag{21}$$

onde α, β , e μ indexam os estados da banda de condução e da impureza. Note que 20 ao ser combinada com 19, nos permite escrever

$$\rho_{d\sigma}(\varepsilon) = -\frac{1}{\pi} \Im \langle d\sigma | G(E + i\Gamma) | d\sigma \rangle = -\frac{1}{\pi} \Im \{G_{dd}^{\sigma}(\varepsilon)\}. \tag{22}$$

Assim sendo, o problema reduz-se ao cálculo da função de Green G_{dd}^σ . Então fazemos $\alpha = \mu = d\sigma$ na 21 para obter

$$(\varepsilon + i\Gamma - E_{d\sigma})G_{dd}^\sigma - \sum_{\mathbf{k}} V_{d\mathbf{k}} G_{\mathbf{k}d}^\sigma = 1, \quad (23)$$

depois $\alpha = k\sigma$ e $\mu = d\sigma$, resultando em

$$(\varepsilon + i\Gamma - \varepsilon_{\mathbf{k}})G_{\mathbf{k}d}^\sigma - V_{\mathbf{k}d}G_{dd}^\sigma = 0. \quad (24)$$

Resolvendo o sistema composto pela 23 e 24 para G_{dd}^σ , encontramos

$$G_{dd}^\sigma(\varepsilon + i\Gamma) = \frac{1}{\varepsilon + i\Gamma - E_{d\sigma} - \Sigma(\varepsilon)}, \quad (25)$$

com auto energia definida por

$$\Sigma(\varepsilon) = \sum_{\mathbf{k}} \frac{|V_{\mathbf{k}d}|^2}{\varepsilon + i\Gamma - \varepsilon_{\mathbf{k}}} = -i\Delta,$$

onde introduzimos o parâmetro de Anderson $\Delta = \pi V^2 N(\varepsilon_F)$ na aproximação de banda chata (densidade de estados constante), acoplamento $V_{\mathbf{k}d} = V$ também constante e

$$\wp \sum_{\mathbf{k}} \frac{|V_{\mathbf{k}d}|^2}{\varepsilon - \varepsilon_{\mathbf{k}}} = 0$$

no limite de banda larga, com \wp como o valor principal. Finalmente, a função de Green da impureza torna-se

$$G_{dd}^\sigma(\varepsilon + i\Gamma) = \frac{1}{\varepsilon + i\Gamma - E_{d\sigma} + i\Delta} \quad (26)$$

e sua densidade de estados

$$\rho_{d\sigma}(\varepsilon) = -\frac{1}{\pi} \Im \{G_{dd}^\sigma(\varepsilon)\} = \frac{1}{\pi} \frac{\Delta}{(\varepsilon - E_{d\sigma})^2 + \Delta^2}, \quad (27)$$

de acordo com a 22. Note que o parâmetro de Anderson 2Δ dividido por \hbar representa a taxa de transição de tunelamento de elétrons da impureza para a banda de condução, como predito pela regra de ouro de Fermi dada pela 6. Dessa forma, $2\hbar/\Delta$ é o tempo de vida de um elétron no nível da impureza.

Para concluir, ao substituir a 27 na 7, encontramos as seguintes expressões para as ocupações eletrônicas da impureza,

$$\langle n_{d\uparrow} \rangle = \frac{1}{\pi} \cot^{-1} \left(\frac{\varepsilon_d + U \langle n_{d\downarrow} \rangle}{\Delta} \right) \quad (28)$$

e

$$\langle n_{d\downarrow} \rangle = \frac{1}{\pi} \cot^{-1} \left(\frac{\varepsilon_d + U \langle n_{d\uparrow} \rangle}{\Delta} \right). \quad (29)$$

Essas são as equações centrais do método de Hartree-Fock. Para favorecer a formação do momento magnético localizado, devemos encontrar soluções em que $\langle n_{d\uparrow} \rangle \neq \langle n_{d\downarrow} \rangle$, pois

somente nesse caso a impureza é magnética. Se $U = 0$, a solução é $\langle n_{d\uparrow} \rangle = \langle n_{d\downarrow} \rangle$. P. W. Anderson mostrou que uma solução magnética existe no intervalo $\Delta/U \ll 1$.

Nesta dissertação, iremos além da aproximação de Hatree-Fock para calcular $\langle n_{d\uparrow} \rangle$ e $\langle n_{d\downarrow} \rangle$. Usaremos o método Hubbard I Haug e Antti-Pekka (1996) no sistema de duas impurezas para $T \neq 0$.

4 SISTEMAS DE DUAS IMPUREZAS NA PRESENÇA DE UM STM

4.1 MODELO DE ANDERSON DE DUAS IMPUREZAS

A fim de investigar a LDOS de metais ferromagnéticos, representamos uma ponta de STM fracamente ligada ao metal hospedeiro hibridizado a um par de impurezas lateralmente acopladas, conforme descrito na 1. Os sistemas investigados são descritos pelo Hamiltoniano de Anderson de duas impurezas

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{TIAM} = & \sum_{\vec{k}\sigma} \varepsilon_{\vec{k}\sigma} c_{\vec{k}\sigma}^\dagger c_{\vec{k}\sigma} + \sum_{j\sigma} \varepsilon_{jd\sigma} d_{j\sigma}^\dagger d_{j\sigma} + \sum_j U_j d_{j\uparrow}^\dagger d_{j\uparrow} d_{j\downarrow}^\dagger d_{j\downarrow} \\ & + \sum_{\vec{j}\vec{k}\sigma} \left[\frac{V_{\vec{j}\vec{k}}}{\sqrt{\mathcal{N}}} \phi_{\vec{k}}^* \left(\vec{R}_j \right) c_{\vec{k}\sigma}^\dagger d_{j\sigma} + \frac{V_{\vec{j}\vec{k}}^*}{\sqrt{\mathcal{N}}} \phi_{\vec{k}} \left(\vec{R}_j \right) d_{j\sigma}^\dagger c_{\vec{k}\sigma} \right]. \end{aligned} \quad (30)$$

O gás de elétrons spin-polarizado no hospedeiro é descrito pelo operador $c_{\vec{k}\sigma}^\dagger$ ($c_{\vec{k}\sigma}$) de criação (aniquilação) de um elétron com momento \vec{k} , spin σ e energia $\varepsilon_{\vec{k}\sigma}$, $d_{j\sigma}^\dagger$ ($d_{j\sigma}$) cria (aniquila) um elétron com spin σ no estado ε_{jd} , com $j = 1, 2$ nas impurezas. O terceiro termo da 30 leva em conta a interação de Coulomb U_j na impureza localizada na posição \vec{R}_j . Nos cálculos vamos supor $U_1 = U_2 \rightarrow \infty$ por simplicidade, já que a ocupação das impurezas pode depender fortemente da posição dos níveis $\varepsilon_{jd\sigma}$. Em nossos cálculos, adotamos $\varepsilon_{jd\sigma}$ muito menor do que o nível de Fermi, de modo que o cálculo auto consistente das ocupações produzam valores próximos da unidade (ocupação única). Finalmente, os dois últimos termos misturam o contínuo de estados do metal hospedeiro e os níveis $\varepsilon_{jd\sigma}$. Essa hibridização ocorre na impureza \vec{R}_j via acoplamento hospedeiro-impureza $V_{\vec{j}\vec{k}}$ modulado pela onda plana $\phi_{\vec{k}} \left(\vec{R}_j \right) = e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}_j}$. \mathcal{N} é o número de estados de condução. O hospedeiro ferromagnético é considerado como um reservatório de elétrons spin-polarizado, caracterizado pela polarização de spins

$$P = \frac{\rho_{FM\uparrow} - \rho_{FM\downarrow}}{\rho_{FM\uparrow} + \rho_{FM\downarrow}}, \quad (31)$$

onde

$$\rho_{FM\sigma} = \rho_0(1 + \sigma P) \quad (32)$$

é a densidade de estados do metal no potencial químico na descrição de Stoner (1939) (SOUZA; EGUES; JAUHO, 2004) para o magnetismo itinerante, expresso em termos da densidade ρ_0 para o caso $P = 0$.

4.2 LDOS PARA SISTEMAS SPIN-POLARIZADOS

Para obter a LDOS do metal, introduzimos a seguinte função de Green retardada

$$\mathcal{G}_\sigma(t, \vec{R}) = -\frac{i}{\hbar} \theta(t) \mathcal{L}_{FM}^{-1} \sum_n e^{-\beta E_n} \langle n | \left[\tilde{\Psi}_\sigma(\vec{R}, t), \tilde{\Psi}_\sigma^\dagger(\vec{R}, 0) \right]_+ | n \rangle \quad (33)$$

no espaço dos tempos, onde

$$\tilde{\Psi}_\sigma(\vec{R}) = \frac{1}{\sqrt{\mathcal{N}}} \sum_{\vec{k}} \phi_{\vec{k}}(\vec{R}) c_{\vec{k}\sigma} \quad (34)$$

é o operador fermiônico que descreve o estado quântico do metal localmente abaixo da ponta do STM, \hbar é a constante de Planck dividida por 2π , $\theta(t)$ é a função degrau no instante t , $\beta = 1/k_B T$ com k_B como a constante de Boltzmann e T a temperatura do sistema, \mathcal{L}_{FM} e $|n\rangle$ são a função de partição e o auto estado do sistema de muitos corpos do Hamiltoniano (30) respectivamente, e $[\dots, \dots]_+$ é o anticomutador para a 34 avaliado em tempos distintos. Da 33, a LDOS dependente do spin σ e de \vec{R} [ver 1], sendo dada por

$$\rho_{LDOS}^\sigma(\varepsilon, R) = -\frac{1}{\pi} \text{Im} \left\{ \tilde{\mathcal{G}}_\sigma(\varepsilon^+, \vec{R}) \right\}, \quad (35)$$

onde $\tilde{\mathcal{G}}_\sigma(\varepsilon^+, \vec{R})$ é a transformada de Fourier de $\mathcal{G}_\sigma(t, \vec{R})$, $\varepsilon^+ = \varepsilon + i\eta$ e $\eta \rightarrow 0^+$.

Para obter uma expressão analítica para a LDOS, aplicamos a equação de movimento na 33. Assim, substituímos a 34 na 33 e iniciamos o procedimento com

$$\mathcal{G}_\sigma(t, \vec{R}) = \frac{1}{\mathcal{N}_\sigma} \sum_{\vec{k}\vec{q}} \phi_{\vec{k}\sigma}(\vec{R}) \phi_{\vec{q}\sigma}^*(\vec{R}) \mathcal{G}_{c_{\vec{k}\sigma} c_{\vec{q}\sigma}}^\sigma(t), \quad (36)$$

a qual depende da função de Green

$$\mathcal{G}_{c_{\vec{k}\sigma} c_{\vec{q}\sigma}}^\sigma(t) = -\frac{i}{\hbar} \theta(t) \mathcal{L}_{FM}^{-1} \sum_n e^{-\beta E_n} \langle n | \left[c_{\vec{k}\sigma}(t), c_{\vec{q}\sigma}^\dagger(0) \right]_+ | n \rangle. \quad (37)$$

Para encontrá-la, fazemos

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \mathcal{G}_{c_{\vec{k}\sigma} c_{\vec{q}\sigma}}^\sigma(t) &= -\frac{i}{\hbar} \delta(t) \mathcal{L}_{FM}^{-1} \sum_n e^{-\beta E_n} \langle n | \left[c_{\vec{k}\sigma}(t), c_{\vec{q}\sigma}^\dagger(0) \right]_+ | n \rangle + \left(-\frac{i}{\hbar} \right) \varepsilon_{\vec{k}\sigma} \mathcal{G}_{c_{\vec{k}\sigma} c_{\vec{q}\sigma}}^\sigma(t) \\ &+ \left(-\frac{i}{\hbar} \right) \frac{1}{\sqrt{\mathcal{N}}} \sum_j V_{j\vec{k}} \phi_{\vec{k}}^*(\vec{R}_j) \mathcal{G}_{d_{j\sigma} c_{\vec{q}\sigma}}^\sigma(t), \end{aligned} \quad (38)$$

onde utilizamos a equação de Heisenberg

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} c_{\vec{k}\sigma}(t) = [c_{\vec{k}\sigma}, \mathcal{H}_{TIAM}] = \varepsilon_{\vec{k}\sigma} c_{\vec{k}\sigma}(t) + \frac{1}{\sqrt{\mathcal{N}}} \sum_j V_{j\vec{k}} \phi_{\vec{k}}^*(\vec{R}_j) d_{j\sigma}(t), \quad (39)$$

e os seguintes comutadores,

$$\begin{aligned}
 \left[c_{\vec{k}\sigma}, \sum_{\vec{q}\bar{\sigma}} \varepsilon_{\vec{q}\bar{\sigma}} c_{\vec{q}\bar{\sigma}}^\dagger c_{\vec{q}\bar{\sigma}} \right] &= \sum_{\vec{q}\bar{\sigma}} \varepsilon_{\vec{q}\bar{\sigma}} \left[c_{\vec{k}\sigma}, c_{\vec{q}\bar{\sigma}}^\dagger c_{\vec{q}\bar{\sigma}} \right] = \sum_{\vec{q}\bar{\sigma}} \varepsilon_{\vec{q}\bar{\sigma}} \left(c_{\vec{k}\sigma} c_{\vec{q}\bar{\sigma}}^\dagger c_{\vec{q}\bar{\sigma}} - c_{\vec{q}\bar{\sigma}}^\dagger c_{\vec{q}\bar{\sigma}} c_{\vec{k}\sigma} \right) \\
 &= \sum_{\vec{q}\bar{\sigma}} \varepsilon_{\vec{q}\bar{\sigma}} \left(\delta_{kq} \delta_{\sigma\bar{\sigma}} c_{\vec{q}\bar{\sigma}} - c_{\vec{q}\bar{\sigma}}^\dagger c_{\vec{k}\sigma} c_{\vec{q}\bar{\sigma}} - c_{\vec{q}\bar{\sigma}}^\dagger c_{\vec{q}\bar{\sigma}} c_{\vec{k}\sigma} \right) \\
 &= \sum_{\vec{q}\bar{\sigma}} \varepsilon_{\vec{q}\bar{\sigma}} \left(\delta_{kq} \delta_{\sigma\bar{\sigma}} c_{\vec{q}\bar{\sigma}} + c_{\vec{q}\bar{\sigma}}^\dagger c_{\vec{q}\bar{\sigma}} c_{\vec{k}\sigma} - c_{\vec{q}\bar{\sigma}}^\dagger c_{\vec{q}\bar{\sigma}} c_{\vec{k}\sigma} \right) \\
 &= \sum_{\vec{q}\bar{\sigma}} \varepsilon_{\vec{q}\bar{\sigma}} (\delta_{kq} \delta_{\sigma\bar{\sigma}} c_{\vec{q}\bar{\sigma}}) = \varepsilon_{\vec{k}\sigma} c_{\vec{k}\sigma} (t)
 \end{aligned} \tag{40}$$

e

$$\begin{aligned}
 &\left[c_{\vec{k}\sigma}, \sum_{\vec{j}\bar{\sigma}\vec{q}} \frac{1}{\sqrt{\mathcal{N}}} V_{\vec{j}} \phi_{\vec{k}}^* (\vec{R}_{\vec{j}}) c_{\vec{q}\bar{\sigma}}^\dagger d_{\vec{j}\bar{\sigma}} \right] + \left[c_{\vec{k}\sigma}, \sum_{\vec{j}\bar{\sigma}\vec{q}} \frac{1}{\sqrt{\mathcal{N}}} V_{\vec{j}}^* \phi_{\vec{k}} (\vec{R}_{\vec{j}}) d_{\vec{j}\bar{\sigma}}^\dagger c_{\vec{q}\bar{\sigma}} \right] \\
 &= \sum_{\vec{j}\bar{\sigma}\vec{q}} \frac{1}{\sqrt{\mathcal{N}}} V_{\vec{j}} \phi_{\vec{k}}^* (\vec{R}_{\vec{j}}) \times \left(c_{\vec{k}\sigma} c_{\vec{q}\bar{\sigma}}^\dagger d_{\vec{j}\bar{\sigma}} - c_{\vec{q}\bar{\sigma}}^\dagger d_{\vec{j}\bar{\sigma}} c_{\vec{k}\sigma} \right) \\
 &+ \sum_{\vec{j}\bar{\sigma}\vec{q}} \frac{1}{\sqrt{\mathcal{N}}} V_{\vec{j}}^* \phi_{\vec{k}} (\vec{R}_{\vec{j}}) \times \left(c_{\vec{k}\sigma} d_{\vec{j}\bar{\sigma}}^\dagger c_{\vec{q}\bar{\sigma}} - d_{\vec{j}\bar{\sigma}}^\dagger c_{\vec{q}\bar{\sigma}} c_{\vec{k}\sigma} \right) \\
 &= \sum_{\vec{j}\bar{\sigma}\vec{q}} \frac{1}{\sqrt{\mathcal{N}}} V_{\vec{j}} \phi_{\vec{k}}^* (\vec{R}_{\vec{j}}) \times \left(\delta_{kq} \delta_{\sigma\bar{\sigma}} d_{\vec{j}\bar{\sigma}} - c_{\vec{q}\bar{\sigma}}^\dagger c_{\vec{k}\sigma} d_{\vec{j}\bar{\sigma}} - c_{\vec{q}\bar{\sigma}}^\dagger d_{\vec{j}\bar{\sigma}} c_{\vec{k}\sigma} \right) \\
 &+ \sum_{\vec{j}\bar{\sigma}\vec{q}} \frac{1}{\sqrt{\mathcal{N}}} V_{\vec{j}}^* \phi_{\vec{k}} (\vec{R}_{\vec{j}}) \times \left(d_{\vec{j}\bar{\sigma}}^\dagger c_{\vec{q}\bar{\sigma}} c_{\vec{k}\sigma} - d_{\vec{j}\bar{\sigma}}^\dagger c_{\vec{q}\bar{\sigma}} c_{\vec{k}\sigma} \right) \\
 &= \sum_{\vec{j}\bar{\sigma}\vec{q}} \frac{1}{\sqrt{\mathcal{N}}} V_{\vec{j}} \phi_{\vec{k}}^* (\vec{R}_{\vec{j}}) \times \left(\delta_{kq} \delta_{\sigma\bar{\sigma}} d_{\vec{j}\bar{\sigma}} + c_{\vec{q}\bar{\sigma}}^\dagger d_{\vec{j}\bar{\sigma}} c_{\vec{k}\sigma} - c_{\vec{q}\bar{\sigma}}^\dagger d_{\vec{j}\bar{\sigma}} c_{\vec{k}\sigma} \right) \\
 &= \sum_j \frac{1}{\sqrt{\mathcal{N}}} V_{j\vec{k}} \phi_{\vec{k}}^* (\vec{R}_j) d_{j\sigma}(t).
 \end{aligned} \tag{41}$$

Dessa forma, fazemos a transformada de Fourier da 40 para obter

$$\mathcal{G}_{c_{\vec{k}}^\dagger c_{\vec{q}}}^\sigma(\varepsilon^+) = \frac{\delta_{\vec{k}\vec{q}}}{\varepsilon^+ - \varepsilon_{\vec{k}\sigma}} + \frac{1}{\sqrt{\mathcal{N}_\sigma}} \sum_j \frac{V_{j\vec{k}} \phi_{\vec{k}}^* (\vec{R}_j)}{\varepsilon^+ - \varepsilon_{\vec{k}\sigma}} \mathcal{G}_{d_{j\vec{q}}}^\sigma(\varepsilon^+), \tag{42}$$

a qual gerou outra função de Green. Precisamos então encontrar $\mathcal{G}_{d_{j\vec{q}}}^\sigma(\varepsilon^+)$. Para isso, definimos a função de Green avançada

$$\mathcal{F}_{d_{j\vec{q}}}^\sigma(t) = \frac{i}{\hbar} \theta(-t) \mathcal{L}_{FM}^{-1} \sum_n e^{-\beta E_n} \langle n | \left[d_{j\sigma}^\dagger(0), c_{\vec{q}\sigma}(t) \right]_+ | n \rangle, \tag{43}$$

cuja derivada parcial com respeito ao tempo é

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial}{\partial t} \mathcal{F}_{d_{j\vec{q}}}^\sigma(t) &= -\frac{i}{\hbar} \delta(t) \mathcal{L}_{FM}^{-1} \sum_n e^{-\beta E_n} \langle n | \left[d_{j\sigma}^\dagger(0), c_{\vec{q}\sigma}(t) \right]_+ | n \rangle - \frac{i}{\hbar} \varepsilon_{\vec{q}\sigma} \mathcal{F}_{d_{j\vec{q}}}^\sigma(t) \\
 &+ \left(-\frac{i}{\hbar} \right) \frac{1}{\sqrt{\mathcal{N}}} \sum_l V_{l\vec{q}} \phi_{\vec{q}}^* (\vec{R}_l) \mathcal{F}_{d_{j\vec{l}}}^\sigma(t),
 \end{aligned} \tag{44}$$

onde usamos a 39 trocando-se $\vec{k} \leftrightarrow \vec{q}$. Assim, a transformada de Fourier torna-se

$$\varepsilon^- \tilde{\mathcal{F}}_{d_j c_{\vec{q}}}^{\sigma}(\varepsilon^-) = \varepsilon_{\vec{q}\sigma} \tilde{\mathcal{F}}_{d_j c_{\vec{q}}}^{\sigma}(\varepsilon^-) + \frac{1}{\sqrt{\mathcal{N}}} \sum_l V_{l\vec{q}} \phi_{\vec{q}}^*(\vec{R}_l) \tilde{\mathcal{F}}_{d_j d_l}^{\sigma}(\varepsilon^-), \quad (45)$$

com $\varepsilon^- = \varepsilon - i\eta$. Usando a propriedade

$$\tilde{\mathcal{G}}_{d_j c_{\vec{q}}}^{\sigma}(\varepsilon^+) = \left\{ \tilde{\mathcal{F}}_{d_j c_{\vec{q}}}^{\sigma}(\varepsilon^-) \right\}^{\dagger}, \quad (46)$$

obtemos

$$\varepsilon^+ \tilde{\mathcal{G}}_{d_j c_{\vec{q}}}^{\sigma}(\varepsilon^+) = \varepsilon_{\vec{q}\sigma} \tilde{\mathcal{G}}_{d_j c_{\vec{q}}}^{\sigma}(\varepsilon^+) + \frac{1}{\sqrt{\mathcal{N}}} \sum_l V_{l\vec{q}}^* \phi_{\vec{q}}(\vec{R}_l) \tilde{\mathcal{G}}_{d_j d_l}^{\sigma}(\varepsilon^+) \quad (47)$$

e portanto

$$\tilde{\mathcal{G}}_{d_j c_{\vec{q}}}^{\sigma}(\varepsilon^+) = \frac{1}{\sqrt{\mathcal{N}}} \sum_l \frac{V_{l\vec{q}}^* \phi_{\vec{q}}(\vec{R}_l)}{\varepsilon^+ - \varepsilon_{\vec{q}\sigma}} \tilde{\mathcal{G}}_{d_j d_l}^{\sigma}(\varepsilon^+). \quad (48)$$

Substituindo a 48 na 42 e por fim na 36, encontramos a função de Green no espaço das energias

$$\begin{aligned} \tilde{\mathcal{G}}_{\sigma}(\varepsilon^+, R) &= \frac{1}{\mathcal{N}} \sum_{\vec{k}} \frac{|\phi_{\vec{k}}(\vec{R})|^2}{\varepsilon^+ - \varepsilon_{\vec{k}\sigma}} + (\pi\rho_0)^2 \sum_j (q_{j\sigma} - iA_{j\sigma}) (q_j - iA_{j\sigma}) \tilde{\mathcal{G}}_{d_j d_j}^{\sigma}(\varepsilon) \\ &\quad + (\pi\rho_0)^2 \sum_{j \neq l} (q_{j\sigma} - iA_{j\sigma}) (q_{l\sigma} - iA_{l\sigma}) \tilde{\mathcal{G}}_{d_j d_l}^{\sigma}(\varepsilon). \end{aligned} \quad (49)$$

Ressaltamos que a parte imaginária do primeiro termo da 49 dá a densidade de estados do hospedeiro sem impurezas (32) e os demais termos descrevem as contribuições das impurezas, onde

$$q_{j\sigma} = (\pi\rho_0)^{-1} \frac{1}{\mathcal{N}} \sum_{\vec{k}} \frac{V_{j\vec{k}} \phi_{\vec{k}}^*(\vec{R}_j) \phi_{\vec{k}}(\vec{R})}{\varepsilon - \varepsilon_{\vec{k}\sigma}} \quad (50)$$

é o parâmetro de Fano devido ao acoplamento $V_{j\vec{k}}$ entre o metal e uma dada impureza. Como veremos, tal fator determinará a interferência quântica originada dos elétrons que viajam através da banda de condução ferromagnética que tunelam para a impureza e retornam para a banda com aqueles que não realizam tal trajetória. A definição da 50 está de acordo com a teoria de Fano (FANO, 1961; MIROSHNICHENKO; FLACH; KIVSHAR, 2010) e leva a padrões de interferência na LDOS. Além disso, reconhecemos

$$A_{j\sigma} = \rho_0^{-1} \frac{1}{\mathcal{N}} \sum_{\vec{k}} V_{j\vec{k}} \phi_{\vec{k}}^*(\vec{R}_j) \phi_{\vec{k}}(\vec{R}) \delta(\varepsilon - \varepsilon_{\vec{k}\sigma}) = |A_{j\sigma}| e^{i\alpha_{j\sigma}} \quad (51)$$

como uma expressão que chamamos função de Friedel, pois gera oscilações de Friedel na LDOS. No final, a função de Green $\tilde{\mathcal{G}}_{\sigma}(\varepsilon^+, R)$, de fato, depende de $\tilde{\mathcal{G}}_{d_j d_j}^{\sigma}(\varepsilon)$ e da função de

Green mista $\tilde{\mathcal{G}}_{d_j d_l}^\sigma(\varepsilon)$. Finalmente, a partir da 35 e da 49, a LDOS do sistema ferromagnético pode ser apresentada como

$$\begin{aligned} \rho_{LDOS}^\sigma(\varepsilon, R) &= \rho_{FM\sigma} + \pi\rho_0^2 \sum_j \left[\left(|A_{j\sigma}|^2 - q_{j\sigma}^2 \right) \text{Im} \left\{ \tilde{\mathcal{G}}_{d_j d_j}^\sigma(\varepsilon) \right\} + 2q_{j\sigma} |A_{j\sigma}| \right. \\ &\quad \times \left. \text{sen} \left(\alpha_{j\sigma} + \frac{\pi}{2} \right) \text{Re} \left\{ \tilde{\mathcal{G}}_{d_j d_j}^\sigma(\varepsilon) \right\} \right] + \pi\rho_0^2 \sum_{j \neq l} \Delta\rho_{jl\sigma}, \end{aligned} \quad (52)$$

onde

$$\begin{aligned} \Delta\rho_{jl\sigma} &= -q_{j\sigma} q_{l\sigma} \text{Im} \left\{ \tilde{\mathcal{G}}_{d_j d_l}^\sigma(\varepsilon) \right\} + \left[|A_{j\sigma}| q_{l\sigma} \cos \left(\alpha_{j\sigma} + \frac{\pi}{2} \right) \right. \\ &\quad \left. + |A_{j\sigma}| |A_{l\sigma}| \cos(\alpha_{j\sigma} - \alpha_{l\sigma}) - q_{j\sigma} |A_{l\sigma}| \cos \left(\alpha_{l\sigma} + \frac{\pi}{2} \right) \right] \text{Im} \left\{ \tilde{\mathcal{G}}_{d_j d_l}^\sigma(\varepsilon) \right\} \\ &\quad + \left[q_{j\sigma} |A_{l\sigma}| \text{sen} \left(\alpha_{l\sigma} + \frac{\pi}{2} \right) + q_{l\sigma} |A_{j\sigma}| \text{sen} \left(\alpha_{j\sigma} + \frac{\pi}{2} \right) \right. \\ &\quad \left. + |A_j| |A_l| \text{sen}(\alpha_{j\sigma} - \alpha_{l\sigma}) \right] \text{Re} \left\{ \tilde{\mathcal{G}}_{d_j d_l}^\sigma(\varepsilon) \right\}. \end{aligned} \quad (53)$$

O conjunto formado pela 52 e 53 é o principal resultado analítico deste trabalho. Ele descreve a LDOS dependente do spin em hospedeiros ferromagnéticos com duas impurezas em locais distintos \vec{R}_j . Assim, a fórmula da LDOS depende do fator de Fano $q_{j\sigma}$, da função de Friedel $A_{j\sigma}$ e do termo de interferência $\Delta\rho_{jl\sigma}$.

Ressaltamos que a fase $\alpha_{j\sigma}$ é diferente de zero para o sistema do fio quântico. As quantidades $q_{j\sigma}$ e $A_{j\sigma}$, no dispositivo do fio quântico são, de fato, funções que apresentam oscilações não amortecidas com o afastamento da ponta com relação as impurezas. Por outro lado, oscilações amortecidas são verificadas na configuração da superfície metálica. Nesse caso, $\alpha_{j\sigma} = 0$ e $A_{j\sigma}$ torna-se uma função real. Assim, a quantidade $|A_{j\sigma}|$ deve ser lida apenas como $A_{j\sigma}$ na 52 e na 53. Além disso, um meio ferromagnético é caracterizado por dois números de onda de Fermi dependentes do spin $k_{F\uparrow}$ e $k_{F\downarrow}$, os quais são ligeiramente diferentes com uma baixa polarização P . Como resultado, essa característica leva a uma densidade de estados total $\rho_{LDOS}^\uparrow + \rho_{LDOS}^\downarrow$ com batimentos quânticos spin-polarizados que podem ser amortecidos ou não, dependendo da dimensionalidade do sistema.

Em experimentos com STM, em particular dentro do regime de resposta linear e negligenciando os acoplamentos ponta-impurezas, a condutância diferencial $G = G^\uparrow + G^\downarrow$ é a observável medida pela ponta, cuja componente de spin é dada por (SERIDONIO et al., 2012)

$$G^\sigma = \frac{e^2}{h} \pi \Gamma_{tip} \int_{-\infty}^{+\infty} \rho_{LDOS}^\sigma(\varepsilon) \left[-\frac{\partial f}{\partial \varepsilon}(\varepsilon - \phi) \right] d\varepsilon, \quad (54)$$

onde e é a carga do elétron ($e > 0$), $\Gamma_{tip} = 4\pi t^2 \rho_{tip}$ é o acoplamento ponta-hospedeiro expresso em termos do parâmetro de tunelamento t e da densidade de estados ρ_{tip} para a ponta do STM, f é a distribuição de Fermi-Dirac e ϕ é a voltagem aplicada. Para $\phi < 0$, o metal hospedeiro

é uma fonte de elétrons e a ponta é o dreno. Para $\phi > 0$, temos o oposto. Nesta dissertação, definimos a LDOS adimensional

$$LDOS = \frac{\rho_{LDOS}^{\uparrow} + \rho_{LDOS}^{\downarrow}}{\rho_{FM\uparrow} + \rho_{FM\downarrow}} \quad (55)$$

e a polarização de transporte

$$P_T = \frac{G^{\uparrow} - G^{\downarrow}}{G^{\uparrow} + G^{\downarrow}}. \quad (56)$$

4.3 FUNÇÕES DE FANO E DE FRIEDEL

4.3.1 Superfície metálica

Nesta seção calculamos as expressões para o parâmetro de Fano (50) e a função de Friedel (51) no caso da superfície metálica, onde nenhuma manifestação do efeito “electron focusing” ocorre. Esse cálculo foi realizado anteriormente no problema de uma impureza (SERIDONIO et al., 2012) e agora apresentamos uma extensão aplicada ao sistema de duas impurezas. Começamos levando em conta a relação de dispersão linear

$$\varepsilon_{k\sigma} = k_{F\sigma}^{-1} D_{\sigma} (k - k_{F\sigma}), \quad (57)$$

a qual depende da expressão

$$k_{F\downarrow} = \sqrt{\frac{1-P}{1+P}} k_{F\uparrow} \quad (58)$$

determinada a partir da 32 e do fundo da banda $D_{\sigma} = D + \sigma\Delta$, onde D é a meia largura não polarizada e Δ é o parâmetro de Stoner (MARTINEK et al., 2005). Em particular, para uma pequena polarização P , a 58 resulta em números de onda de Fermi de spin “up” e “down” ligeiramente diferentes, e como veremos, em batimentos quânticos spin-polarizados na LDOS.

A fim de resolver a 51, assumimos $\phi_{\vec{k}}(\vec{R}) = e^{ikR\cos\theta_k}$ para a função de onda 2D, usando-se

$$J_0(\xi) = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} e^{i\xi \cos\theta_k} d\theta_k \quad (59)$$

como representação angular da função de Bessel de ordem zero. Assim, no limite de banda larga $|\varepsilon| \ll D_{\sigma}$ e com a densidade de estados não perturbada do hospedeiro

$$\rho_{FM\sigma} = \frac{\mathcal{L}}{\mathcal{N}2\pi} \left\{ k \left(\frac{d\varepsilon_{k\sigma}}{dk} \right)^{-1} \right\}_{k=k_{F\sigma}} \quad (60)$$

na aproximação de banda chata, onde $k_{F\sigma}$ é o número de onda de Fermi dependente do spin, \mathcal{S} é a área elementar do sistema no espaço recíproco e fazendo-se $V_{\vec{k}j} = V$, obtemos a quantidade

$$A_{j\sigma} = \frac{\rho_{FM\sigma}}{\rho_0} V J_0(k_{F\sigma} \tilde{R}) \equiv A_{j\sigma}^{2D}, \quad (61)$$

a qual chamamos de função de Friedel, com $\tilde{R} = |\vec{R} - \vec{R}_j|$ como a coordenada relativa da ponta do STM com respeito à impureza j . Observe que, de acordo com a 51, a fase $\alpha_{j\sigma}$ é igual a zero e a 61 é uma função real. Para o parâmetro de Fano, começamos com a função de Green

$$\bar{\mathcal{G}}_{j\sigma} = \frac{1}{\mathcal{N}} \sum_{\vec{k}} \frac{V_{j\vec{k}} \phi_{\vec{k}}^*(\vec{R}_j) \phi_{\vec{k}}(\vec{R})}{\varepsilon - \varepsilon_{\vec{k}\sigma} - i\eta}, \quad (62)$$

onde assumimos as dependências com o spin e a energia na forma Lorentziana

$$V_{\vec{k}j\sigma} = V \frac{\Delta^2}{\Delta^2 + \varepsilon_{\vec{k}\sigma}^2}, \quad (63)$$

a fim de obter uma solução analítica para $q_{j\sigma}$ por meio de um procedimento de regularização (SERIDONIO et al., 2012). Depois, tomamos o limite $\Delta \gg |\varepsilon_{k\sigma}|$ para mostrar que a 63 recupera o caso $V_{j\vec{k}\sigma} = V$. Assim, podemos escrever as identidades

$$q_{j\sigma} = \frac{1}{\pi \rho_0} \text{Re} \{ \bar{\mathcal{G}}_{j\sigma} \} \equiv q_{j\sigma}^{2D} \quad (64)$$

e

$$A_{j\sigma}^{2D} = \frac{1}{\pi \rho_0} \text{Im} \{ \bar{\mathcal{G}}_{j\sigma} \}, \quad (65)$$

que permitem fechar o cálculo. Note que a 64 e a 65 implicam na relação

$$q_{j\sigma}^{2D} = \frac{1}{\pi \rho_0} \bar{\mathcal{G}}_{j\sigma} - i A_{j\sigma}^{2D}. \quad (66)$$

Como a função de Friedel já é conhecida a partir da 61, a quantidade $\frac{1}{\pi \rho_0} \bar{\mathcal{G}}_{j\sigma}(\varepsilon, R)$ fornece uma relação para o parâmetro de Fano. Assim, podemos escrever

$$\frac{1}{\pi \rho_0} \bar{\mathcal{G}}_{j\sigma} = \frac{1}{2} \frac{\rho_{FM\sigma}}{\rho_0} V \sum_{l=1}^2 \bar{\mathcal{G}}_{jl\sigma}, \quad (67)$$

com $\bar{\mathcal{G}}_{jl\sigma}(\varepsilon, R)$ obedecendo a seguinte representação integral

$$\bar{\mathcal{G}}_{jl\sigma} = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} d\varepsilon_{k\sigma} \frac{\Delta^2}{\Delta^2 + \varepsilon_{k\sigma}^2} \frac{1}{\varepsilon - \varepsilon_{k\sigma} - i\eta} H_0^{(l)}(k\tilde{R}), \quad (68)$$

onde utilizamos a 57 e as funções de Hankel $H_0^{(1)}(\xi) = J_0(\xi) + iY_0(\xi)$ e $H_0^{(2)}(\xi) = J_0(\xi) - iY_0(\xi)$. Na 68, a integral $\bar{\mathcal{G}}_{jl\sigma}$ deve ser calculada no sentido anti-horário ao longo de um

semicírculo na metade superior do plano complexo, o qual inclui o pólo simples $\varepsilon_{k\sigma} = +i\Delta$. Aplicando o teorema dos resíduos, encontramos

$$\bar{\mathcal{G}}_{j1\sigma} = H_0^{(1)}(k_\Delta \tilde{R}) \frac{\Delta}{\varepsilon - i\Delta}, \quad (69)$$

com $k_\Delta = k_{F\sigma}(1 + i\frac{\Delta}{D_\sigma})$. Para a determinação de $\bar{\mathcal{G}}_{j2\sigma}$, usamos um contorno no sentido horário ao longo de um semicírculo no plano inferior, incluindo os pólos $\varepsilon_{k\sigma} = \varepsilon - i\eta$ e $\varepsilon_{k\sigma} = -i\Delta$. Assim, temos

$$\bar{\mathcal{G}}_{j2\sigma} = 2iH_0^{(2)}(k_\varepsilon \tilde{R}) \frac{\Delta^2}{\Delta^2 + \varepsilon^2} + \frac{\Delta}{\varepsilon + i\Delta} H_0^{(2)}(k_\Delta^* \tilde{R}), \quad (70)$$

onde $k_\varepsilon = k_{F\sigma}(1 + \frac{\varepsilon}{D_\sigma})$. Usando-se a propriedade $H_0^{(2)}(\xi) = [H_0^{(1)}(\xi^*)]^*$ no segundo termo da 70, a 67 torna-se

$$\frac{1}{\pi\rho_0} \bar{\mathcal{G}}_{j\sigma} = \frac{\rho_{FM\sigma}}{\rho_0} V \left[iH_0^{(2)}(k_\varepsilon \tilde{R}) \frac{\Delta^2}{\Delta^2 + \varepsilon^2} + \text{Re} \left\{ H_0^{(1)}(k_\Delta \tilde{R}) \frac{\Delta}{\varepsilon - i\Delta} \right\} \right], \quad (71)$$

com

$$iH_0^{(2)}(k_\varepsilon \tilde{R}) \frac{\Delta^2}{\Delta^2 + \varepsilon^2} = iJ_0(k_{F\sigma} \tilde{R}) + Y_0(k_{F\sigma} \tilde{R}) \quad (72)$$

e

$$\text{Re} \left\{ H_0^{(1)}(k_\Delta \tilde{R}) \frac{\Delta}{\varepsilon - i\Delta} \right\} = -Y_0(k_{F\sigma} \tilde{R}), \quad (73)$$

onde assumimos $|\varepsilon| \ll D_\sigma$ e $\Delta \ll D_\sigma$ e $\Delta \gg |\varepsilon|$. A fim de garantir o limite $V_{j\vec{k}\sigma} = V$ na 63, substituímos a 61 e a 71 na 66, o que resulta em

$$q_{j\sigma}^{2D} = 0, \quad (74)$$

para qualquer valor de $k_{F\sigma} \tilde{R}$. Isso significa que em 2D, a interferência na LDOS é sempre destrutiva.

4.3.2 Fio quântico

Aqui vamos determinar o parâmetro de Fano da 50 e a função de Friedel da 51 para o caso do fio quântico. Seguindo Weismann (2008), usamos $\phi_{\vec{k}\sigma}(\vec{R}) = e^{ikR}$ como a função de onda na direção de \vec{R} , a qual define a distância da ponta do STM com relação à impureza, onde o efeito “electron focusing” ocorre. Nós também usamos a relação de dispersão

$$\varepsilon_{k\sigma} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} - D_\sigma \quad (75)$$

medida em relação ao fundo da banda D_σ e a densidade de estados não perturbada

$$\rho_{FM\sigma} = \frac{\mathcal{L}}{\mathcal{N}2\pi} \left(\frac{d\varepsilon_{k\sigma}}{dk} \right)_{k_\sigma=k_{F\sigma}}^{-1} = \frac{\mathcal{L}}{\mathcal{N}2\pi} \frac{m}{\hbar^2 k_{F\sigma}} \quad (76)$$

do hospedeiro na aproximação de banda chata, onde m é a massa efetiva do elétron e \mathcal{L} é o comprimento elementar do sistema no espaço recíproco. Adicionalmente, no limite $|\varepsilon| \ll D_\sigma$, encontramos a seguinte função complexa de Friedel

$$A_{j\sigma} = V \frac{\rho_{FM\sigma}}{\rho_0} e^{ik_{F\sigma}\tilde{R}} \equiv A_{j\sigma}^{1D}, \quad (77)$$

a qual é caracterizada por uma fase dependente do spin $\alpha_{j\sigma} = k_{F\sigma}\tilde{R}$. Essa fase resulta em um comportamento oscilatório e não amortecido como uma função de \tilde{R} , também presente em $q_{j\sigma}^{1D}$. Assim, levando em consideração a 75 e a 76, reescrevemos a 50 como

$$q_{j\sigma} = \frac{V}{\pi\rho_0\mathcal{N}} \sum_{\vec{k}} \frac{e^{ik\tilde{R}}}{\varepsilon - \varepsilon_k} = 2V \frac{\mathcal{L}}{\rho_0\mathcal{N}\pi} \frac{m}{\hbar^2} \mathcal{J} \equiv q_{j\sigma}^{1D}, \quad (78)$$

com

$$\mathcal{J} = -\frac{1}{2\pi} \wp \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{e^{ik\tilde{R}}}{k^2 - k_\varepsilon^2} dk = \frac{\text{sen}(k_{F\sigma}\tilde{R})}{2k_{F\sigma}} \quad (79)$$

no limite $|\varepsilon| \ll D_\sigma$ e \wp como o valor principal. Finalmente, obtemos o fator Fano

$$q_{j\sigma}^{1D} = 2V \frac{\rho_{FM\sigma}}{\rho_0} \text{sen}(k_{F\sigma}\tilde{R}), \quad (80)$$

o qual também apresenta uma dependência nos números de onda de Fermi $k_{F\uparrow}$ e $k_{F\downarrow}$ na 77. Aqui eles ainda estão conectados via 58, levando assim a batimentos quânticos spin-polarizados não amortecidos na LDOS. Como a função seno é oscilatória, veremos que a interferência na LDOS alterna entre destrutiva e construtiva.

5 FUNÇÕES DE GREEN DAS IMPUREZAS

5.1 FUNÇÕES DE GREEN DIAGONAIS

Calculamos aqui as funções de Green $\mathcal{G}_{d_j d_l}^\sigma(\varepsilon)$ ($j, l = 1, 2$) diagonais que aparecem na 52 e na 53 para a LDOS. Dessa forma, começamos com

$$\mathcal{G}_{d_j d_j}^\sigma(t) = -\frac{i}{\hbar} \theta(t) \mathcal{L}^{-1} \sum_n e^{-\beta E_n} \langle n | \left[d_{j\sigma}(t), d_{j\sigma}^\dagger(0) \right]_+ | n \rangle, \quad (81)$$

cuja derivada temporal é

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \mathcal{G}_{d_j d_j}^\sigma(t) &= -\frac{i}{\hbar} \delta(t) \mathcal{L}^{-1} \sum_n e^{-\beta E_n} \langle n | \left[d_{j\sigma}(t), d_{j\sigma}^\dagger(0) \right]_+ | n \rangle \\ &\quad + \left(-\frac{i}{\hbar} \right) \theta(t) \mathcal{L}^{-1} \sum_n e^{-\beta E_n} \langle n | \left[\frac{\partial}{\partial t} d_{j\sigma}(t), d_{j\sigma}^\dagger(0) \right]_+ | n \rangle. \end{aligned} \quad (82)$$

Para encontrar uma expressão expressa exclusivamente em termos de funções de Green, devemos utilizar a equação de Heisenberg

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} d_{j\sigma}(t) &= -\frac{i}{\hbar} [d_{j\sigma}, \mathcal{H}_{TIAM}] = -\frac{i}{\hbar} \left\{ \varepsilon_{jd\sigma} d_{j\sigma}(t) + \frac{1}{\sqrt{\mathcal{N}}} \sum_{\vec{k}} V_j^* \phi_{\vec{k}}(\vec{R}_j) c_{\vec{k}\sigma}(t) \right\} \\ &\quad + \left(-\frac{i}{\hbar} \right) U_j d_{j\sigma}(t) d_{j\bar{\sigma}}^\dagger(t) d_{j\bar{\sigma}}(t) \end{aligned} \quad (83)$$

juntamente com os comutadores

$$\begin{aligned} &\left[d_{j\sigma}, \sum_{\vec{j}\vec{\sigma}\vec{k}} \frac{1}{\sqrt{\mathcal{N}}} V_{\vec{j}} \phi_{\vec{k}}^* (\vec{R}_{\vec{j}}) c_{\vec{k}\bar{\sigma}}^\dagger d_{\vec{j}\bar{\sigma}} \right] + \left[d_{j\sigma}, \sum_{\vec{j}\vec{\sigma}\vec{k}} \frac{1}{\sqrt{\mathcal{N}}} V_{\vec{j}}^* \phi_{\vec{k}} (\vec{R}_{\vec{j}}) d_{\vec{j}\bar{\sigma}}^\dagger c_{\vec{k}\bar{\sigma}} \right] \\ &= \sum_{\vec{j}\vec{\sigma}\vec{k}} \frac{1}{\sqrt{\mathcal{N}}} V_{\vec{j}} \phi_{\vec{k}}^* (\vec{R}_{\vec{j}}) \times \left(d_{j\sigma} c_{\vec{k}\bar{\sigma}}^\dagger d_{\vec{j}\bar{\sigma}} - c_{\vec{k}\bar{\sigma}}^\dagger d_{\vec{j}\bar{\sigma}} d_{j\sigma} \right) \\ &\quad + \sum_{\vec{j}\vec{\sigma}\vec{k}} \frac{1}{\sqrt{\mathcal{N}}} V_{\vec{j}}^* \phi_{\vec{k}} (\vec{R}_{\vec{j}}) \times \left(d_{j\sigma} d_{\vec{j}\bar{\sigma}}^\dagger c_{\vec{k}\bar{\sigma}} - d_{\vec{j}\bar{\sigma}}^\dagger c_{\vec{k}\bar{\sigma}} d_{j\sigma} \right) \\ &= \sum_{\vec{j}\vec{\sigma}\vec{k}} \frac{1}{\sqrt{\mathcal{N}}} V_{\vec{j}} \phi_{\vec{k}}^* (\vec{R}_{\vec{j}}) \times \left(c_{\vec{k}\bar{\sigma}}^\dagger d_{\vec{j}\bar{\sigma}} d_{j\sigma} - c_{\vec{k}\bar{\sigma}}^\dagger d_{\vec{j}\bar{\sigma}} d_{j\sigma} \right) \\ &\quad + \sum_{\vec{j}\vec{\sigma}\vec{k}} \frac{1}{\sqrt{\mathcal{N}}} V_{\vec{j}}^* \phi_{\vec{k}} (\vec{R}_{\vec{j}}) \times \left(\delta_{j\vec{j}} \delta_{\sigma\bar{\sigma}} c_{\vec{k}\bar{\sigma}} - d_{\vec{j}\bar{\sigma}}^\dagger d_{j\sigma} c_{\vec{k}\bar{\sigma}} - d_{\vec{j}\bar{\sigma}}^\dagger c_{\vec{k}\bar{\sigma}} d_{j\sigma} \right) \\ &= \sum_{\vec{j}\vec{\sigma}\vec{k}} \frac{1}{\sqrt{\mathcal{N}}} V_{\vec{j}}^* \phi_{\vec{k}} (\vec{R}_{\vec{j}}) \times \left(\delta_{j\vec{j}} \delta_{\sigma\bar{\sigma}} c_{\vec{k}\bar{\sigma}} - d_{\vec{j}\bar{\sigma}}^\dagger d_{j\sigma} c_{\vec{k}\bar{\sigma}} + d_{\vec{j}\bar{\sigma}}^\dagger d_{j\sigma} c_{\vec{k}\bar{\sigma}} \right) \\ &= \sum_{\vec{k}} \frac{1}{\sqrt{\mathcal{N}}} V_j^* \phi_{\vec{k}} (\vec{R}_j) c_{\vec{k}\sigma}, \end{aligned} \quad (84)$$

$$\begin{aligned}
& \left[d_{j\sigma}, \sum_{\bar{j}} U_{\bar{j}} d_{\bar{j}\uparrow}^\dagger d_{\bar{j}\uparrow} d_{\bar{j}\downarrow}^\dagger d_{\bar{j}\downarrow} \right] = \sum_{\bar{j}} U_{\bar{j}} \left[d_{j\sigma}, d_{\bar{j}\uparrow}^\dagger d_{\bar{j}\uparrow} d_{\bar{j}\downarrow}^\dagger d_{\bar{j}\downarrow} \right] \\
&= \sum_{\bar{j}} U_{\bar{j}} \left(d_{j\sigma} d_{\bar{j}\uparrow}^\dagger d_{\bar{j}\uparrow} d_{\bar{j}\downarrow}^\dagger d_{\bar{j}\downarrow} - d_{\bar{j}\uparrow}^\dagger d_{\bar{j}\uparrow} d_{\bar{j}\downarrow}^\dagger d_{\bar{j}\downarrow} d_{j\sigma} \right) \\
&= \sum_{\bar{j}} U_{\bar{j}} \left(\delta_{j\bar{j}} \delta_{\sigma\uparrow} d_{\bar{j}\uparrow}^\dagger d_{\bar{j}\uparrow} d_{\bar{j}\downarrow}^\dagger d_{\bar{j}\downarrow} - d_{\bar{j}\uparrow}^\dagger d_{j\sigma} d_{\bar{j}\uparrow} d_{\bar{j}\downarrow}^\dagger d_{\bar{j}\downarrow} - d_{\bar{j}\uparrow}^\dagger d_{\bar{j}\uparrow} d_{\bar{j}\downarrow}^\dagger d_{\bar{j}\downarrow} d_{j\sigma} \right) \\
&= \sum_{\bar{j}} U_{\bar{j}} \left(\delta_{j\bar{j}} \delta_{\sigma\uparrow} d_{\bar{j}\uparrow}^\dagger d_{\bar{j}\uparrow} d_{\bar{j}\downarrow}^\dagger d_{\bar{j}\downarrow} + d_{\bar{j}\uparrow}^\dagger d_{\bar{j}\uparrow} d_{j\sigma} d_{\bar{j}\downarrow}^\dagger d_{\bar{j}\downarrow} - d_{\bar{j}\uparrow}^\dagger d_{\bar{j}\uparrow} d_{\bar{j}\downarrow}^\dagger d_{\bar{j}\downarrow} d_{j\sigma} \right) \\
&= \sum_{\bar{j}} U_{\bar{j}} \left(\delta_{j\bar{j}} \delta_{\sigma\uparrow} d_{\bar{j}\uparrow}^\dagger d_{\bar{j}\uparrow} d_{\bar{j}\downarrow}^\dagger d_{\bar{j}\downarrow} + \delta_{j\bar{j}} \delta_{\sigma\downarrow} d_{\bar{j}\uparrow}^\dagger d_{\bar{j}\uparrow} d_{\bar{j}\downarrow} - d_{\bar{j}\uparrow}^\dagger d_{\bar{j}\uparrow} d_{\bar{j}\downarrow}^\dagger d_{j\sigma} d_{\bar{j}\downarrow} - d_{\bar{j}\uparrow}^\dagger d_{\bar{j}\uparrow} d_{\bar{j}\downarrow}^\dagger d_{\bar{j}\downarrow} d_{j\sigma} \right) \\
&= \sum_{\bar{j}} U_{\bar{j}} \left(\delta_{j\bar{j}} \delta_{\sigma\uparrow} d_{\bar{j}\uparrow}^\dagger d_{\bar{j}\uparrow} d_{\bar{j}\downarrow}^\dagger d_{\bar{j}\downarrow} + \delta_{j\bar{j}} \delta_{\sigma\downarrow} d_{\bar{j}\uparrow}^\dagger d_{\bar{j}\uparrow} d_{\bar{j}\downarrow} + d_{\bar{j}\uparrow}^\dagger d_{\bar{j}\uparrow} d_{\bar{j}\downarrow}^\dagger d_{\bar{j}\downarrow} d_{j\sigma} - d_{\bar{j}\uparrow}^\dagger d_{\bar{j}\uparrow} d_{\bar{j}\downarrow}^\dagger d_{\bar{j}\downarrow} d_{j\sigma} \right) \\
&= \sum_{\bar{j}} U_{\bar{j}} \left(\delta_{j\bar{j}} \delta_{\sigma\uparrow} d_{\bar{j}\uparrow}^\dagger d_{\bar{j}\uparrow} d_{\bar{j}\downarrow}^\dagger d_{\bar{j}\downarrow} + \delta_{j\bar{j}} \delta_{\sigma\downarrow} d_{\bar{j}\uparrow}^\dagger d_{\bar{j}\uparrow} d_{\bar{j}\downarrow} \right) \\
&= U_{\bar{j}} \left(\delta_{\sigma\uparrow} d_{\bar{j}\uparrow}^\dagger d_{\bar{j}\uparrow} d_{\bar{j}\downarrow}^\dagger d_{\bar{j}\downarrow} + \delta_{\sigma\downarrow} d_{\bar{j}\uparrow}^\dagger d_{\bar{j}\uparrow} d_{\bar{j}\downarrow} \right) = U_j \left(\delta_{\sigma\uparrow} d_{j\uparrow}^\dagger d_{j\uparrow} d_{j\downarrow}^\dagger d_{j\downarrow} + \delta_{\sigma\downarrow} d_{j\downarrow}^\dagger d_{j\downarrow} d_{j\uparrow} \right) \\
&= U_j d_{j\sigma} d_{j\bar{\sigma}}^\dagger d_{j\bar{\sigma}} = U_j d_{j\sigma} n_{d_{j\bar{\sigma}}} \quad (85)
\end{aligned}$$

e

$$\begin{aligned}
\left[d_{j\sigma}, \sum_{\bar{j}\bar{\sigma}} \varepsilon_{d\bar{\sigma}} d_{\bar{j}\bar{\sigma}}^\dagger d_{\bar{j}\bar{\sigma}} \right] &= \sum_{\bar{j}\bar{\sigma}} \varepsilon_{\bar{j}d\bar{\sigma}} \left[d_{j\sigma}, d_{\bar{j}\bar{\sigma}}^\dagger d_{\bar{j}\bar{\sigma}} \right] = \sum_{\bar{j}\bar{\sigma}} \varepsilon_{\bar{j}d\bar{\sigma}} \left(d_{j\sigma} d_{\bar{j}\bar{\sigma}}^\dagger d_{\bar{j}\bar{\sigma}} - d_{\bar{j}\bar{\sigma}}^\dagger d_{\bar{j}\bar{\sigma}} d_{j\sigma} \right) \\
&= \sum_{\bar{j}\bar{\sigma}} \varepsilon_{\bar{j}d\bar{\sigma}} \left(\delta_{j\bar{j}} \delta_{\sigma\bar{\sigma}} d_{\bar{j}\bar{\sigma}}^\dagger d_{\bar{j}\bar{\sigma}} - d_{\bar{j}\bar{\sigma}}^\dagger d_{j\sigma} d_{\bar{j}\bar{\sigma}} - d_{\bar{j}\bar{\sigma}}^\dagger d_{\bar{j}\bar{\sigma}} d_{j\sigma} \right) \\
&= \sum_{\bar{j}\bar{\sigma}} \varepsilon_{\bar{j}d\bar{\sigma}} \left(\delta_{j\bar{j}} \delta_{\sigma\bar{\sigma}} d_{\bar{j}\bar{\sigma}}^\dagger d_{\bar{j}\bar{\sigma}} - d_{\bar{j}\bar{\sigma}}^\dagger d_{j\sigma} d_{\bar{j}\bar{\sigma}} - d_{\bar{j}\bar{\sigma}}^\dagger d_{\bar{j}\bar{\sigma}} d_{j\sigma} \right) \\
&= \sum_{\bar{j}\bar{\sigma}} \varepsilon_{\bar{j}d\bar{\sigma}} \left(\delta_{j\bar{j}} \delta_{\sigma\bar{\sigma}} d_{\bar{j}\bar{\sigma}}^\dagger d_{\bar{j}\bar{\sigma}} + d_{\bar{j}\bar{\sigma}}^\dagger d_{\bar{j}\bar{\sigma}} d_{j\sigma} - d_{\bar{j}\bar{\sigma}}^\dagger d_{\bar{j}\bar{\sigma}} d_{j\sigma} \right) \\
&= \varepsilon_{jd\sigma} d_{j\sigma}. \quad (86)
\end{aligned}$$

Assim, a 82 torna-se

$$\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial t} \mathcal{G}_{d_j d_j}^\sigma(t) &= \left(-\frac{i}{\hbar} \right) \delta(t) \mathcal{Z}^{-1} \sum_n e^{-\beta E_n} \langle n | \left[d_{j\sigma}(t), d_{j\sigma}^\dagger(0) \right]_+ | n \rangle \\
&+ \left(-\frac{i}{\hbar} \right) \varepsilon_{jd\sigma} \left\{ -\frac{i}{\hbar} \theta(t) \mathcal{Z}^{-1} \sum_n e^{-\beta E_n} \langle n | \left[d_{j\sigma}(t), d_{j\sigma}^\dagger(0) \right]_+ | n \rangle \right\} \\
&+ \left(-\frac{i}{\hbar} \right) \frac{1}{\sqrt{\mathcal{N}}} \sum_{\bar{k}} V_{j\bar{k}}^* \phi_{\bar{k}}(\vec{R}_j) \left\{ -\frac{i}{\hbar} \theta(t) \mathcal{Z}^{-1} \sum_n e^{-\beta E_n} \langle n | \left[c_{\bar{k}\sigma}(t), d_{j\sigma}^\dagger(0) \right]_+ | n \rangle \right\} \\
&+ \left(-\frac{i}{\hbar} \right) U_j \left\{ -\frac{i}{\hbar} \theta(t) \mathcal{Z}^{-1} \sum_n e^{-\beta E_n} \langle n | \left[d_{j\sigma}(t) n_{d_{j\bar{\sigma}}}(t), d_{j\sigma}^\dagger(0) \right]_+ | n \rangle \right\}, \quad (87)
\end{aligned}$$

a qual depende das funções de Green

$$\mathcal{G}_{d_j d_j}^\sigma(t) = -\frac{i}{\hbar} \theta(t) \mathcal{L}^{-1} \sum_n e^{-\beta E_n} \langle n | \left[d_{j\sigma}(t), d_{j\sigma}^\dagger(0) \right]_+ | n \rangle, \quad (88)$$

$$\mathcal{G}_{c_{\bar{k}\sigma} d_j}^\sigma(t) = -\frac{i}{\hbar} \theta(t) \mathcal{L}^{-1} \sum_n e^{-\beta E_n} \langle n | \left[c_{\bar{k}\sigma}(t), d_{j\sigma}^\dagger(0) \right]_+ | n \rangle, \quad (89)$$

e

$$\mathcal{G}_{d_{j\sigma} n_{d_j \bar{\sigma}}, d_{j\sigma}}(t) = -\frac{i}{\hbar} \theta(t) \mathcal{L}^{-1} \sum_n e^{-\beta E_n} \langle n | \left[d_{j\sigma}(t) n_{d_j \bar{\sigma}}(t), d_{j\sigma}^\dagger(0) \right]_+ | n \rangle. \quad (90)$$

Dessa forma, encontramos como equação de movimento

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \mathcal{G}_{d_j d_j}^\sigma(t) &= \left(-\frac{i}{\hbar} \right) \delta(t) \mathcal{L}^{-1} \sum_n e^{-\beta E_n} \langle n | \left[d_{j\sigma}(t), d_{j\sigma}^\dagger(0) \right]_+ | n \rangle - \frac{i}{\hbar} \varepsilon_{jd\sigma} \mathcal{G}_{d_j d_j}^\sigma(t) \\ &+ \left(-\frac{i}{\hbar} \right) \frac{1}{\sqrt{\mathcal{N}}} \sum_{\bar{k}} V_j^* \phi_{\bar{k}}(\vec{R}_j) \mathcal{G}_{c_{\bar{k}\sigma} d_j}^\sigma(t) - \frac{i}{\hbar} U_j \mathcal{G}_{d_{j\sigma} n_{d_j \bar{\sigma}}, d_{j\sigma}}(t), \end{aligned} \quad (91)$$

cujas solução no espaço das energias é

$$(\varepsilon^+ - \varepsilon_{jd\sigma}) \tilde{\mathcal{G}}_{d_j d_j}^\sigma(\varepsilon^+) = 1 + \frac{1}{\sqrt{\mathcal{N}}} \sum_{\bar{k}} V_j^* \phi_{\bar{k}}(\vec{R}_j) \tilde{\mathcal{G}}_{c_{\bar{k}\sigma} d_j}^\sigma(\varepsilon^+) + U_j \tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\sigma} n_{d_j \bar{\sigma}}, d_{j\sigma}}(\varepsilon^+). \quad (92)$$

Note que surgiu uma nova dependência, a função de Green $\tilde{\mathcal{G}}_{d_j d_j}^\sigma$ depende agora de $\tilde{\mathcal{G}}_{c_{\bar{k}\sigma} d_j}^\sigma(\varepsilon^+)$. Essa pode ser obtida por meio da 48, ou seja,

$$\tilde{\mathcal{G}}_{c_{\bar{k}\sigma} d_j}^\sigma(\varepsilon^+) = \sum_l \frac{\frac{1}{\sqrt{\mathcal{N}}} V_l \phi_{\bar{k}}^*(\vec{R}_l) \tilde{\mathcal{G}}_{d_l d_j}^\sigma(\varepsilon^+)}{(\varepsilon^+ - \varepsilon_{\bar{k}\sigma})}. \quad (93)$$

Então substituímos a 93 na 92 para obter

$$(\varepsilon^+ - \varepsilon_{d\sigma}) \tilde{\mathcal{G}}_{d_j d_j}^\sigma(\varepsilon^+) = 1 + \frac{1}{\mathcal{N}} \sum_{\bar{k}l} \frac{V_j^* V_l \phi_{\bar{k}}(\vec{R}_j) \phi_{\bar{k}}^*(\vec{R}_l)}{(\varepsilon^+ - \varepsilon_{\bar{k}\sigma})} \tilde{\mathcal{G}}_{d_l d_j}^\sigma(\varepsilon^+) + U_j \tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\sigma} n_{d_j \bar{\sigma}}, d_{j\sigma}}(\varepsilon^+). \quad (94)$$

Definindo-se a auto energia

$$\Sigma_{lj\sigma}(\varepsilon) = \frac{1}{\mathcal{N}} \sum_{\bar{k}} \frac{V_j^* V_l \phi_{\bar{k}}(\vec{R}_j) \phi_{\bar{k}}^*(\vec{R}_l)}{\varepsilon - \varepsilon_{\bar{k}\sigma} + i\eta} = \Sigma_{lj\sigma}^R(\varepsilon) - i\Gamma_{lj\sigma} \quad (95)$$

onde

$$\Sigma_{lj\sigma}^R(\varepsilon) = \frac{1}{\mathcal{N}} \sum_{\vec{k}} \frac{V_j^* V_l \phi_{\vec{k}}(\vec{R}_j) \phi_{\vec{k}}^*(\vec{R}_l)}{\varepsilon - \varepsilon_{\vec{k}\sigma}} \quad (96)$$

e

$$\Gamma_{lj\sigma} = \frac{1}{\mathcal{N}} \pi V_j^* V_l \sum_{\vec{k}} \phi_{\vec{k}}(\vec{R}_j) \phi_{\vec{k}}^*(\vec{R}_l) \delta(\varepsilon - \varepsilon_{\vec{k}}), \quad (97)$$

chegamos a

$$(\varepsilon - \tilde{\varepsilon}_{jd\sigma} + i\Gamma_{jj\sigma}) \tilde{\mathcal{G}}_{d_j d_j}^\sigma(\varepsilon) = 1 + U_j \tilde{\mathcal{G}}_{d_j \sigma n_{d_j \bar{\sigma}}, d_j \sigma}(\varepsilon) + \sum_{l \neq j} \left[(\Sigma_{lj\sigma}^R(\varepsilon) - i\Gamma_{lj\sigma}) \tilde{\mathcal{G}}_{d_l d_j}^\sigma(\varepsilon) \right], \quad (98)$$

com

$$\tilde{\varepsilon}_{jd\sigma} = \varepsilon_{jd\sigma} + \Sigma_{lj\sigma}^R(\varepsilon). \quad (99)$$

5.2 FUNÇÕES DE GREEN NÃO DIAGONAIS

Para $l \neq j$, devemos repetir o cálculo anterior para a funções de Green não diagonais $\mathcal{G}_{d_l d_j}^\sigma(t)$, ou seja,

$$\mathcal{G}_{d_l d_j}^\sigma(t) = -\frac{i}{\hbar} \theta(t) \mathcal{L}^{-1} \sum_n e^{-\beta E_n} \langle n | \left[d_{l\sigma}(t), d_{j\sigma}^\dagger(0) \right]_+ | n \rangle, \quad (100)$$

cuja representação no espaço das energias é

$$(\varepsilon - \tilde{\varepsilon}_{ld\sigma} + i\Gamma_{ll\sigma}) \tilde{\mathcal{G}}_{d_l d_j}^\sigma = U_l \tilde{\mathcal{G}}_{d_l \sigma n_{d_l \bar{\sigma}}, d_j \sigma} + (\Sigma_{jj\sigma}^R - i\Gamma_{jj\sigma}) \tilde{\mathcal{G}}_{d_j d_j}^\sigma. \quad (101)$$

Perceba que para fechar o sistema constituído pela 98 e 101, temos que determinar a função de Green $\tilde{\mathcal{G}}_{d_l \sigma n_{d_l \bar{\sigma}}, d_j \sigma}$, a qual depende de quatro operadores fermiônicos. Para isso, consideremos

$$\mathcal{G}_{d_l \sigma n_{d_l \bar{\sigma}}, d_j \sigma}(t) = -\frac{i}{\hbar} \theta(t) \mathcal{L}^{-1} \sum_n e^{-\beta E_n} \langle n | \left[d_{l\sigma}(t) n_{d_l \bar{\sigma}}(t), d_{j\sigma}^\dagger(0) \right]_+ | n \rangle, \quad (102)$$

cuja derivada temporal é

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \mathcal{G}_{d_l \sigma n_{d_l \bar{\sigma}}, d_j \sigma}(t) &= \left(-\frac{i}{\hbar} \right) \delta(t) \mathcal{L}^{-1} \sum_n e^{-\beta E_n} \langle n | \left[d_{l\sigma}(t) n_{d_l \bar{\sigma}}(t), d_{j\sigma}^\dagger(0) \right]_+ | n \rangle \\ &+ \left(-\frac{i}{\hbar} \right) \theta(t) \mathcal{L}^{-1} \sum_n e^{-\beta E_n} \langle n | \left[\frac{\partial}{\partial t} d_{l\sigma}(t) n_{d_l \bar{\sigma}}(t), d_{j\sigma}^\dagger(0) \right]_+ | n \rangle, \end{aligned} \quad (103)$$

onde temos que usar a equação de Heisenberg

$$\frac{\partial}{\partial t} d_{l\sigma}(t) n_{d_{l\bar{\sigma}}}(t) = -\frac{i}{\hbar} [d_{l\sigma} n_{d_{l\bar{\sigma}}}, \mathcal{H}_{TIAM}] \quad (104)$$

juntamente com os seguintes comutadores,

$$\begin{aligned} & \left[d_{l\sigma} n_{d_{l\bar{\sigma}}}, \sum_{\tilde{j}} U_{\tilde{j}} d_{\tilde{j}\uparrow}^{\dagger} d_{\tilde{j}\uparrow} d_{\tilde{j}\downarrow}^{\dagger} d_{\tilde{j}\downarrow} \right] \\ &= \sum_{\tilde{j}} U_{\tilde{j}} \left[d_{l\sigma} d_{l\bar{\sigma}}^{\dagger} d_{l\bar{\sigma}}, d_{\tilde{j}\uparrow}^{\dagger} d_{\tilde{j}\uparrow} d_{\tilde{j}\downarrow}^{\dagger} d_{\tilde{j}\downarrow} \right] \\ &= \sum_{\tilde{j}} U_{\tilde{j}} \left(d_{l\sigma} d_{l\bar{\sigma}}^{\dagger} d_{l\bar{\sigma}} d_{\tilde{j}\uparrow}^{\dagger} d_{\tilde{j}\uparrow} d_{\tilde{j}\downarrow}^{\dagger} d_{\tilde{j}\downarrow} - d_{\tilde{j}\uparrow}^{\dagger} d_{\tilde{j}\uparrow} d_{\tilde{j}\downarrow}^{\dagger} d_{\tilde{j}\downarrow} d_{l\sigma} d_{l\bar{\sigma}}^{\dagger} d_{l\bar{\sigma}} \right) \\ &= \sum_{\tilde{j}} U_{\tilde{j}} \left(d_{l\bar{\sigma}}^{\dagger} d_{l\bar{\sigma}} d_{l\sigma} d_{\tilde{j}\uparrow}^{\dagger} d_{\tilde{j}\uparrow} d_{\tilde{j}\downarrow}^{\dagger} d_{\tilde{j}\downarrow} - d_{\tilde{j}\uparrow}^{\dagger} d_{\tilde{j}\uparrow} d_{\tilde{j}\downarrow}^{\dagger} d_{\tilde{j}\downarrow} d_{l\bar{\sigma}}^{\dagger} d_{l\bar{\sigma}} d_{l\sigma} \right) \\ &= \sum_{\tilde{j}} U_{\tilde{j}} \left(d_{l\bar{\sigma}}^{\dagger} d_{l\bar{\sigma}} \delta_{l\tilde{j}} \delta_{\sigma\uparrow} d_{\tilde{j}\uparrow}^{\dagger} d_{\tilde{j}\uparrow} d_{\tilde{j}\downarrow}^{\dagger} d_{\tilde{j}\downarrow} - d_{l\bar{\sigma}}^{\dagger} d_{l\bar{\sigma}} \delta_{l\tilde{j}} \delta_{\sigma\downarrow} d_{\tilde{j}\uparrow}^{\dagger} d_{\tilde{j}\uparrow} d_{\tilde{j}\downarrow}^{\dagger} d_{\tilde{j}\downarrow} - d_{\tilde{j}\uparrow}^{\dagger} d_{\tilde{j}\uparrow} d_{\tilde{j}\downarrow}^{\dagger} d_{\tilde{j}\downarrow} d_{l\bar{\sigma}}^{\dagger} d_{l\bar{\sigma}} d_{l\sigma} \right) \\ &= \sum_{\tilde{j}} U_{\tilde{j}} \left(d_{l\bar{\sigma}}^{\dagger} d_{l\bar{\sigma}} \delta_{l\tilde{j}} \delta_{\sigma\uparrow} d_{\tilde{j}\uparrow}^{\dagger} d_{\tilde{j}\uparrow} d_{\tilde{j}\downarrow}^{\dagger} d_{\tilde{j}\downarrow} + d_{l\bar{\sigma}}^{\dagger} d_{l\bar{\sigma}} \delta_{l\tilde{j}} \delta_{\sigma\downarrow} d_{\tilde{j}\uparrow}^{\dagger} d_{\tilde{j}\uparrow} d_{\tilde{j}\downarrow}^{\dagger} d_{\tilde{j}\downarrow} + d_{l\bar{\sigma}}^{\dagger} d_{l\bar{\sigma}} d_{\tilde{j}\uparrow}^{\dagger} d_{\tilde{j}\uparrow} d_{\tilde{j}\downarrow}^{\dagger} d_{\tilde{j}\downarrow} d_{l\sigma} \right) \\ &- \sum_{\tilde{j}} U_{\tilde{j}} d_{\tilde{j}\uparrow}^{\dagger} d_{\tilde{j}\uparrow} d_{\tilde{j}\downarrow}^{\dagger} d_{\tilde{j}\downarrow} d_{l\sigma} d_{l\bar{\sigma}}^{\dagger} d_{l\bar{\sigma}} \\ &= \sum_{\tilde{j}} U_{\tilde{j}} \left(d_{l\bar{\sigma}}^{\dagger} d_{l\bar{\sigma}} \delta_{l\tilde{j}} \delta_{\sigma\uparrow} d_{\tilde{j}\uparrow}^{\dagger} d_{\tilde{j}\uparrow} d_{\tilde{j}\downarrow}^{\dagger} d_{\tilde{j}\downarrow} + d_{l\bar{\sigma}}^{\dagger} d_{l\bar{\sigma}} \delta_{l\tilde{j}} \delta_{\sigma\downarrow} d_{\tilde{j}\uparrow}^{\dagger} d_{\tilde{j}\uparrow} d_{\tilde{j}\downarrow}^{\dagger} d_{\tilde{j}\downarrow} \right) \\ &= U_l \left(d_{l\bar{\sigma}}^{\dagger} d_{l\bar{\sigma}} d_{l\uparrow} d_{l\downarrow}^{\dagger} d_{l\downarrow} \delta_{\sigma\uparrow} + d_{l\bar{\sigma}}^{\dagger} d_{l\bar{\sigma}} d_{l\uparrow}^{\dagger} d_{l\uparrow} d_{l\downarrow} \delta_{\sigma\downarrow} \right) \\ &= U_l \left(d_{l\bar{\sigma}}^{\dagger} d_{l\bar{\sigma}} d_{l\downarrow}^{\dagger} d_{l\downarrow} d_{l\uparrow} \delta_{\sigma\uparrow} + d_{l\bar{\sigma}}^{\dagger} d_{l\bar{\sigma}} d_{l\uparrow}^{\dagger} d_{l\uparrow} d_{l\downarrow} \delta_{\sigma\downarrow} \right) = U_l d_{l\bar{\sigma}}^{\dagger} d_{l\bar{\sigma}} d_{l\bar{\sigma}}^{\dagger} d_{l\bar{\sigma}} d_{l\sigma} \\ &= U_l d_{l\bar{\sigma}}^{\dagger} d_{l\bar{\sigma}} d_{l\sigma} = U_l d_{l\sigma} d_{l\bar{\sigma}}^{\dagger} d_{l\bar{\sigma}} = U_l d_{l\sigma} n_{d_{l\bar{\sigma}}}, \end{aligned} \quad (105)$$

com $d_{l\bar{\sigma}}^{\dagger} d_{l\bar{\sigma}} d_{l\bar{\sigma}}^{\dagger} d_{l\bar{\sigma}} = d_{l\bar{\sigma}}^{\dagger} d_{l\bar{\sigma}}$, $\sigma = \uparrow$ e $\bar{\sigma} = \downarrow$ no termo

$$\begin{aligned} & \sum_{\tilde{j}} U_{\tilde{j}} \left(d_{l\bar{\sigma}}^{\dagger} d_{l\bar{\sigma}} d_{\tilde{j}\uparrow}^{\dagger} d_{\tilde{j}\uparrow} d_{\tilde{j}\downarrow}^{\dagger} d_{\tilde{j}\downarrow} d_{l\sigma} - d_{\tilde{j}\uparrow}^{\dagger} d_{\tilde{j}\uparrow} d_{\tilde{j}\downarrow}^{\dagger} d_{\tilde{j}\downarrow} d_{l\sigma} d_{l\bar{\sigma}}^{\dagger} d_{l\bar{\sigma}} \right) \\ &= \sum_{\tilde{j}} U_{\tilde{j}} \left(d_{l\downarrow}^{\dagger} d_{l\downarrow} d_{\tilde{j}\uparrow}^{\dagger} d_{\tilde{j}\uparrow} d_{\tilde{j}\downarrow}^{\dagger} d_{\tilde{j}\downarrow} d_{l\uparrow} - d_{\tilde{j}\uparrow}^{\dagger} d_{\tilde{j}\uparrow} d_{\tilde{j}\downarrow}^{\dagger} d_{\tilde{j}\downarrow} d_{l\uparrow} d_{l\downarrow}^{\dagger} d_{l\downarrow} \right) \\ &= \sum_{\tilde{j}} U_{\tilde{j}} \left(d_{l\downarrow}^{\dagger} d_{l\downarrow} d_{\tilde{j}\uparrow}^{\dagger} d_{\tilde{j}\uparrow} d_{\tilde{j}\downarrow}^{\dagger} d_{\tilde{j}\downarrow} d_{l\uparrow} - d_{\tilde{j}\uparrow}^{\dagger} d_{\tilde{j}\uparrow} d_{\tilde{j}\downarrow}^{\dagger} d_{\tilde{j}\downarrow} d_{l\downarrow}^{\dagger} d_{l\downarrow} d_{l\uparrow} \right) \\ &= \sum_{\tilde{j}} U_{\tilde{j}} \left\{ d_{l\downarrow}^{\dagger} d_{l\downarrow} d_{\tilde{j}\uparrow}^{\dagger} d_{\tilde{j}\uparrow} d_{\tilde{j}\downarrow}^{\dagger} d_{\tilde{j}\downarrow} d_{l\uparrow} - d_{\tilde{j}\uparrow}^{\dagger} d_{\tilde{j}\uparrow} d_{\tilde{j}\downarrow}^{\dagger} d_{\tilde{j}\downarrow} \left(\delta_{l\tilde{j}} - d_{l\downarrow}^{\dagger} d_{l\downarrow} \right) d_{l\downarrow} d_{l\uparrow} \right\} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 &= \varepsilon_{jd\sigma} d_{l\sigma} \left(d_{l\bar{\sigma}}^\dagger d_{l\bar{\sigma}} d_{j\sigma}^\dagger d_{j\sigma} - d_{l\bar{\sigma}}^\dagger d_{l\bar{\sigma}} d_{j\sigma}^\dagger d_{j\sigma} \right) \\
 &+ \varepsilon_{jd\bar{\sigma}} d_{l\sigma} \left(d_{l\bar{\sigma}}^\dagger d_{l\bar{\sigma}} d_{j\bar{\sigma}}^\dagger d_{j\bar{\sigma}} - d_{j\bar{\sigma}}^\dagger d_{j\bar{\sigma}} d_{l\bar{\sigma}}^\dagger d_{l\bar{\sigma}} \right) \\
 &= \varepsilon_{jd\bar{\sigma}} d_{l\sigma} \left(d_{l\bar{\sigma}}^\dagger d_{l\bar{\sigma}} d_{j\bar{\sigma}}^\dagger d_{j\bar{\sigma}} - d_{j\bar{\sigma}}^\dagger d_{j\bar{\sigma}} d_{l\bar{\sigma}}^\dagger d_{l\bar{\sigma}} \right) \\
 &= \varepsilon_{jd\bar{\sigma}} d_{l\sigma} \left(1 - d_{l\bar{\sigma}} d_{l\bar{\sigma}}^\dagger \right) d_{j\bar{\sigma}}^\dagger d_{j\bar{\sigma}} - \varepsilon_{jd\bar{\sigma}} d_{l\sigma} d_{j\bar{\sigma}}^\dagger d_{j\bar{\sigma}} d_{l\bar{\sigma}}^\dagger d_{l\bar{\sigma}} \\
 &= \varepsilon_{jd\bar{\sigma}} d_{l\sigma} d_{j\bar{\sigma}}^\dagger d_{j\bar{\sigma}} - \varepsilon_{jd\bar{\sigma}} d_{l\sigma} d_{l\bar{\sigma}} d_{l\bar{\sigma}}^\dagger d_{j\bar{\sigma}}^\dagger d_{j\bar{\sigma}} - \varepsilon_{jd\bar{\sigma}} d_{l\sigma} d_{j\bar{\sigma}}^\dagger d_{j\bar{\sigma}} d_{l\bar{\sigma}}^\dagger d_{l\bar{\sigma}} \\
 &= \varepsilon_{jd\bar{\sigma}} d_{l\sigma} d_{j\bar{\sigma}}^\dagger d_{j\bar{\sigma}} - \varepsilon_{jd\bar{\sigma}} d_{l\sigma} d_{j\bar{\sigma}}^\dagger d_{j\bar{\sigma}} d_{l\bar{\sigma}} d_{l\bar{\sigma}}^\dagger - \varepsilon_{jd\bar{\sigma}} d_{l\sigma} d_{j\bar{\sigma}}^\dagger d_{j\bar{\sigma}} d_{l\bar{\sigma}}^\dagger d_{l\bar{\sigma}} \\
 &= \varepsilon_{jd\bar{\sigma}} d_{l\sigma} d_{j\bar{\sigma}}^\dagger d_{j\bar{\sigma}} - \varepsilon_{jd\bar{\sigma}} d_{l\sigma} d_{j\bar{\sigma}}^\dagger d_{j\bar{\sigma}} \left(1 - d_{l\bar{\sigma}}^\dagger d_{l\bar{\sigma}} \right) \\
 &- \varepsilon_{jd\bar{\sigma}} d_{l\sigma} d_{j\bar{\sigma}}^\dagger d_{j\bar{\sigma}} d_{l\bar{\sigma}}^\dagger d_{l\bar{\sigma}} = 0.
 \end{aligned} \tag{111}$$

Assim, concluímos que a 104 torna-se

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial}{\partial t} d_{l\sigma}(t) n_{d_{l\bar{\sigma}}}(t) &= \left(-\frac{i}{\hbar} \right) \varepsilon_{ld\sigma} d_{l\sigma} n_{d_{l\bar{\sigma}}} + \left(-\frac{i}{\hbar} \right) U_l d_{l\sigma} n_{d_{l\bar{\sigma}}} \\
 &+ \left(-\frac{i}{\hbar} \right) \left(\sum_{\vec{k}} \frac{1}{\sqrt{\mathcal{N}}} V_l^* \phi_{\vec{k}}(\vec{R}_l) c_{\vec{k}\sigma}^\dagger d_{l\bar{\sigma}} + \sum_{\vec{k}} \frac{1}{\sqrt{\mathcal{N}}} V_l^* \phi_{\vec{k}}(\vec{R}_l) d_{l\bar{\sigma}}^\dagger c_{\vec{k}\bar{\sigma}} d_{l\sigma} \right) \\
 &+ \left(-\frac{i}{\hbar} \right) \left(-\sum_{\vec{k}} \frac{1}{\sqrt{\mathcal{N}}} V_l \phi_{\vec{k}}^*(\vec{R}_l) c_{\vec{k}\bar{\sigma}}^\dagger d_{l\bar{\sigma}} d_{l\sigma} \right)
 \end{aligned} \tag{112}$$

e consequentemente, a 103 fica igual a

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial}{\partial t} \mathcal{G}_{d_{l\sigma} n_{d_{l\bar{\sigma}}}, d_{j\sigma}}(t) &= \left(-\frac{i}{\hbar} \right) \delta(t) \mathcal{Z}^{-1} \sum_n e^{-\beta E_n} \langle n | \left[d_{l\sigma}(t) n_{d_{l\bar{\sigma}}}(t), d_{j\sigma}^\dagger(0) \right]_+ | n \rangle \\
 &+ \left(-\frac{i}{\hbar} \right) (\varepsilon_{ld\sigma} + U_l) \left\{ \left(-\frac{i}{\hbar} \right) \theta(t) \mathcal{Z}^{-1} \sum_n e^{-\beta E_n} \langle n | \left[d_{l\sigma}(t) n_{d_{l\bar{\sigma}}}(t), d_{j\sigma}^\dagger(0) \right]_+ | n \rangle \right\} \\
 &+ \left(-\frac{i}{\hbar} \right) \left(-\sum_{\vec{k}} \frac{1}{\sqrt{\mathcal{N}}} V_l \phi_{\vec{k}}^*(\vec{R}_l) \right) \\
 &\times \left\{ \left(-\frac{i}{\hbar} \right) \theta(t) \mathcal{Z}^{-1} \sum_n e^{-\beta E_n} \langle n | \left[c_{\vec{k}\bar{\sigma}}^\dagger(t) d_{l\bar{\sigma}}(t) d_{l\sigma}(t), d_{j\sigma}^\dagger(0) \right]_+ | n \rangle \right\} \\
 &+ \left(-\frac{i}{\hbar} \right) \left(\sum_{\vec{k}} \frac{1}{\sqrt{\mathcal{N}}} V_l^* \phi_{\vec{k}}(\vec{R}_l) \right) \\
 &\times \left\{ \left(-\frac{i}{\hbar} \right) \theta(t) \mathcal{Z}^{-1} \sum_n e^{-\beta E_n} \langle n | \left[c_{\vec{k}\sigma}(t) d_{l\bar{\sigma}}^\dagger(t) d_{l\bar{\sigma}}(t), d_{j\sigma}^\dagger(0) \right]_+ | n \rangle \right\} \\
 &+ \left(-\frac{i}{\hbar} \right) \left(\sum_{\vec{k}} \frac{1}{\sqrt{\mathcal{N}}} V_l^* \phi_{\vec{k}}(\vec{R}_l) \right) \\
 &\times \left\{ \left(-\frac{i}{\hbar} \right) \theta(t) \mathcal{Z}^{-1} \sum_n e^{-\beta E_n} \langle n | \left[d_{l\bar{\sigma}}^\dagger(t) c_{\vec{k}\bar{\sigma}}(t) d_{l\sigma}(t), d_{j\sigma}^\dagger(0) \right]_+ | n \rangle \right\}.
 \end{aligned} \tag{113}$$

Fazemos agora a transformada de Fourier da 113, encontramos

$$\begin{aligned}
 & (\varepsilon - \varepsilon_{l\sigma} - U_l + i\eta) \tilde{\mathcal{G}}_{d_{l\sigma} n_{d_l \bar{\sigma}}, d_{j\sigma}}(\varepsilon) = \delta_{lj} \langle n_{d_l \bar{\sigma}} \rangle \\
 & - \sum_{\vec{k}} \frac{1}{\sqrt{\mathcal{N}}} V_l \phi_{\vec{k}}^* (\vec{R}_l) \tilde{\mathcal{G}}_{c_{\vec{k}\sigma}^\dagger d_{l\bar{\sigma}} d_{l\sigma}, d_{j\sigma}}(\varepsilon) + \sum_{\vec{k}} \frac{1}{\sqrt{\mathcal{N}}} V_l^* \phi_{\vec{k}} (\vec{R}_l) \tilde{\mathcal{G}}_{c_{\vec{k}\sigma} d_{l\bar{\sigma}}^\dagger d_{l\sigma}, d_{j\sigma}}(\varepsilon) \\
 & + \sum_{\vec{k}} \frac{1}{\sqrt{\mathcal{N}}} V_l^* \phi_{\vec{k}} (\vec{R}_l) \tilde{\mathcal{G}}_{d_{l\bar{\sigma}}^\dagger c_{\vec{k}\sigma} d_{l\sigma}, d_{j\sigma}}(\varepsilon). \tag{114}
 \end{aligned}$$

É neste ponto do cálculo que aplicamos a aproximação Hubbard I (HAUG; ANTTI-PEKKA, 1996), a qual é dada pelo desacoplamento

$$\tilde{\mathcal{G}}_{c_{\vec{k}\sigma}^\dagger d_{l\bar{\sigma}} d_{l\sigma}, d_{j\sigma}}(\varepsilon) \simeq \langle c_{\vec{k}\sigma}^\dagger d_{l\bar{\sigma}} \rangle \tilde{\mathcal{G}}_{d_l, d_j}^\sigma(\varepsilon) \tag{115}$$

e

$$\tilde{\mathcal{G}}_{d_{l\bar{\sigma}}^\dagger c_{\vec{k}\sigma} d_{l\sigma}, d_{j\sigma}}(\varepsilon) \simeq \langle c_{\vec{k}\sigma}^\dagger d_{l\bar{\sigma}} \rangle \tilde{\mathcal{G}}_{d_l, d_j}^\sigma(\varepsilon). \tag{116}$$

Dessa forma, a 114 torna-se

$$\begin{aligned}
 (\varepsilon - \varepsilon_{l\sigma} - U_l + i\eta) \tilde{\mathcal{G}}_{d_{l\sigma} n_{d_l \bar{\sigma}}, d_{j\sigma}}(\varepsilon) & = \delta_{lj} \langle n_{d_l \bar{\sigma}} \rangle \\
 & + \left(\sum_{\vec{k}} \frac{1}{\sqrt{\mathcal{N}}} V_l^* \phi_{\vec{k}} (\vec{R}_l) \right) \tilde{\mathcal{G}}_{c_{\vec{k}\sigma} d_{l\bar{\sigma}}^\dagger d_{l\sigma}, d_{j\sigma}}(\varepsilon), \tag{117}
 \end{aligned}$$

onde utilizamos a propriedade

$$\sum_{\vec{k}} \frac{1}{\sqrt{\mathcal{N}}} V_l \phi_{\vec{k}}^* (\vec{R}_l) = \sum_{\vec{k}} \frac{1}{\sqrt{\mathcal{N}}} V_l^* \phi_{\vec{k}} (\vec{R}_l). \tag{118}$$

Agora devemos considerar

$$\mathcal{G}_{c_{\vec{k}\sigma} d_{l\bar{\sigma}}^\dagger d_{l\sigma}, d_{j\sigma}}(t) = -\frac{i}{\hbar} \theta(t) \mathcal{L}^{-1} \sum_n e^{-\beta E_n} \langle n | \left[c_{\vec{k}\sigma}(t) d_{l\bar{\sigma}}^\dagger(t) d_{l\bar{\sigma}}(t), d_{j\sigma}^\dagger(0) \right]_+ | n \rangle, \tag{119}$$

cuja derivada temporal é

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial}{\partial t} \mathcal{G}_{c_{\vec{k}\sigma} d_{l\bar{\sigma}}^\dagger d_{l\sigma}, d_{j\sigma}}(t) & = -\frac{i}{\hbar} \delta(t) \mathcal{L}^{-1} \sum_n e^{-\beta E_n} \langle n | \left[c_{\vec{k}\sigma}(t) d_{l\bar{\sigma}}^\dagger(t) d_{l\bar{\sigma}}(t), d_{j\sigma}^\dagger(0) \right]_+ | n \rangle \\
 & + -\frac{i}{\hbar} \theta(t) \mathcal{L}^{-1} \sum_n e^{-\beta E_n} \langle n | \left[\frac{\partial}{\partial t} c_{\vec{k}\sigma}(t) d_{l\bar{\sigma}}^\dagger(t) d_{l\bar{\sigma}}(t), d_{j\sigma}^\dagger(0) \right]_+ | n \rangle \tag{120}
 \end{aligned}$$

e mais uma vez, precisamos da equação de Heisenberg

$$\frac{\partial}{\partial t} c_{\vec{k}\sigma}(t) d_{l\bar{\sigma}}^\dagger(t) d_{l\bar{\sigma}}(t) = -\frac{i}{\hbar} \left[c_{\vec{k}\sigma} d_{l\bar{\sigma}}^\dagger d_{l\bar{\sigma}}, \mathcal{H}_{TIAM} \right] \tag{121}$$

e dos seguintes comutadores,

$$\begin{aligned}
 & \left[c_{\bar{k}\sigma} d_{l\bar{\sigma}}^\dagger d_{l\bar{\sigma}}, \sum_{\bar{q}\bar{\sigma}} \varepsilon_{\bar{q}\bar{\sigma}} c_{\bar{q}\bar{\sigma}}^\dagger c_{\bar{q}\bar{\sigma}} \right] \\
 &= \sum_{\bar{q}\bar{\sigma}} \varepsilon_{\bar{q}\bar{\sigma}} \left(c_{\bar{k}\sigma} d_{l\bar{\sigma}}^\dagger d_{l\bar{\sigma}} c_{\bar{q}\bar{\sigma}}^\dagger c_{\bar{q}\bar{\sigma}} - c_{\bar{q}\bar{\sigma}}^\dagger c_{\bar{q}\bar{\sigma}} c_{\bar{k}\sigma} d_{l\bar{\sigma}}^\dagger d_{l\bar{\sigma}} \right) \\
 &= \sum_{\bar{q}\bar{\sigma}} \varepsilon_{\bar{q}\bar{\sigma}} \left(d_{l\bar{\sigma}}^\dagger d_{l\bar{\sigma}} c_{\bar{k}\sigma} c_{\bar{q}\bar{\sigma}}^\dagger c_{\bar{q}\bar{\sigma}} - c_{\bar{q}\bar{\sigma}}^\dagger c_{\bar{q}\bar{\sigma}} c_{\bar{k}\sigma} d_{l\bar{\sigma}}^\dagger d_{l\bar{\sigma}} \right) \\
 &= \sum_{\bar{q}\bar{\sigma}} \varepsilon_{\bar{q}\bar{\sigma}} \left(d_{l\bar{\sigma}}^\dagger d_{l\bar{\sigma}} \left(\delta_{kq} \delta_{\bar{\sigma}\sigma} - c_{\bar{q}\bar{\sigma}}^\dagger c_{\bar{k}\sigma} \right) c_{\bar{q}\bar{\sigma}} - c_{\bar{q}\bar{\sigma}}^\dagger c_{\bar{q}\bar{\sigma}} c_{\bar{k}\sigma} d_{l\bar{\sigma}}^\dagger d_{l\bar{\sigma}} \right) \\
 &= \sum_{\bar{q}\bar{\sigma}} \delta_{kq} \delta_{\bar{\sigma}\sigma} \varepsilon_{\bar{q}\bar{\sigma}} c_{\bar{q}\bar{\sigma}} d_{l\bar{\sigma}}^\dagger d_{l\bar{\sigma}} - \sum_{\bar{q}\bar{\sigma}} \varepsilon_{\bar{q}\bar{\sigma}} d_{l\bar{\sigma}}^\dagger d_{l\bar{\sigma}} c_{\bar{q}\bar{\sigma}}^\dagger c_{\bar{k}\sigma} c_{\bar{q}\bar{\sigma}} - \sum_{\bar{q}\bar{\sigma}} \varepsilon_{\bar{q}\bar{\sigma}} c_{\bar{q}\bar{\sigma}}^\dagger c_{\bar{q}\bar{\sigma}} c_{\bar{k}\sigma} d_{l\bar{\sigma}}^\dagger d_{l\bar{\sigma}} \\
 &= \varepsilon_{\bar{k}\sigma} c_{\bar{k}\sigma} d_{l\bar{\sigma}}^\dagger d_{l\bar{\sigma}} - \sum_{\bar{q}\bar{\sigma}} \varepsilon_{\bar{q}\bar{\sigma}} d_{l\bar{\sigma}}^\dagger d_{l\bar{\sigma}} c_{\bar{q}\bar{\sigma}}^\dagger c_{\bar{k}\sigma} c_{\bar{q}\bar{\sigma}} d_{l\bar{\sigma}}^\dagger d_{l\bar{\sigma}} + \sum_{\bar{q}\bar{\sigma}} \varepsilon_{\bar{q}\bar{\sigma}} c_{\bar{q}\bar{\sigma}}^\dagger c_{\bar{k}\sigma} c_{\bar{q}\bar{\sigma}} d_{l\bar{\sigma}}^\dagger d_{l\bar{\sigma}} \\
 &= \varepsilon_{\bar{k}\sigma} c_{\bar{k}\sigma} d_{l\bar{\sigma}}^\dagger d_{l\bar{\sigma}}, \tag{122}
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 \left[c_{\bar{k}\sigma} d_{l\bar{\sigma}}^\dagger d_{l\bar{\sigma}}, \sum_{j\bar{\sigma}} \varepsilon_{jd\bar{\sigma}} d_{j\bar{\sigma}}^\dagger d_{j\bar{\sigma}} \right] &= \sum_{j\bar{\sigma}} \varepsilon_{jd\bar{\sigma}} \left[c_{\bar{k}\sigma} d_{l\bar{\sigma}}^\dagger d_{l\bar{\sigma}}, d_{j\bar{\sigma}}^\dagger d_{j\bar{\sigma}} \right] \\
 &= \sum_j \varepsilon_{jd\sigma} \left[c_{\bar{k}\sigma} d_{l\bar{\sigma}}^\dagger d_{l\bar{\sigma}}, d_{j\sigma}^\dagger d_{j\sigma} \right] \\
 &+ \sum_j \varepsilon_{jd\bar{\sigma}} \left[c_{\bar{k}\sigma} d_{l\bar{\sigma}}^\dagger d_{l\bar{\sigma}}, d_{j\bar{\sigma}}^\dagger d_{j\bar{\sigma}} \right] = 0, \tag{123}
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 & \sum_{j\bar{\sigma}\bar{q}} V_j \frac{1}{\sqrt{\mathcal{N}}} \phi_{\bar{q}}^* (\vec{R}_j) \left[c_{\bar{k}\sigma} d_{l\bar{\sigma}}^\dagger d_{l\bar{\sigma}}, c_{\bar{q}\bar{\sigma}}^\dagger d_{j\bar{\sigma}} \right] \\
 &= \sum_{j\bar{\sigma}\bar{q}} V_j \frac{1}{\sqrt{\mathcal{N}}} \phi_{\bar{q}}^* (\vec{R}_j) \left(c_{\bar{k}\sigma} d_{l\bar{\sigma}}^\dagger d_{l\bar{\sigma}} c_{\bar{q}\bar{\sigma}}^\dagger d_{j\bar{\sigma}} - c_{\bar{q}\bar{\sigma}}^\dagger d_{j\bar{\sigma}} c_{\bar{k}\sigma} d_{l\bar{\sigma}}^\dagger d_{l\bar{\sigma}} \right) \\
 &= \sum_{j\bar{\sigma}\bar{q}} V_j \frac{1}{\sqrt{\mathcal{N}}} \phi_{\bar{q}}^* (\vec{R}_j) \left(c_{\bar{k}\sigma} c_{\bar{q}\bar{\sigma}}^\dagger d_{l\bar{\sigma}}^\dagger d_{l\bar{\sigma}} d_{j\bar{\sigma}} + c_{\bar{q}\bar{\sigma}}^\dagger c_{\bar{k}\sigma} d_{j\bar{\sigma}} d_{l\bar{\sigma}}^\dagger d_{l\bar{\sigma}} \right) \\
 &= \sum_{j\bar{\sigma}\bar{q}} V_j \frac{1}{\sqrt{\mathcal{N}}} \phi_{\bar{q}}^* (\vec{R}_j) \left(c_{\bar{k}\sigma} c_{\bar{q}\bar{\sigma}}^\dagger d_{l\bar{\sigma}}^\dagger d_{l\bar{\sigma}} d_{j\bar{\sigma}} + \left(\delta_{kq} \delta_{\bar{\sigma}\sigma} - c_{\bar{k}\sigma} c_{\bar{q}\bar{\sigma}}^\dagger \right) d_{j\bar{\sigma}} d_{l\bar{\sigma}}^\dagger d_{l\bar{\sigma}} \right) \\
 &= \sum_{j\bar{\sigma}\bar{q}} V_j \frac{1}{\sqrt{\mathcal{N}}} \phi_{\bar{q}}^* (\vec{R}_j) \left(c_{\bar{k}\sigma} c_{\bar{q}\bar{\sigma}}^\dagger d_{l\bar{\sigma}}^\dagger d_{l\bar{\sigma}} d_{j\bar{\sigma}} - c_{\bar{k}\sigma} c_{\bar{q}\bar{\sigma}}^\dagger d_{j\bar{\sigma}} d_{l\bar{\sigma}}^\dagger d_{l\bar{\sigma}} + \delta_{kq} \delta_{\bar{\sigma}\sigma} d_{j\bar{\sigma}} d_{l\bar{\sigma}}^\dagger d_{l\bar{\sigma}} \right) \\
 &= \sum_{j\bar{\sigma}\bar{q}} V_j \frac{1}{\sqrt{\mathcal{N}}} \phi_{\bar{q}}^* (\vec{R}_j) \delta_{kq} \delta_{\bar{\sigma}\sigma} d_{j\bar{\sigma}} d_{l\bar{\sigma}}^\dagger d_{l\bar{\sigma}} \\
 &+ \sum_{j\bar{\sigma}\bar{q}} V_j \frac{1}{\sqrt{\mathcal{N}}} \phi_{\bar{q}}^* (\vec{R}_j) \left(c_{\bar{k}\sigma} c_{\bar{q}\bar{\sigma}}^\dagger d_{l\bar{\sigma}}^\dagger d_{l\bar{\sigma}} d_{j\bar{\sigma}} - c_{\bar{k}\sigma} c_{\bar{q}\bar{\sigma}}^\dagger d_{j\bar{\sigma}} d_{l\bar{\sigma}}^\dagger d_{l\bar{\sigma}} \right)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 &= \sum_j V_j \frac{1}{\sqrt{\mathcal{N}}} \phi_k^* (\vec{R}_j) d_{j\sigma} d_{l\bar{\sigma}}^\dagger d_{l\bar{\sigma}} - \sum_{\bar{q}} V_l \frac{1}{\sqrt{\mathcal{N}}} \phi_{\bar{q}}^* (\vec{R}_l) c_{\bar{q}\bar{\sigma}}^\dagger d_{l\bar{\sigma}} c_{\bar{k}\sigma} \\
 &+ \sum_{j \neq l, \bar{q}} V_j \frac{1}{\sqrt{\mathcal{N}}} \phi_{\bar{q}}^* (\vec{R}_j) c_{\bar{k}\sigma} c_{\bar{q}\bar{\sigma}}^\dagger (d_{j\bar{\sigma}} d_{l\bar{\sigma}}^\dagger d_{l\bar{\sigma}} - d_{j\bar{\sigma}} d_{l\bar{\sigma}}^\dagger d_{l\bar{\sigma}}) \\
 &= \sum_j V_j \frac{1}{\sqrt{\mathcal{N}}} \phi_k^* (\vec{R}_j) d_{j\sigma} d_{l\bar{\sigma}}^\dagger d_{l\bar{\sigma}} - \sum_{\bar{q}} V_l \frac{1}{\sqrt{\mathcal{N}}} \phi_{\bar{q}}^* (\vec{R}_l) c_{\bar{q}\bar{\sigma}}^\dagger d_{l\bar{\sigma}} c_{\bar{k}\sigma} \\
 &= V_l \frac{1}{\sqrt{\mathcal{N}}} \phi_k^* (\vec{R}_l) d_{l\sigma} d_{l\bar{\sigma}}^\dagger d_{l\bar{\sigma}} \\
 &+ \sum_{j \neq l} V_j \frac{1}{\sqrt{\mathcal{N}}} \phi_k^* (\vec{R}_j) d_{j\sigma} d_{l\bar{\sigma}}^\dagger d_{l\bar{\sigma}} + (-1) \sum_{\bar{q}} V_l \frac{1}{\sqrt{\mathcal{N}}} \phi_{\bar{q}}^* (\vec{R}_l) c_{\bar{q}\bar{\sigma}}^\dagger d_{l\bar{\sigma}} c_{\bar{k}\sigma}. \tag{125}
 \end{aligned}$$

e

$$\begin{aligned}
 &\left[c_{\bar{k}\sigma} d_{l\bar{\sigma}}^\dagger d_{l\bar{\sigma}}, \sum_{j\bar{\sigma}} V_j^* d_{j\bar{\sigma}}^\dagger \Psi (\vec{R}_j) \right] \\
 &= \sum_{j\bar{\sigma}\bar{q}} V_j^* \frac{1}{\sqrt{\mathcal{N}}} \phi_{\bar{q}} (\vec{R}_j) \left[c_{\bar{k}\sigma} d_{l\bar{\sigma}}^\dagger d_{l\bar{\sigma}}, d_{j\bar{\sigma}}^\dagger c_{\bar{q}\bar{\sigma}} \right] \\
 &= \sum_{j\bar{\sigma}\bar{q}} V_j^* \frac{1}{\sqrt{\mathcal{N}}} \phi_{\bar{q}} (\vec{R}_j) \left(c_{\bar{k}\sigma} d_{l\bar{\sigma}}^\dagger d_{l\bar{\sigma}} d_{j\bar{\sigma}}^\dagger c_{\bar{q}\bar{\sigma}} - d_{j\bar{\sigma}}^\dagger c_{\bar{q}\bar{\sigma}} c_{\bar{k}\sigma} d_{l\bar{\sigma}}^\dagger d_{l\bar{\sigma}} \right) \\
 &= \sum_{j\bar{\sigma}\bar{q}} V_j^* \frac{1}{\sqrt{\mathcal{N}}} \phi_{\bar{q}} (\vec{R}_j) c_{\bar{k}\sigma} \left(d_{l\bar{\sigma}}^\dagger d_{l\bar{\sigma}} d_{j\bar{\sigma}}^\dagger - d_{j\bar{\sigma}}^\dagger d_{l\bar{\sigma}}^\dagger d_{l\bar{\sigma}} \right) c_{\bar{q}\bar{\sigma}} \\
 &= \sum_{j\bar{q}} V_j^* \frac{1}{\sqrt{\mathcal{N}}} \phi_{\bar{q}} (\vec{R}_j) c_{\bar{k}\sigma} \left(d_{l\bar{\sigma}}^\dagger d_{l\bar{\sigma}} d_{j\sigma}^\dagger - d_{j\sigma}^\dagger d_{l\bar{\sigma}}^\dagger d_{l\bar{\sigma}} \right) c_{\bar{q}\sigma} \\
 &+ \sum_{j\bar{q}} V_j^* \frac{1}{\sqrt{\mathcal{N}}} \phi_{\bar{q}} (\vec{R}_j) c_{\bar{k}\sigma} \left(d_{l\bar{\sigma}}^\dagger d_{l\bar{\sigma}} d_{j\bar{\sigma}}^\dagger - d_{j\bar{\sigma}}^\dagger d_{l\bar{\sigma}}^\dagger d_{l\bar{\sigma}} \right) c_{\bar{q}\bar{\sigma}} \\
 &= \sum_{j\bar{q}} V_j^* \frac{1}{\sqrt{\mathcal{N}}} \phi_{\bar{q}} (\vec{R}_j) c_{\bar{k}\sigma} \left(d_{l\bar{\sigma}}^\dagger d_{l\bar{\sigma}} d_{j\sigma}^\dagger - d_{l\bar{\sigma}}^\dagger d_{l\bar{\sigma}} d_{j\sigma}^\dagger \right) c_{\bar{q}\sigma} \\
 &+ \sum_{j\bar{q}} V_j^* \frac{1}{\sqrt{\mathcal{N}}} \phi_{\bar{q}} (\vec{R}_j) c_{\bar{k}\sigma} \left(d_{l\bar{\sigma}}^\dagger d_{l\bar{\sigma}} d_{j\bar{\sigma}}^\dagger - d_{j\bar{\sigma}}^\dagger d_{l\bar{\sigma}}^\dagger d_{l\bar{\sigma}} \right) c_{\bar{q}\bar{\sigma}} \\
 &= \sum_{j\bar{q}} V_j^* \frac{1}{\sqrt{\mathcal{N}}} \phi_{\bar{q}} (\vec{R}_j) c_{\bar{k}\sigma} \left(d_{l\bar{\sigma}}^\dagger d_{l\bar{\sigma}} d_{j\sigma}^\dagger - d_{j\sigma}^\dagger d_{l\bar{\sigma}}^\dagger d_{l\bar{\sigma}} \right) c_{\bar{q}\sigma} \\
 &= \sum_{\bar{q}} V_l^* \frac{1}{\sqrt{\mathcal{N}}} \phi_{\bar{q}} (\vec{R}_l) c_{\bar{k}\sigma} \left(d_{l\bar{\sigma}}^\dagger d_{l\bar{\sigma}} d_{l\bar{\sigma}}^\dagger - d_{l\bar{\sigma}}^\dagger d_{l\bar{\sigma}}^\dagger d_{l\bar{\sigma}} \right) c_{\bar{q}\bar{\sigma}} \\
 &+ \sum_{j \neq l, \bar{q}} V_j^* \frac{1}{\sqrt{\mathcal{N}}} \phi_{\bar{q}} (\vec{R}_j) c_{\bar{k}\sigma} \left(d_{l\bar{\sigma}}^\dagger d_{l\bar{\sigma}} d_{j\bar{\sigma}}^\dagger - d_{j\bar{\sigma}}^\dagger d_{l\bar{\sigma}}^\dagger d_{l\bar{\sigma}} \right) c_{\bar{q}\bar{\sigma}} \\
 &= \sum_{\bar{q}} V_l^* \frac{1}{\sqrt{\mathcal{N}}} \phi_{\bar{q}} (\vec{R}_l) c_{\bar{k}\sigma} \left(d_{l\bar{\sigma}}^\dagger \left(1 - d_{l\bar{\sigma}}^\dagger d_{l\bar{\sigma}} \right) - d_{l\bar{\sigma}}^\dagger d_{l\bar{\sigma}}^\dagger d_{l\bar{\sigma}} \right) c_{\bar{q}\bar{\sigma}}
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + \sum_{j \neq l, \bar{q}} V_j^* \frac{1}{\sqrt{\mathcal{N}}} \phi_{\bar{q}}(\vec{R}_j) c_{\bar{k}\sigma} \left(d_{l\bar{\sigma}}^\dagger d_{l\bar{\sigma}} d_{j\bar{\sigma}}^\dagger - d_{j\bar{\sigma}}^\dagger d_{l\bar{\sigma}}^\dagger d_{l\bar{\sigma}} \right) c_{\bar{q}\bar{\sigma}} \\
& = \sum_{\bar{q}} V_l^* \frac{1}{\sqrt{\mathcal{N}}} \phi_{\bar{q}}(\vec{R}_l) c_{\bar{k}\sigma} d_{l\bar{\sigma}}^\dagger c_{\bar{q}\bar{\sigma}} \\
& + \sum_{j \neq l, \bar{q}} V_j^* \frac{1}{\sqrt{\mathcal{N}}} \phi_{\bar{q}}(\vec{R}_j) c_{\bar{k}\sigma} \left(d_{l\bar{\sigma}}^\dagger d_{l\bar{\sigma}} d_{j\bar{\sigma}}^\dagger - d_{j\bar{\sigma}}^\dagger d_{l\bar{\sigma}}^\dagger d_{l\bar{\sigma}} \right) c_{\bar{q}\bar{\sigma}} \\
& = \sum_{\bar{q}} V_l^* \frac{1}{\sqrt{\mathcal{N}}} \phi_{\bar{q}}(\vec{R}_l) c_{\bar{k}\sigma} d_{l\bar{\sigma}}^\dagger c_{\bar{q}\bar{\sigma}}.
\end{aligned} \tag{126}$$

E finalmente,

$$\begin{aligned}
& \left[c_{\bar{k}\sigma} d_{l\bar{\sigma}}^\dagger d_{l\bar{\sigma}}, \sum_j U d_{j\uparrow}^\dagger d_{j\uparrow} d_{j\downarrow}^\dagger d_{j\downarrow} \right] \\
& = \sum_j U_j \left[c_{\bar{k}\sigma} d_{l\bar{\sigma}}^\dagger d_{l\bar{\sigma}}, d_{j\uparrow}^\dagger d_{j\uparrow} d_{j\downarrow}^\dagger d_{j\downarrow} \right] \\
& = \sum_j U_j \left(c_{\bar{k}\sigma} d_{l\bar{\sigma}}^\dagger d_{l\bar{\sigma}} d_{j\uparrow}^\dagger d_{j\uparrow} d_{j\downarrow}^\dagger d_{j\downarrow} - d_{j\uparrow}^\dagger d_{j\uparrow} d_{j\downarrow}^\dagger d_{j\downarrow} c_{\bar{k}\sigma} d_{l\bar{\sigma}}^\dagger d_{l\bar{\sigma}} \right) \\
& = \sum_j U_j c_{\bar{k}\sigma} \left(d_{l\bar{\sigma}}^\dagger d_{l\bar{\sigma}} d_{j\uparrow}^\dagger d_{j\uparrow} d_{j\downarrow}^\dagger d_{j\downarrow} - d_{j\uparrow}^\dagger d_{j\uparrow} d_{j\downarrow}^\dagger d_{j\downarrow} d_{l\bar{\sigma}}^\dagger d_{l\bar{\sigma}} \right) \\
& = 0,
\end{aligned} \tag{127}$$

onde usamos

$$\begin{aligned}
& \sum_j U_j c_{\bar{k}\uparrow} \left(d_{l\downarrow}^\dagger d_{l\downarrow} d_{j\uparrow}^\dagger d_{j\uparrow} d_{j\downarrow}^\dagger d_{j\downarrow} - d_{j\uparrow}^\dagger d_{j\uparrow} d_{j\downarrow}^\dagger d_{j\downarrow} d_{l\downarrow}^\dagger d_{l\downarrow} \right) \\
& = U_l c_{\bar{k}\uparrow} \left(d_{l\downarrow}^\dagger d_{l\downarrow} d_{l\uparrow}^\dagger d_{l\uparrow} d_{l\downarrow}^\dagger d_{l\downarrow} - d_{l\uparrow}^\dagger d_{l\uparrow} d_{l\downarrow}^\dagger d_{l\downarrow} d_{l\downarrow}^\dagger d_{l\downarrow} \right) \\
& + \sum_{j \neq l} U_j c_{\bar{k}\uparrow} \left(d_{l\downarrow}^\dagger d_{l\downarrow} d_{j\uparrow}^\dagger d_{j\uparrow} d_{j\downarrow}^\dagger d_{j\downarrow} - d_{j\uparrow}^\dagger d_{j\uparrow} d_{j\downarrow}^\dagger d_{j\downarrow} d_{l\downarrow}^\dagger d_{l\downarrow} \right) \\
& = U_l c_{\bar{k}\uparrow} \left(d_{l\uparrow}^\dagger d_{l\uparrow} d_{l\downarrow}^\dagger d_{l\downarrow} d_{l\downarrow}^\dagger d_{l\downarrow} - d_{l\uparrow}^\dagger d_{l\uparrow} d_{l\downarrow}^\dagger d_{l\downarrow} d_{l\downarrow}^\dagger d_{l\downarrow} \right) \\
& + \sum_{j \neq l} U_j c_{\bar{k}\uparrow} \left(d_{j\uparrow}^\dagger d_{j\uparrow} d_{j\downarrow}^\dagger d_{j\downarrow} d_{l\downarrow}^\dagger d_{l\downarrow} - d_{j\uparrow}^\dagger d_{j\uparrow} d_{j\downarrow}^\dagger d_{j\downarrow} d_{l\downarrow}^\dagger d_{l\downarrow} \right) = 0
\end{aligned} \tag{128}$$

e

$$\begin{aligned}
& \sum_j U_j c_{\bar{k}\downarrow} \left(d_{l\uparrow}^\dagger d_{l\uparrow} d_{j\uparrow}^\dagger d_{j\uparrow} d_{j\downarrow}^\dagger d_{j\downarrow} - d_{j\uparrow}^\dagger d_{j\uparrow} d_{j\downarrow}^\dagger d_{j\downarrow} d_{l\uparrow}^\dagger d_{l\uparrow} \right) \\
& = U_l c_{\bar{k}\downarrow} \left(d_{l\uparrow}^\dagger d_{l\uparrow} d_{l\uparrow}^\dagger d_{l\uparrow} d_{l\downarrow}^\dagger d_{l\downarrow} - d_{l\uparrow}^\dagger d_{l\uparrow} d_{l\downarrow}^\dagger d_{l\downarrow} d_{l\uparrow}^\dagger d_{l\uparrow} \right) \\
& + \sum_{j \neq l} U_j c_{\bar{k}\downarrow} \left(d_{l\uparrow}^\dagger d_{l\uparrow} d_{j\uparrow}^\dagger d_{j\uparrow} d_{j\downarrow}^\dagger d_{j\downarrow} - d_{j\uparrow}^\dagger d_{j\uparrow} d_{j\downarrow}^\dagger d_{j\downarrow} d_{l\uparrow}^\dagger d_{l\uparrow} \right) \\
& = U_l c_{\bar{k}\downarrow} \left(d_{l\uparrow}^\dagger d_{l\uparrow} d_{l\uparrow}^\dagger d_{l\uparrow} d_{l\downarrow}^\dagger d_{l\downarrow} - d_{l\uparrow}^\dagger d_{l\uparrow} d_{l\uparrow}^\dagger d_{l\uparrow} d_{l\downarrow}^\dagger d_{l\downarrow} \right)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 & + \sum_{j \neq l} U_j c_{\vec{k}\downarrow} \left(d_{l\uparrow}^\dagger d_{l\uparrow} d_{j\uparrow}^\dagger d_{j\uparrow} d_{j\downarrow}^\dagger d_{j\downarrow} - d_{j\uparrow}^\dagger d_{j\uparrow} d_{l\uparrow}^\dagger d_{l\uparrow} d_{j\downarrow}^\dagger d_{j\downarrow} \right) = 0 \\
 \end{aligned} \tag{129}$$

Assim determinamos,

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial}{\partial t} c_{\vec{k}\sigma}(t) d_{l\bar{\sigma}}^\dagger(t) d_{l\bar{\sigma}}(t) & = \left(-\frac{i}{\hbar} \right) \varepsilon_{\vec{k}\sigma} c_{\vec{k}\sigma} d_{l\bar{\sigma}}^\dagger d_{l\bar{\sigma}} + \left(-\frac{i}{\hbar} \right) V_l \frac{1}{\sqrt{\mathcal{N}}} \phi_{\vec{k}}^* \left(\vec{R}_l \right) d_{l\sigma} d_{l\bar{\sigma}}^\dagger d_{l\bar{\sigma}} \\
 & + \left(-\frac{i}{\hbar} \right) \sum_{j \neq l} V_j \frac{1}{\sqrt{\mathcal{N}}} \phi_{\vec{k}}^* \left(\vec{R}_j \right) d_{j\sigma} d_{l\bar{\sigma}}^\dagger d_{l\bar{\sigma}} \\
 & + \left(-\frac{i}{\hbar} \right) (-1) \sum_{\bar{q}} V_l \frac{1}{\sqrt{\mathcal{N}}} \phi_{\bar{q}}^* \left(\vec{R}_l \right) c_{\bar{q}\bar{\sigma}}^\dagger d_{l\bar{\sigma}} c_{\vec{k}\sigma} \\
 & + \left(-\frac{i}{\hbar} \right) \sum_{\bar{q}} V_l^* \frac{1}{\sqrt{\mathcal{N}}} \phi_{\bar{q}} \left(\vec{R}_l \right) c_{\vec{k}\sigma} d_{l\bar{\sigma}}^\dagger c_{\bar{q}\bar{\sigma}}, \\
 \end{aligned} \tag{130}$$

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial}{\partial t} \mathcal{G}_{c_{\vec{k}\sigma} d_{l\bar{\sigma}}^\dagger d_{l\bar{\sigma}} d_{j\sigma}}(t) & = -\frac{i}{\hbar} \delta(t) \mathcal{L}^{-1} \sum_n e^{-\beta E_n} \langle n | \left[c_{\vec{k}\sigma}(t) d_{l\bar{\sigma}}^\dagger(t) d_{l\bar{\sigma}}(t), d_{j\sigma}^\dagger(0) \right]_+ | n \rangle \\
 & + \left(-\frac{i}{\hbar} \right) \varepsilon_{\vec{k}\sigma} \mathcal{G}_{c_{\vec{k}\sigma} d_{l\bar{\sigma}}^\dagger d_{l\bar{\sigma}} d_{j\sigma}}(t) + \left(-\frac{i}{\hbar} \right) V_l \frac{1}{\sqrt{\mathcal{N}}} \phi_{\vec{k}}^* \left(\vec{R}_l \right) \mathcal{G}_{d_{l\sigma} n_{d_l \bar{\sigma}} d_{j\sigma}}(t) \\
 & + \left(-\frac{i}{\hbar} \right) \sum_{\bar{j} \neq l} V_{\bar{j}} \frac{1}{\sqrt{\mathcal{N}}} \phi_{\vec{k}}^* \left(\vec{R}_{\bar{j}} \right) \mathcal{G}_{d_{\bar{j}\sigma} n_{d_{\bar{j}} \bar{\sigma}} d_{j\sigma}}(t) \\
 & + \left(-\frac{i}{\hbar} \right) (-1) \sum_{\bar{q}} V_l \frac{1}{\sqrt{\mathcal{N}}} \phi_{\bar{q}}^* \left(\vec{R}_l \right) \mathcal{G}_{c_{\bar{q}\bar{\sigma}}^\dagger d_{l\bar{\sigma}} c_{\vec{k}\sigma} d_{j\sigma}}(t) \\
 & + \left(-\frac{i}{\hbar} \right) \sum_{\bar{q}} V_l^* \frac{1}{\sqrt{\mathcal{N}}} \phi_{\bar{q}} \left(\vec{R}_l \right) \mathcal{G}_{c_{\vec{k}\sigma} d_{l\bar{\sigma}}^\dagger c_{\bar{q}\bar{\sigma}} d_{j\sigma}}(t) \\
 \end{aligned} \tag{131}$$

e

$$\begin{aligned}
 (\varepsilon - \varepsilon_{\vec{k}\sigma} + i\eta) \tilde{\mathcal{G}}_{c_{\vec{k}\sigma} d_{l\bar{\sigma}}^\dagger d_{l\bar{\sigma}} d_{j\sigma}}(\varepsilon) & = V_l \frac{1}{\sqrt{\mathcal{N}}} \phi_{\vec{k}}^* \left(\vec{R}_l \right) \tilde{\mathcal{G}}_{d_{l\sigma} n_{d_l \bar{\sigma}} d_{j\sigma}}(\varepsilon) \\
 & + \sum_{\bar{j} \neq l} V_{\bar{j}} \frac{1}{\sqrt{\mathcal{N}}} \phi_{\vec{k}}^* \left(\vec{R}_{\bar{j}} \right) \tilde{\mathcal{G}}_{d_{\bar{j}\sigma} n_{d_{\bar{j}} \bar{\sigma}} d_{j\sigma}}(\varepsilon) \\
 & + \sum_{\bar{q}} V_l^* \frac{1}{\sqrt{\mathcal{N}}} \phi_{\bar{q}} \left(\vec{R}_l \right) \tilde{\mathcal{G}}_{c_{\vec{k}\sigma} d_{l\bar{\sigma}}^\dagger c_{\bar{q}\bar{\sigma}} d_{j\sigma}}(\varepsilon) \\
 & + (-1) \sum_{\bar{q}} V_l \frac{1}{\sqrt{\mathcal{N}}} \phi_{\bar{q}}^* \left(\vec{R}_l \right) \tilde{\mathcal{G}}_{c_{\bar{q}\bar{\sigma}}^\dagger d_{l\bar{\sigma}} c_{\vec{k}\sigma} d_{j\sigma}}(\varepsilon). \\
 \end{aligned} \tag{132}$$

Prosseguimos com a aproximação Hubbard I, isto é, fazemos

$$\tilde{\mathcal{G}}_{c_{\vec{k}\sigma} d_{l\bar{\sigma}}^\dagger c_{\bar{q}\bar{\sigma}} d_{j\sigma}}(\varepsilon) \simeq \langle d_{l\bar{\sigma}}^\dagger c_{\bar{q}\bar{\sigma}} \rangle \tilde{\mathcal{G}}_{c_{\vec{k}\sigma} d_{j\sigma}}(\varepsilon), \tag{133}$$

e

$$\tilde{\mathcal{G}}_{c_{\vec{q}\bar{\sigma}}^\dagger d_{l\bar{\sigma}} c_{\vec{k}\sigma}, d_{j\sigma}}(\epsilon) \simeq \langle c_{\vec{q}\bar{\sigma}}^\dagger d_{l\bar{\sigma}} \rangle \tilde{\mathcal{G}}_{c_{\vec{k}\sigma}, d_{j\sigma}}(\epsilon). \quad (134)$$

Usando-se mais uma vez a propriedade

$$\sum_{\vec{q}} V_l^* \frac{1}{\sqrt{\mathcal{N}}} \phi_{\vec{q}}(\vec{R}_l) = \sum_{\vec{q}} V_l \frac{1}{\sqrt{\mathcal{N}}} \phi_{\vec{q}}^*(\vec{R}_l), \quad (135)$$

chegamos a

$$\begin{aligned} \left(\epsilon - \epsilon_{ld\sigma} - \sum_{\vec{k}} \frac{1}{\mathcal{N}} \frac{|V_l|^2}{(\epsilon - \epsilon_{\vec{k}\sigma} + i\eta)} - U_l + i\eta \right) \tilde{\mathcal{G}}_{d_{l\sigma} n_{d_l \bar{\sigma}}, d_{j\sigma}}(\epsilon) &= \delta_{lj} \langle n_{d_l \bar{\sigma}} \rangle \\ + \sum_{\vec{j} \neq l} \sum_{\vec{k}} \frac{1}{\mathcal{N}} \frac{V_j V_l^* \phi_{\vec{k}}(\vec{R}_l) \phi_{\vec{k}}^*(\vec{R}_j)}{(\epsilon - \epsilon_{\vec{k}\sigma} + i\eta)} \tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\sigma} n_{d_l \bar{\sigma}}, d_{j\sigma}}(\epsilon). \end{aligned} \quad (136)$$

Agora fazemos

$$\tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\sigma} n_{d_l \bar{\sigma}}, d_{j\sigma}}(\epsilon) \simeq \langle n_{d_l \bar{\sigma}} \rangle \tilde{\mathcal{G}}_{d_j d_j}^\sigma(\epsilon) \quad (137)$$

para mostrar que

$$\begin{aligned} (\epsilon - \epsilon_{ld\sigma} - U_l + i\Gamma_{ll\sigma}^0) \tilde{\mathcal{G}}_{d_{l\sigma} n_{d_l \bar{\sigma}}, d_{j\sigma}}(\epsilon) &= \langle n_{d_l \bar{\sigma}} \rangle \\ &\times \left\{ \delta_{lj} + \sum_{\vec{j} \neq l} \left(\Sigma_{jl\sigma}^R(\epsilon) - i\Gamma_{jl\sigma} \right) \tilde{\mathcal{G}}_{d_j d_j}^\sigma(\epsilon) \right\}. \end{aligned} \quad (138)$$

No caso de duas impurezas acopladas lateralmente, verificamos também que

$$\Gamma_{lj\sigma} = \pi V_j^* V_l \frac{1}{\mathcal{N}_\sigma} \sum_{\vec{k}} \delta(\epsilon - \epsilon_{\vec{k}}) = \pi V_j^* V_l \rho_{0\sigma} = \pi V_j^* V_l \rho_0 (1 + \sigma P) \quad (139)$$

e

$$\Sigma_{lj\sigma}^R(\epsilon) = V_j^* V_l \frac{1}{\mathcal{N}_\sigma} \sum_{\vec{k}} \frac{1}{\epsilon - \epsilon_{\vec{k}\sigma}} = V_j^* V_l \rho_0 (1 + \sigma P) \ln \left(\frac{1 + \frac{\epsilon}{D_\sigma}}{1 - \frac{\epsilon}{D_\sigma}} \right). \quad (140)$$

Adicionalmente, no limite de banda larga, temos $\frac{\epsilon}{D_\sigma} \rightarrow 0$ e $\ln \left(\frac{1 + \frac{\epsilon}{D_\sigma}}{1 - \frac{\epsilon}{D_\sigma}} \right) \rightarrow \ln 1 \rightarrow 0$ e assim, $\Sigma_{lj\sigma}^R(\epsilon) = 0$. Assumindo acoplamentos simétricos $V_j = V_l$, definimos o parâmetro de Anderson

$$\Gamma_{lj\sigma} = \Gamma_\sigma = \Gamma(1 + \sigma P) \quad (141)$$

dependente do spin. O sistema de equações a ser resolvido é portanto

$$(\varepsilon - \varepsilon_{jd\sigma} + i\Gamma_\sigma) \tilde{\mathcal{G}}_{d_j d_j}^\sigma(\varepsilon) = 1 + U_j \tilde{\mathcal{G}}_{d_j \sigma n_{d_j \bar{\sigma}}, d_j \sigma}(\varepsilon) + \sum_{l \neq j} (-i\Gamma_\sigma) \tilde{\mathcal{G}}_{d_l d_j}^\sigma(\varepsilon) \quad (142)$$

$$(\varepsilon - \varepsilon_{ld\sigma} + i\Gamma_\sigma) \tilde{\mathcal{G}}_{d_l d_j}^\sigma(\varepsilon) = U_l \tilde{\mathcal{G}}_{d_l \sigma n_{d_l \bar{\sigma}}, d_j \sigma}(\varepsilon) + (-i\Gamma_\sigma) \tilde{\mathcal{G}}_{d_j d_j}^\sigma(\varepsilon) \quad (143)$$

e

$$(\varepsilon - \varepsilon_{ld\sigma} - U_l + i\Gamma_\sigma) \tilde{\mathcal{G}}_{d_l \sigma n_{d_l \bar{\sigma}}, d_j \sigma}(\varepsilon) = \langle n_{d_l \bar{\sigma}} \rangle \left\{ \delta_{lj} + \sum_{\tilde{j} \neq l} (-i\Gamma_\sigma) \tilde{\mathcal{G}}_{d_j d_j}^\sigma(\varepsilon) \right\}. \quad (144)$$

Expandindo-se as equações acima, temos

$$(\varepsilon - \varepsilon_{1d\sigma} + i\Gamma_\sigma) \tilde{\mathcal{G}}_{d_1 d_1}^\sigma(\varepsilon) = 1 + U_1 \tilde{\mathcal{G}}_{d_1 \sigma n_{d_1 \bar{\sigma}}, d_1 \sigma}(\varepsilon) - i\Gamma_\sigma \tilde{\mathcal{G}}_{d_2 d_1}^\sigma(\varepsilon) \quad (145)$$

$$(\varepsilon - \varepsilon_{2d\sigma} + i\Gamma_\sigma) \tilde{\mathcal{G}}_{d_2 d_2}^\sigma(\varepsilon) = 1 + U_2 \tilde{\mathcal{G}}_{d_2 \sigma n_{d_2 \bar{\sigma}}, d_2 \sigma}(\varepsilon) - i\Gamma_\sigma \tilde{\mathcal{G}}_{d_1 d_2}^\sigma(\varepsilon) \quad (146)$$

$$(\varepsilon - \varepsilon_{1d\sigma} + i\Gamma_\sigma) \tilde{\mathcal{G}}_{d_1 d_2}^\sigma(\varepsilon) = U_1 \tilde{\mathcal{G}}_{d_1 \sigma n_{d_1 \bar{\sigma}}, d_2 \sigma}(\varepsilon) - i\Gamma_\sigma \tilde{\mathcal{G}}_{d_2 d_2}^\sigma(\varepsilon), \quad (147)$$

$$(\varepsilon - \varepsilon_{2d\sigma} + i\Gamma_\sigma) \tilde{\mathcal{G}}_{d_2 d_1}^\sigma(\varepsilon) = U_2 \tilde{\mathcal{G}}_{d_2 \sigma n_{d_2 \bar{\sigma}}, d_1 \sigma}(\varepsilon) - i\Gamma_\sigma \tilde{\mathcal{G}}_{d_1 d_1}^\sigma(\varepsilon), \quad (148)$$

$$(\varepsilon - \varepsilon_{1d\sigma} - U_1 + i\Gamma_\sigma) \tilde{\mathcal{G}}_{d_1 \sigma n_{d_1 \bar{\sigma}}, d_1 \sigma}(\varepsilon) = \langle n_{d_1 \bar{\sigma}} \rangle - i\Gamma_\sigma \langle n_{d_1 \bar{\sigma}} \rangle \tilde{\mathcal{G}}_{d_2 d_1}^\sigma(\varepsilon), \quad (149)$$

$$(\varepsilon - \varepsilon_{2d\sigma} - U_2 + i\Gamma_\sigma) \tilde{\mathcal{G}}_{d_2 \sigma n_{d_2 \bar{\sigma}}, d_2 \sigma}(\varepsilon) = \langle n_{d_2 \bar{\sigma}} \rangle - i\Gamma_\sigma \langle n_{d_2 \bar{\sigma}} \rangle \tilde{\mathcal{G}}_{d_1 d_2}^\sigma(\varepsilon), \quad (150)$$

$$(\varepsilon - \varepsilon_{1d\sigma} - U_1 + i\Gamma_\sigma) \tilde{\mathcal{G}}_{d_1 \sigma n_{d_1 \bar{\sigma}}, d_2 \sigma}(\varepsilon) = -i\Gamma_\sigma \langle n_{d_1 \bar{\sigma}} \rangle \tilde{\mathcal{G}}_{d_2 d_2}^\sigma(\varepsilon) \quad (151)$$

e

$$(\varepsilon - \varepsilon_{2d\sigma} - U_2 + i\Gamma_\sigma) \tilde{\mathcal{G}}_{d_2 \sigma n_{d_2 \bar{\sigma}}, d_1 \sigma}(\varepsilon) = -i\Gamma_\sigma \langle n_{d_2 \bar{\sigma}} \rangle \tilde{\mathcal{G}}_{d_1 d_1}^\sigma(\varepsilon). \quad (152)$$

Por questão de simplicidade, vamos considerar o limite $U_1 = U_2 \rightarrow \infty$, o qual resulta em

$$\tilde{\mathcal{G}}_{d_1 d_1}^{\sigma}(\varepsilon) = \frac{1 - \langle n_{d_1 \bar{\sigma}} \rangle}{\left[(\varepsilon - \varepsilon_{1d\sigma} + i\Gamma_{\sigma}) + \Gamma_{\sigma}^2 \frac{(1 - \langle n_{d_2 \bar{\sigma}} \rangle)(1 - \langle n_{d_1 \bar{\sigma}} \rangle)}{(\varepsilon - \varepsilon_{2d\sigma} + i\Gamma_{\sigma})} \right]} \quad (153)$$

e

$$\tilde{\mathcal{G}}_{d_2 d_1}^{\sigma}(\varepsilon) = -i\Gamma_{\sigma} \left\{ \frac{(1 - \langle n_{d_2 \bar{\sigma}} \rangle)}{(\varepsilon - \varepsilon_{2d\sigma} + i\Gamma_{\sigma})} \right\} \tilde{\mathcal{G}}_{d_1 d_1}^{\sigma}(\varepsilon). \quad (154)$$

Verificamos que as demais funções de Green $\tilde{\mathcal{G}}_{d_1 d_2}^{\sigma}$ e $\tilde{\mathcal{G}}_{d_2 d_2}^{\sigma}$ podem ser obtidas trocando-se os índices $1 \leftrightarrow 2$ na 153 e 154.

Adicionalmente, as ocupações das impurezas são calculadas de forma auto consistente, conforme o conjunto de equações dado por

$$\langle n_{d_1 \uparrow} \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} d\varepsilon f(\varepsilon) \left\{ -\frac{1}{\pi} \Im \left[\tilde{\mathcal{G}}_{d_1 d_1}^{\uparrow}(\varepsilon, \langle n_{d_1 \downarrow} \rangle, \langle n_{d_2 \downarrow} \rangle) \right] \right\}, \quad (155)$$

$$\langle n_{d_2 \uparrow} \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} d\varepsilon f(\varepsilon) \left\{ -\frac{1}{\pi} \Im \left[\tilde{\mathcal{G}}_{d_2 d_2}^{\uparrow}(\varepsilon, \langle n_{d_1 \downarrow} \rangle, \langle n_{d_2 \downarrow} \rangle) \right] \right\}, \quad (156)$$

$$\langle n_{d_1 \downarrow} \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} d\varepsilon f(\varepsilon) \left\{ -\frac{1}{\pi} \Im \left[\tilde{\mathcal{G}}_{d_1 d_1}^{\downarrow}(\varepsilon, \langle n_{d_1 \uparrow} \rangle, \langle n_{d_2 \uparrow} \rangle) \right] \right\} \quad (157)$$

e

$$\langle n_{d_2 \downarrow} \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} d\varepsilon f(\varepsilon) \left\{ -\frac{1}{\pi} \Im \left[\tilde{\mathcal{G}}_{d_2 d_2}^{\downarrow}(\varepsilon, \langle n_{d_1 \uparrow} \rangle, \langle n_{d_2 \uparrow} \rangle) \right] \right\}. \quad (158)$$

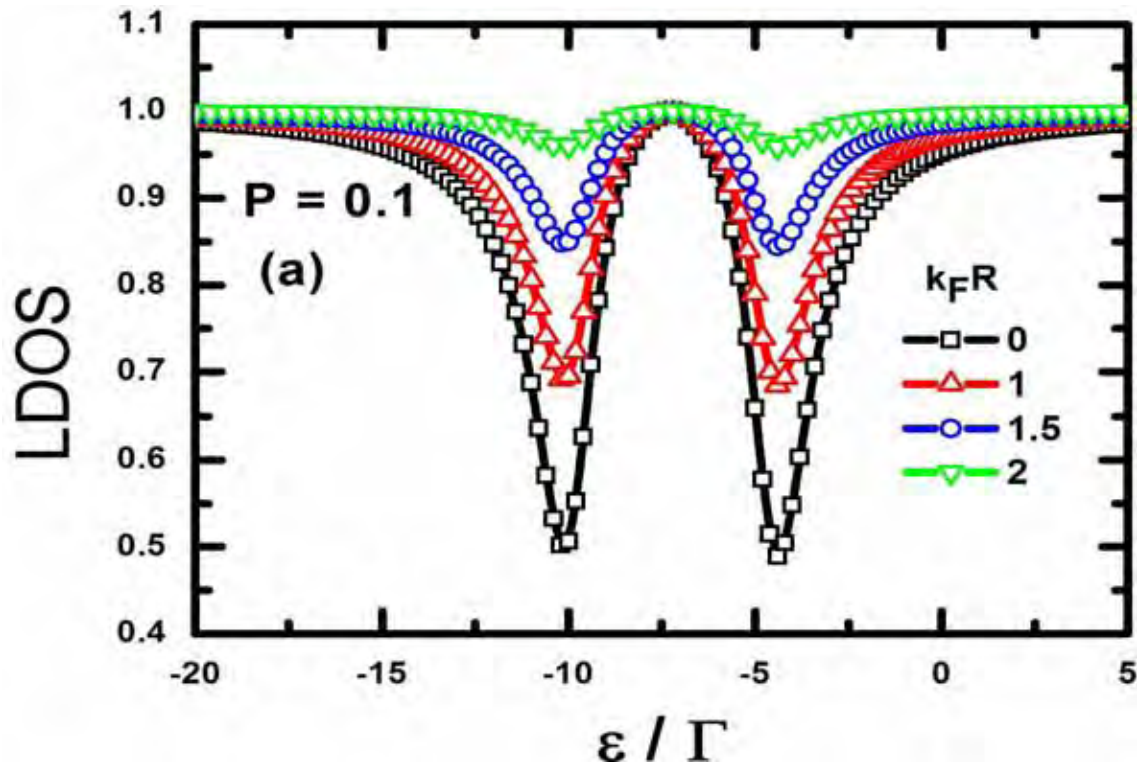
6 RESULTADOS

6.1 PARÂMETROS

Aqui apresentamos os resultados obtidos através da formulação desenvolvida na seção anterior. A escala de energia adotada é o parâmetro de Anderson Γ . Nós empregamos o seguinte conjunto de parâmetros: $\Gamma = 200$ meV, as energias das impurezas $\varepsilon_{1d\sigma} = \varepsilon_{1d} = -10\Gamma$ e $\varepsilon_{2d\sigma} = \varepsilon_{2d} = -4,5\Gamma$ (AGUIAR-HUALDE et al., 2007; CHIAPPE; LOUIS, 2006; FU et al., 2007; LIN; NETO; JONES, 2006; OTTE et al., 2008; TERNES; HEINRICH; SCHNEIDER, 2009; ÚJSÁGHY et al., 2000). Tais valores correspondem a uma temperatura Kondo $T_K \approx 50K$ encontrada no sistema de Co/Cu (111) com a interação de Coulomb $U = 2.9eV$ (KNORR et al., 2002; LIN; NETO; JONES, 2006; ÚJSÁGHY et al., 2000). Assim, a aproximação Hubbard é empregada com $T = \Gamma/10k_B = 231.1K$ apenas para evitar a física Kondo. Medimos a distância lateral R entre a ponta do STM e as impurezas em unidades de k_F^{-1} para introduzir o parâmetro adimensional $k_F R$ [ver fig. 1]. Usamos também uma polarização de spins $P = 0,1$ para gerar batimentos quânticos spin-polarizados na LDOS. Aqui adotamos $k_{F\uparrow} = k_F$.

6.2 LDOS PARA A SUPERFÍCIE METÁLICA

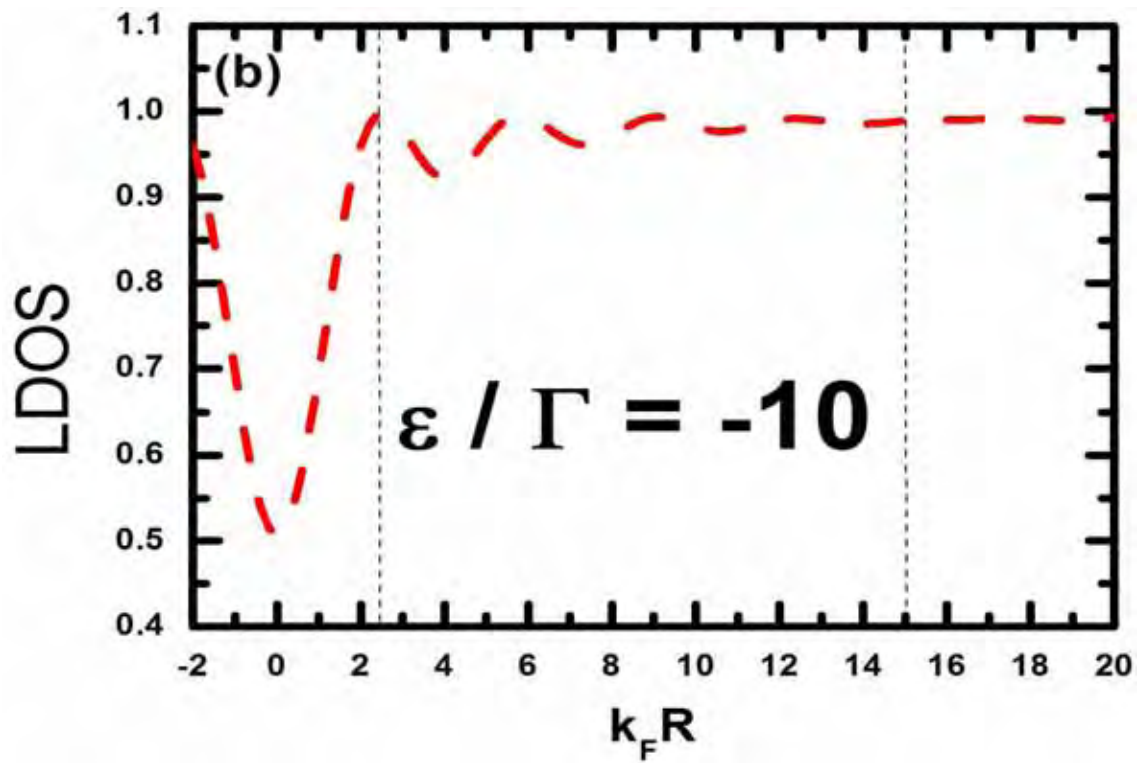
Figura 5 – $k_B T = 0, 1\Gamma$. LDOS (55) de uma superfície com $P = 0,1$ em função de ε/Γ para diferentes valores de $k_F R$ no limite de curto alcance.



O perfil Fano apresenta duas antirressonâncias em $\varepsilon = \varepsilon_{1d} = -10\Gamma$ e $\varepsilon = \varepsilon_{2d} = -4,5\Gamma$, as quais diminuem com o aumento da distância.

Fonte: Elaboração da autora.

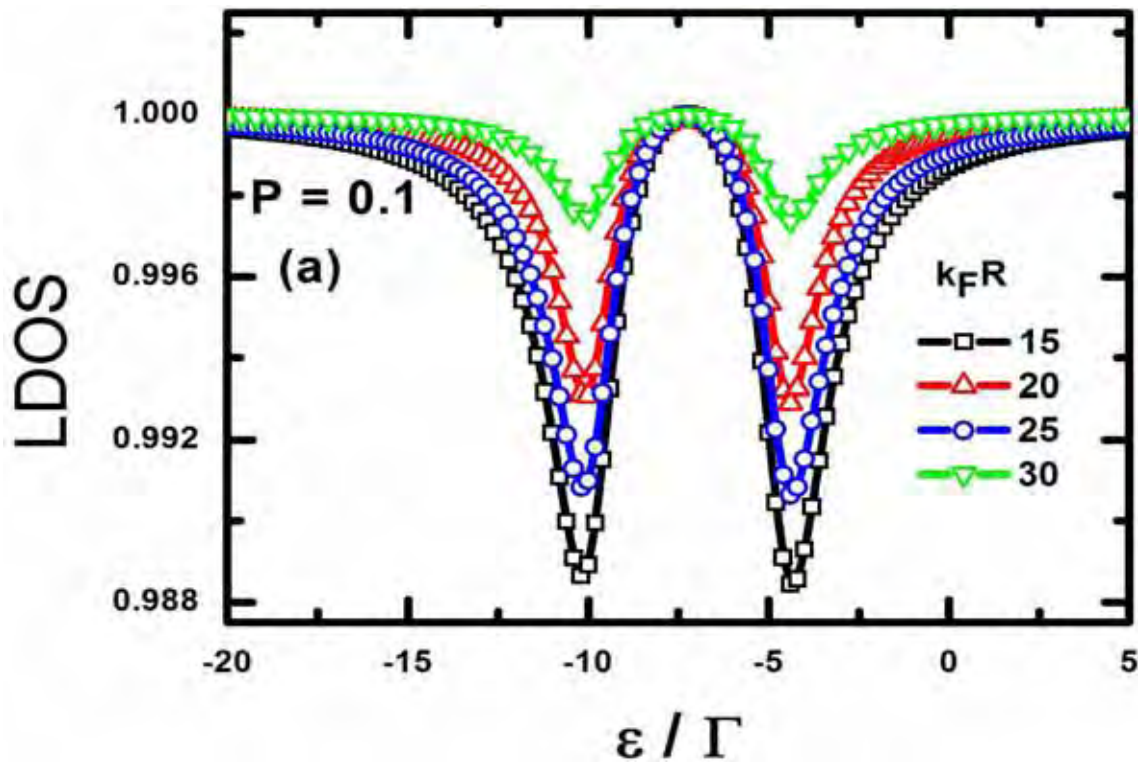
Figura 6 – $k_B T = 0, 1\Gamma$. Fixando-se a energia em $\varepsilon = -10\Gamma$, oscilações de Friedel aparecem na LDOS.



Dividimos em três regiões que denominamos de limite de curto alcance ($-2,5 \lesssim k_F R \lesssim 2,5$), alcance intermediário ($2,5 \lesssim k_F R \lesssim 15$) e longo alcance ($15 \lesssim k_F R \lesssim 20$).

Fonte: Elaboração da autora.

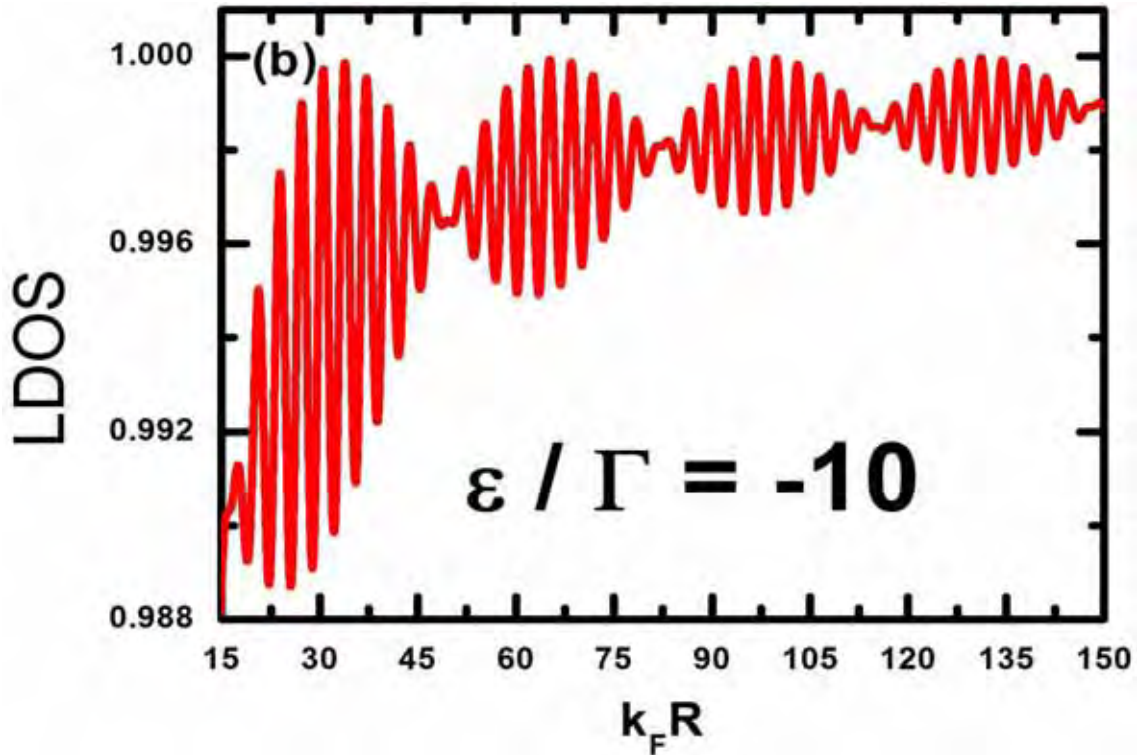
Figura 7 – $k_B T = 0, 1\Gamma$. LDOS (55) de uma superfície metálica com $P = 0, 1$, em função de ε/Γ para diferentes valores de $k_F R$ no limite de longo alcance.



O perfil Fano apresenta duas antirressonâncias em $\varepsilon = \varepsilon_{1d} = -10\Gamma$ e $\varepsilon = \varepsilon_{2d} = -4,5\Gamma$, o qual apresenta um comportamento oscilatório para distâncias cada vez maiores.

Fonte: Elaboração da autora.

Figura 8 – $k_B T = 0,1\Gamma$. Batimentos quânticos spin-polarizados amortecidos emergem na LDOS da superfície metálica em função de $k_F R$ com $\varepsilon = \varepsilon_{1d} = -10\Gamma$.



Fonte: Elaboração da autora.

Na 5 temos a densidade de estados (55) em função da energia no limite que denominamos de curto alcance para a superfície metálica. Observamos para todos os valores de $k_F R$ duas antirressonâncias Fano em torno da energia de cada impureza. Com o aumento da distância da ponta do STM com relação às impurezas, nota-se um achatamento contínuo do perfil Fano, ou seja, ele tende ao valor constante da densidade de estados do metal hospedeiro na ausência das impurezas. A origem das antirressonâncias está no fator de Fano, que no caso de duas dimensões, sempre apresenta interferência destrutiva. Já o amortecimento têm origem na função de Friedel que, nesse caso, depende de uma função de Bessel J_0 .

Na 6 temos a evolução da LDOS em função de $k_F R$, exatamente no valor da antirressonância Fano para a impureza adsorvida, em $\varepsilon = \varepsilon_{d1} = -10\Gamma$. Em $k_F R = 0$, a LDOS apresenta uma queda. Tal comportamento é um resultado da blindagem de carga em torno das impurezas pelos elétrons de condução, a qual suprime a LDOS do metal. Longe da posição das impurezas, a LDOS é ditada pelas oscilações de Friedel, que também conduzem a uma diminuição da LDOS no limite de longo alcance. A característica evanescente da LDOS é um resultado da relação entre a expressão de Friedel $A_{j\sigma}^{2D}$ e o parâmetro de Fano $q_{j\sigma}^{2D}$. Essas quantidades são regidas pela 61 e 74, sendo que a primeira evolui de acordo com a função de Bessel de ordem zero J_0 . Tal amortecimento na LDOS já foi observado experimentalmente em um sistema composto por um metal hospedeiro de Fe e uma impureza de Co (KAWAHARA et al., 2010).

A 7 ilustra o gráfico da linha Fano no regime que denominamos de longo alcance ($k_F R > 15$). As antirressonâncias em $\varepsilon = -10\Gamma$ e $\varepsilon = -4.5\Gamma$ são observadas semelhantemente aquelas de limite de curto alcance (5). No entanto, uma nova característica emerge. Enquanto que no caso de curto alcance as antirressonâncias ficam suprimidas quando $k_F R$ aumenta, no limite de longo alcance as antirressonâncias oscilam com $k_F R$. Este é um resultado do perfil oscilatório observado na LDOS com o aumento de $k_F R$, análogo ao limite de alcance intermediário (veja 6).

As oscilações das antirressonâncias podem ser visualizadas na 8, onde mostramos a LDOS em $\varepsilon = \varepsilon_{d_1} = -10\Gamma$ no limite de longo alcance. Batimentos são observados na LDOS devido aos números de onda de Fermi para spins “up” e “down” ligeiramente diferentes (veja a 58). A origem da amplitude não pronunciada da LDOS está na função de Friedel, a qual na região de longo alcance, apresenta oscilações com um decaimento mais fraco com respeito à região de alcance intermediário.

6.3 LDOS PARA O FIO QUÂNTICO

A 9 mostra a LDOS versus a energia para diferentes valores de $k_F R$ no limite que denominamos de curto alcance. Para a ponta do STM em $k_F R = 0$, a LDOS mostra a estrutura de duas antirressonâncias como visto na 5. Entretanto quando $k_F R$ aumenta, as antirressonâncias convertem-se para ressonâncias passando por perfis intermediários (formas de linhas Fano assimétricas). Esse comportamento na LDOS foi observado recentemente na experiência realizada por Prüser *et al.* com átomos de Fe e Co enterrados abaixo da superfície de Cu(100). A origem da conversão das antirressonâncias em ressonâncias na LDOS está no fator de Fano, que para o caso de uma dimensão, depende de uma função oscilatória e não amortecida. A origem da amplitude pronunciada está também no fator de Fano e na função de Friedel, que nesse caso, dependem de funções oscilatórias e não amortecidas.

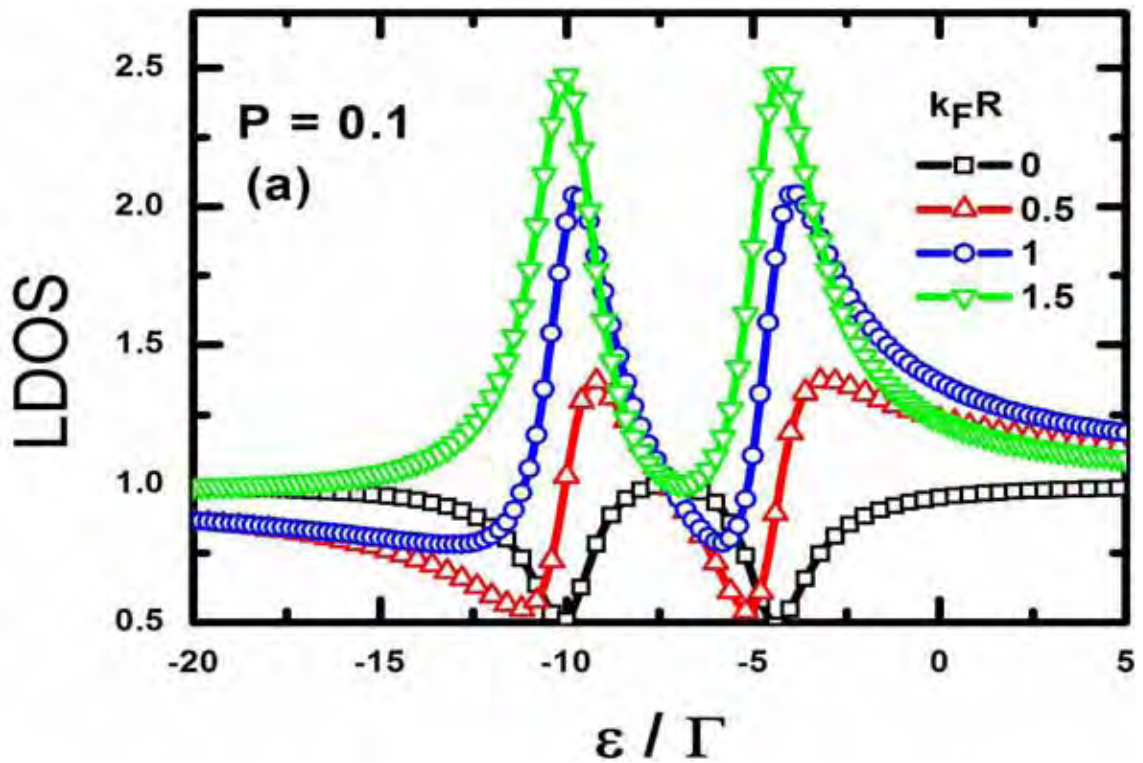
Observamos na 10 a evolução da LDOS em função de $k_F R$. Ocorrem oscilações não evanescentes, moduladas por uma amplitude de batimentos. Esse comportamento não amortecido é explicado pela 77 e 80 referente as oscilações de Friedel ($A_{j\sigma}^{1D}$) e interferência de Fano ($q_{j\sigma}^{1D}$), respectivamente. Essas quantidades são funções trigonométricas simples, sem amortecimento. Essa característica é devido a ausência de uma dimensão extra para a dispersão das ondas eletrônicas. Por outro lado, na propagação da onda em duas dimensões, essa é espalhada em um plano, levando a um decaimento espacial na LDOS. Assim, a amplitude dos batimentos não amortecidos no fio quântico é maior do que na superfície metálica. Isso significa que nesse caso, o sinal da LDOS pode ser mais facilmente resolvido experimentalmente.

6.4 POLARIZAÇÃO DE TRANSPORTE

Outro parâmetro investigado é a polarização de transporte dada pela 56. Como a condutância da 54 é proporcional à LDOS (55), o metal spin-polarizado filtra elétrons com um dado spin, os quais tunelam da (ou para a) ponta do STM. Essa filtragem é dominada pela componente do spin majoritário. Assim, dispositivos sem impurezas se comportam como filtros de spins com uma polarização espacialmente uniforme que coincide com o valor dado pela 31. Aqui adotamos $P = 0,1$. Devido à posição das impurezas e a dimensão do hospedeiro, essa polarização é perturbada de duas formas distintas. Em ambos os sistemas como se pode ver na 11 e na 12 com voltagem $\phi = \varepsilon_{1d} = -10\Gamma$, a polarização oscila em torno de 0,1. Na 11 temos a polarização versus o parâmetro adimensional $k_F R$, onde observamos batimentos amortecidos para o sistema da superfície metálica. A origem da amplitude não pronunciada na polarização de transporte está na função de Friedel que, nesse caso, depende de uma função de Bessel J_0 , já que na região de longo alcance ela apresenta oscilações com um decaimento mais fraco, em relação a região de alcance intermediário. Como podemos ver na 11, a amplitude dos batimentos da polarização na superfície metálica é extremamente suprimida e não muda o seu sinal. Nesse caso a polarização mantém-se positiva ($P_T > 0$).

Ao contrário do sistema da superfície metálica, onde temos amortecimento, o efeito “electron focusing” no fio quântico conduz a oscilações não amortecidas e a uma polarização com amplitude pronunciada (12). A origem dessa amplitude pronunciada está no fator de Fano e na função de Friedel, que nesse caso dependem de funções oscilatórias e não amortecidas. Nesse caso a polarização não excede $P_T \approx +0,62$ ou não fica abaixo de $P_T \approx -0,5$. Portanto, a corrente de polarização que atravessa a junção formada pela ponta do STM e a superfície, alterna de spin “up” (+0,62) para spin “down” (-0,5), dependendo da posição da ponta. Além disso, ao longo dessa direção de sondagem, a polarização não só pode inverter a componente do spin majoritário, mas também pode tornar-se zero em algumas regiões, onde o desequilíbrio de spins é totalmente suprimido. Como resultado, temos uma corrente de tunelamento sem polarização apenas em posições específicas da superfície da amostra. Assim, o fio quântico funciona como um filtro de spins com uma eficiência mais elevada.

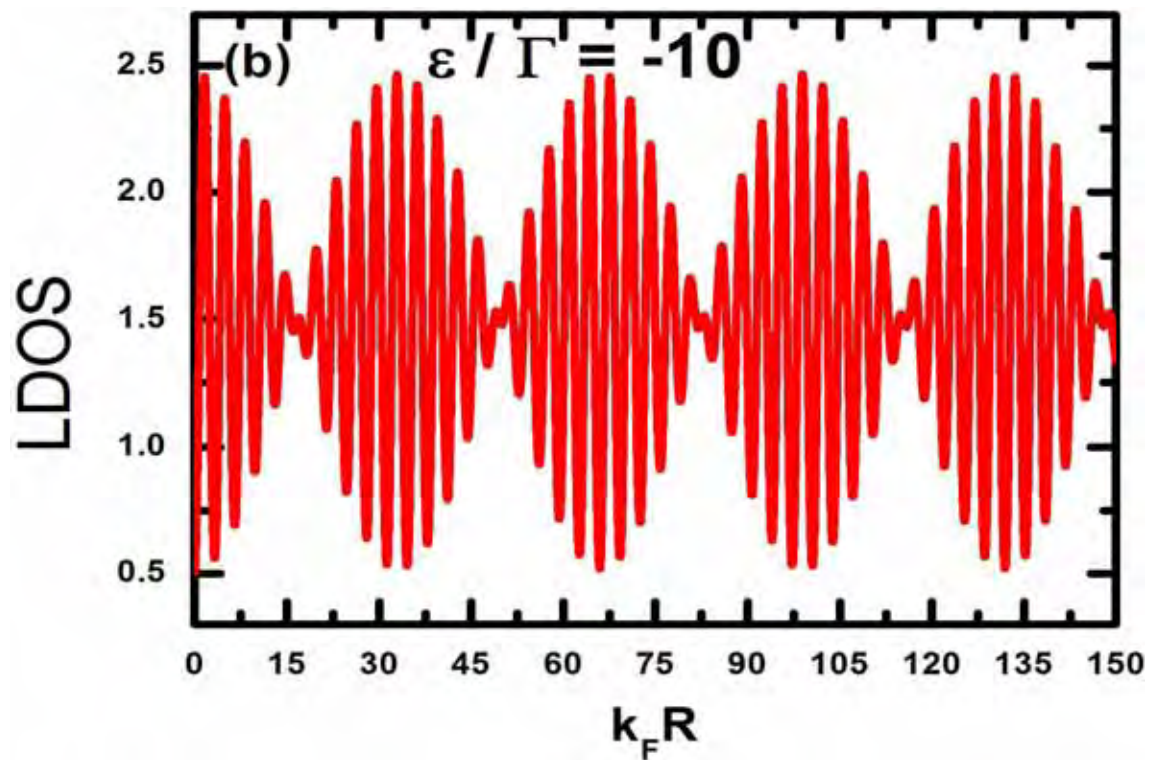
Figura 9 – LDOS (55) em $k_B T = 0,1\Gamma$ de um fio quântico spin-polarizado com $P = 0,1$ em função de ε/Γ para diferentes valores de $k_F R$.



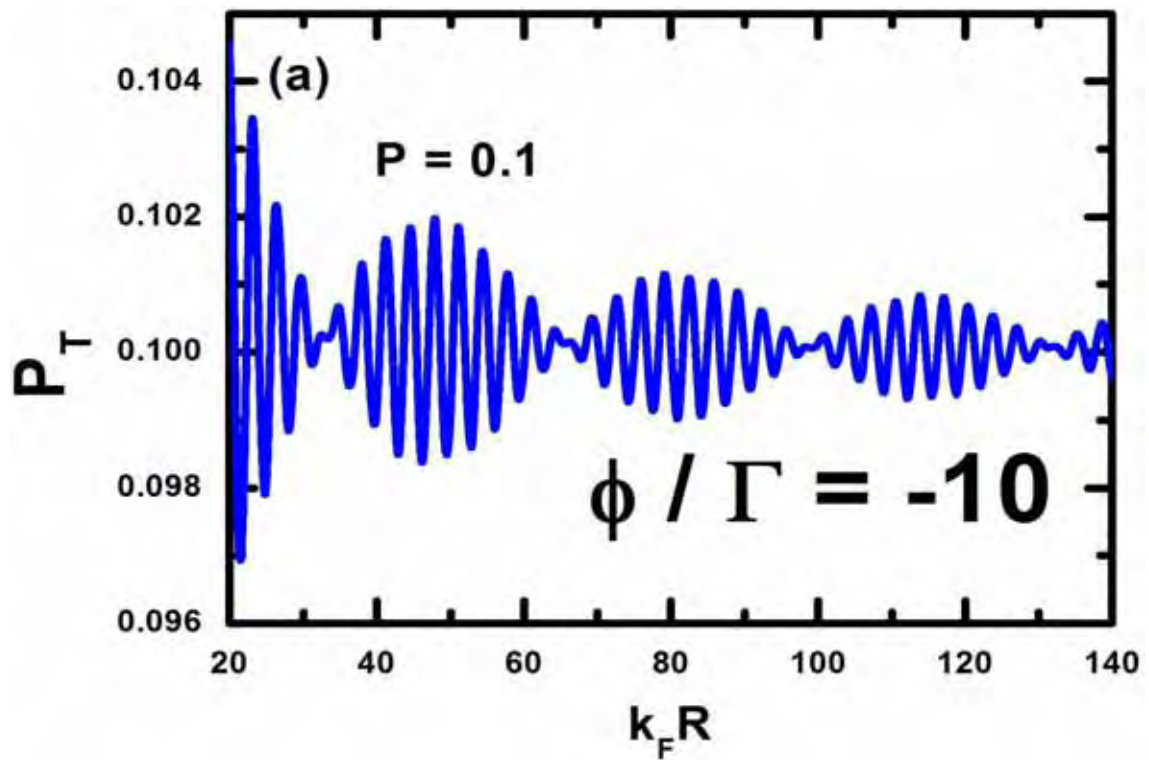
Perfis Fano aparecem em torno de $\varepsilon = \varepsilon_{1d} = -10\Gamma$ e $\varepsilon = \varepsilon_{2d} = -4,5\Gamma$. Esse par de antirressonâncias (linha vermelha) pode ser convertido para ressonâncias (linha verde), apenas movendo-se lateralmente a ponta do STM.

Fonte: Elaboração da autora.

Figura 10 – Em oposição ao comportamento da superfície metálica, batimentos quânticos spin-polarizados não amortecidos aparecem na LDOS em $\varepsilon = \varepsilon_{1d} = -10\Gamma$.

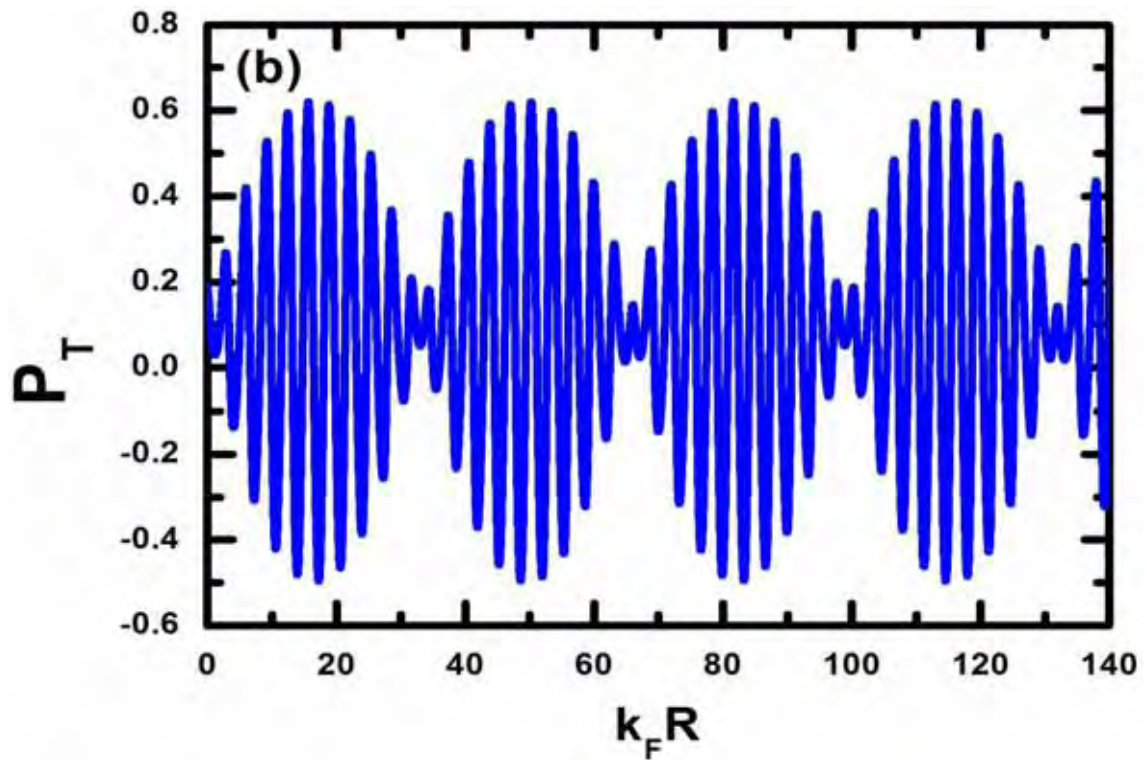


Fonte: Elaboração da autora.

Figura 11 – Polarização dada pela 56 com $k_B T = 0, 1\Gamma$ e voltagem $\phi = \varepsilon_{ld} = -10\Gamma$.

Batimentos quânticos spin-polarizados amortecidos aparecem na polarização do dispositivo constituído pela superfície metálica.

Fonte: Elaboração da autora.

Figura 12 – Polarização dada pela 56 com $k_B T = 0, 1\Gamma$ e tensão $\phi = \varepsilon_{1d} = -10\Gamma$.

Batimentos não amortecidos ocorrem na polarização do fio quântico. Em ambas as situações, temos um filtro de spins, com uma polarização que oscila em torno de $P = 0, 1$. No caso do fio quântico, essa oscilação é mais pronunciada.

Fonte: Elaboração da autora.

7 CONCLUSÃO

A fim de investigar um sistema ferromagnético com duas impurezas, calculamos a LDOS e a polarização de metais em duas dimensionalidades diferentes. Impurezas acopladas como as da 1 foram investigadas. As análises foram realizadas considerando-se uma superfície metálica e um fio quântico descritos pelo modelo de Anderson de duas impurezas na aproximação de um gás de elétrons spin-polarizado com impurezas fora do regime Kondo. Foi apresentado um modelo onde um metal 1D na presença de estados localizados produz um comportamento não amortecido no perfil Fano [veja 9 e 10], similar ao observado experimentalmente (PRÜSER et al., 2012). Em contraste, o modelo 2D revelou um comportamento oscilatório amortecido (5, 6, 7 e 8). Demonstramos que essas características opostas tem origem na relação entre a função de Friedel e o parâmetro de Fano, que assumem diferentes formas de acordo com a dimensionalidade do metal. Mantendo-se a energia fixa e variando-se a posição da ponta do STM, verificamos o surgimento de batimentos quânticos spin-polarizados na LDOS dada pela 55, bem como na polarização da 56. Tal efeito é devido à interferência entre os números de onda de Fermi ligeiramente diferentes $k_{F\uparrow}$ e $k_{F\downarrow}$ (58) na LDOS em metais com baixa polarização. Portanto, o fio quântico comporta-se como um filtro de spins espacialmente resolvido com uma alta eficiência como podemos ver na 12. Longe das impurezas, esse dispositivo pode elevar ou inverter localmente a polarização inicial do hospedeiro, também é capaz de gerar regiões onde essa polarização torna-se nula. Como aplicação experimental possível desse sistema, sugerimos os sistemas investigados por Prüser (PRÜSER et al., 2012). Tais configurações apresentam o mesmo caráter unidimensional do nosso modelo efetivo do fio quântico.

REFERÊNCIAS

- AGUIAR-HUALDE, J. M.; CHIAPPE, G.; LOUIS, E.; ANDA, E. V. Kondo effect in transport through molecules adsorbed on metal surfaces: from Fano dips to Kondo peaks. *Physical Review B: Condensed Matter and Materials Physics*, College Park, v. 76, n. 15, p. 155427.1–155427.5, Oct. 2007. Citado 2 vezes nas páginas 10 e 50.
- ANDERSON, P. W. Localized magnetic states in metals. *Physical Review*, College Park, v. 124, n. 1, p. 41–53, Oct. 1961. Citado 2 vezes nas páginas 11 e 16.
- CHIAPPE, G.; LOUIS, E. Kondo effect of an adsorbed cobalt phthalocyanine (coPc) molecule: the role of quantum interference. *Physical Review Letters*, College Park, v. 97, n. 7, p. 076806, Aug. 2006. Citado 2 vezes nas páginas 10 e 50.
- CHOI, M.-S.; SÁNCHEZ, D.; ; LÓPEZ, R. Kondo effect in a quantum dot coupled to ferromagnetic leads: a numerical renormalization group analysis. *Physical Review Letters*, College Park, v. 92, n. 5, p. 056601, Feb. 2004. Citado na página 10.
- FANO, U. Effects of configuration interaction on intensities and phase shifts. *Physical Review*, College Park, v. 124, n. 6, p. 1866–1878, Dec. 1961. Citado 2 vezes nas páginas 10 e 25.
- FIGGINS, J.; MORR, D. K. Differential conductance and quantum interference in Kondo systems. *Physical Review Letters*, College Park, v. 104, n. 18, p. 187202, May 2010. Citado na página 10.
- FU, Y.-S.; JI, S.-H.; CHEN, X.; MA, X.-C.; WU, R.; WANG, C.-C.; DUAN, W.-H.; QIU, X.-H.; SUN, B.; ZHANG, P.; JIA, J.-F.; XUE, Q.-K. Manipulating the Kondo resonance through quantum size effects. *Physical Review Letters*, College Park, v. 99, n. 25, p. 256601, Dec. 2007. Citado 2 vezes nas páginas 10 e 50.
- GAASS, M.; HÜTTEL, A. K.; KANG, K.; WEYMANN, I.; DELFT, J. von; STRUNK, C. Universality of the Kondo effect in quantum dots with ferromagnetic leads. *Physical Review Letters*, College Park, v. 107, n. 17, p. 176808, Oct. 2011. Citado na página 10.
- HAMAYA, K.; KITABATAKE, M.; SHIBATA, K.; JUNG, M.; KAWAMURA, M.; HIRAKAWA, K.; MACHIDA, T.; TANIYAMA, T.; ISHIDA, S.; ARAKAWA, Y. Kondo effect in a semiconductor quantum dot coupled to ferromagnetic electrodes. *Applied Physics Letters*, College Park, v. 91, n. 23, p. 232105, 2007. Citado na página 10.
- HAMAYA, K.; KITABATAKE, M.; SHIBATA, K.; JUNG, M.; KAWAMURA, M.; ISHIDA, S.; TANIYAMA, T.; HIRAKAWA, K.; ARAKAWA, Y.; MACHIDA, T. Oscillatory changes in the tunneling magnetoresistance effect in semiconductor quantum-dot spin valves. *Physical Review B: Condensed Matter and Materials Physics*, College Park, v. 77, n. 8, p. 081302, Feb. 2008. Citado na página 10.
- HAUG, H.; ANTTI-PEKKA, J. *Quantum kinetics in transport and optics of semiconductors*. New York: Springer, 1996. (Springer Series in Solid-State Sciences, v. 123). Citado 3 vezes nas páginas 12, 21 e 41.
- HAUPTMANN, J. R.; PAASKE, J.; LINDELOF, P. E. Electric-field-controlled spin reversal in a quantum dot with ferromagnetic contacts. *Nature Physics*, London, v. 4, p. 373–376, 2008. Citado na página 10.

- HEWSON, A. C. *The Kondo problem to heavy fermions*. Cambridge: Cambridge University Press, 1993. Citado na página 10.
- KAWAHARA, S. L.; LAGOUTE, J.; REPAIN, V.; CHACON, C.; GIRARD, Y.; KLEIN, J.; ROUSSET, S. Kondo peak splitting on a single adatom coupled to a magnetic cluster. *Physical Review B: Condensed Matter and Materials Physics*, College Park, v. 82, n. 2, p. 020406, July 2010. Citado 3 vezes nas páginas 10, 11 e 54.
- KNORR, N.; SCHNEIDER, M. A.; DIEKHÖNER, L.; WAHL, P.; KERN, K. Kondo effect of single Co adatoms on Cu surfaces. *Physical Review Letters*, College Park, v. 88, n. 9, p. 096804, Feb. 2002. Citado 2 vezes nas páginas 10 e 50.
- LIN, C.-Y.; NETO, A. H. C.; JONES, B. A. First-principles calculation of the single impurity surface Kondo resonance. *Physical Review Letters*, College Park, v. 97, n. 15, p. 156102, Oct. 2006. Citado 2 vezes nas páginas 10 e 50.
- LOUNIS, S. *Theory of magnetic transition metal nanoclusters on surfaces*. Tese (Dissertation (Magister in Physics) - Fakultät für Mathematik, Informatik und Naturwissenschaften) — Rheinisch-Westfälische Technische Hochschule, Aachen, 2007. Citado na página 10.
- LOUNIS, S.; ZAHN, P.; WEISMANN, A.; WENDEROTH, M.; ULBRICH, R. G.; MERTIG, I.; DEDERICHS, P. H.; BLÜGEL, S. Theory of real space imaging of fermi surface parts. *Physical Review B: Condensed Matter and Materials Physics*, College Park, v. 83, n. 3, p. 035427, Jan. 2011. Citado na página 10.
- MADHAVAN, V.; CHEN, W.; JAMNEALA, T.; CROMMIE, M. F.; WINGREEN, N. S. Tunneling into a single magnetic atom: spectroscopic evidence of the Kondo resonance. *Science*, Washington-DC, v. 280, n. 5363, p. 567–569, 1998. Citado na página 10.
- MADHAVAN, V.; CHEN, W.; JAMNEALA, T.; CROMMIE, M. F.; WINGREEN, N. S. Local spectroscopy of a Kondo impurity: Co on Au(111). *Physical Review B: Condensed Matter and Materials Physics*, College Park, v. 64, n. 16, p. 165412, Oct. 2001. Citado na página 10.
- MANOHARAN, H. C.; LUTZ, C. P.; EIGLER, D. M. Quantum mirages formed by coherent projection of electronic structure. *Nature*, London, v. 403, p. 512–515, 2000. Citado na página 10.
- MARTINEK, J.; SINDEL, M.; BORDA, L.; BARNAS, J.; KÖNIG, J.; SCHÖN, G.; DELFT, J. von. Kondo effect in the presence of itinerant-electron ferromagnetism studied with the numerical renormalization group method. *Physical Review Letters*, College Park, v. 91, n. 4, p. 247202, Dec. 2003. Citado na página 10.
- MARTINEK, J.; SINDEL, M.; BORDA, L.; BARNAS, J.; BULLA, R.; KÖNIG, J.; SCHÖN, G.; MAEKAWA, S.; DELFT, J. von. Gate-controlled spin splitting in quantum dots with ferromagnetic leads in the Kondo regime. *Physical Review B: Condensed Matter and Materials Physics*, College Park, v. 72, n. 12, p. 121302, Sep. 2005. Citado 2 vezes nas páginas 10 e 27.
- MARTINEK, J.; UTSUMI, Y.; IMAMURA, H.; S, J. B.; MAEKAWA, S.; KÖNIG, J.; SCHÖN, G. Kondo effect in quantum dots coupled to ferromagnetic leads. *Physical Review Letters*, College Park, v. 91, n. 12, p. 127203, Sep. 2003. Citado na página 10.
- MIROSHNICHENKO, A. E.; FLACH, S.; KIVSHAR, Y. S. Fano resonances in nanoscale structures. *Reviews of Modern Physics*, College Park, v. 82, n. 3, p. 2257–2298, Aug. 2010. Citado 2 vezes nas páginas 10 e 25.

MISIORNY, M.; WEYMANN, I.; BARNAS, J. Influence of magnetic anisotropy on the Kondo effect and spin-polarized transport through magnetic molecules, adatoms, and quantum dots. *Physical Review B: Condensed Matter and Materials Physics*, College Park, v. 84, n. 3, p. 035445, July 2011. Citado na página 10.

MISIORNY, M.; WEYMANN, I.; BARNAS, J. Interplay of the Kondo effect and spin-polarized transport in magnetic molecules, adatoms, and quantum dots. *Physical Review Letters*, College Park, v. 106, n. 12, p. 126602, Mar. 2011. Citado na página 10.

NÉEL, N.; KRÖGER, J.; BERNDT, R. Kondo effect of a Co atom on Cu(111) in contact with an iron tip. *Physical Review B: Condensed Matter and Materials Physics*, College Park, v. 82, n. 23, p. 233401, Dec. 2010. Citado na página 10.

OTTE, A. F.; TERNES, M.; BERGMANN, K. von; LOTH, S.; BRUNE, H.; LUTZ, C. P.; HIRJIBEHEDIN, C. F.; HEINRICH, A. J. The role of magnetic anisotropy in the Kondo effect. *Nature Physics*, London, v. 4, p. 847–850, 2008. Citado 2 vezes nas páginas 10 e 50.

PASUPATHY, A. N.; BIALCZAK, R. C.; MARTINEK, J.; GROSE, J. E.; DONEV, L. A. K.; MCEUEN, P. L.; RALPH, D. C. The Kondo effect in the presence of ferromagnetism. *Science*, Washington-DC, v. 306, n. 5693, p. 86–89, 2004. Citado na página 10.

PENTEADO, P. H.; SOUZA, F. M.; SERIDONIO, A. C.; VERNEK, E.; EGUES, J. C. Scanning tunneling microscope operating as a spin diode. *Physical Review B: Condensed Matter and Materials Physics*, College Park, v. 84, n. 12, p. 125439, Sep. 2011. Citado na página 10.

PLIHAL, M.; GADZUK, J. W. Nonequilibrium theory of scanning tunneling spectroscopy via adsorbate resonances: nonmagnetic and Kondo impurities. *Physical Review B: Condensed Matter and Materials Physics*, College Park, v. 63, n. 8, p. 085404, Feb. 2001. Citado na página 10.

PRÜSER, H.; WENDEROTH, M.; DARGEL, P. E.; WEISMANN, A.; PETERS, R.; PRUSCHKE, T.; ULBRICH, R. G. Long-range Kondo signature of a single magnetic impurity. *Nature Physics*, London, v. 7, p. 203–206, 2011. Citado na página 10.

PRÜSER, H.; WENDEROTH, M.; WEISMANN, A.; ULBRICH, R. G. Mapping itinerant electrons around Kondo impurities. *Physical Review Letters*, College Park, v. 108, n. 16, p. 166604, Apr. 2012. Citado 4 vezes nas páginas 10, 11, 12 e 61.

QI, Y.; ZHU, J.-X.; ZHANG, S.; TING, C. S. Kondo resonance in the presence of spin-polarized currents. *Physical Review B: Condensed Matter and Materials Physics*, College Park, v. 78, n. 4, p. 045305, July 2008. Citado na página 10.

REYES, C. M.; FERNANDEZ-ROSSIER, J.; PALACIOS, J. J.; JACOB, D.; NATELSON, D.; UNTIEDT, C. The Kondo effect in ferromagnetic atomic contacts. *Nature*, London, v. 458, p. 1150–1153, 2009. Citado na página 10.

SCHILLER, A.; HERSHFIELD, S. Theory of scanning tunneling spectroscopy of a magnetic adatom on a metallic surface. *Physical Review B: Condensed Matter and Materials Physics*, College Park, v. 61, n. 13, p. 9036–9046, Apr. 2000. Citado na página 10.

SERIDONIO, A.; SOUZA, F.; NERO, J. D.; SHELYKH, I. Fano–Kondo spin filter. *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures*, Amsterdam, v. 41, n. 8, p. 1611 – 1615, 2009. Citado na página 10.

- SERIDONIO, A. C.; ORAHCIO, F. S.; SOUZA, F. M.; FIGUEIRA, M. S. Non-Zeeman splitting for a spin-resolved STM with a Kondo adatom in a spin-polarized two-dimensional electron gas. *Physical Review B: Condensed Matter and Materials Physics*, College Park, v. 85, n. 16, p. 165109, Apr. 2012. Citado 4 vezes nas páginas 10, 26, 27 e 28.
- SERIDONIO, A. C.; SOUZA, F. M.; SHELYKH, I. A. Spin-polarized STM for a Kondo adatom. *Journal of Physics: Condensed Matter*, Bristol, v. 21, n. 9, p. 095003, 2009. Citado na página 10.
- SINDEL, M.; BORDA, L.; MARTINEK, J.; BULLA, R.; KÖNIG, J.; SCHÖN, G.; MAEKAWA, S.; DELFT, J. von. Kondo quantum dot coupled to ferromagnetic leads: numerical renormalization group study. *Physical Review B: Condensed Matter and Materials Physics*, College Park, v. 76, n. 4, p. 045321, July 2007. Citado na página 10.
- SOUZA, F. M.; EGUES, J. C.; JAUHO, A. P. TMR effect in a FM-QD-FM system. *Brazilian Journal of Physics*, New York, v. 34, n. 2B, p. 565–567, June 2004. Citado na página 22.
- STONER, E. C. Collective electron ferromagnetism. II. Energy and specific heat. *Proceedings of the Royal Society of London. Series A. Mathematical and Physical Sciences*, London, v. 169, n. 938, p. 339–371, 1939. Citado na página 22.
- SWIRKOWICZ, R.; ; WILCZYSKI, M.; WAWRZYNIAK, M.; BARNAS, J. Kondo effect in quantum dots coupled to ferromagnetic leads with noncollinear magnetizations. *Physical Review B: Condensed Matter and Materials Physics*, College Park, v. 73, n. 19, p. 193312, May 2006. Citado na página 10.
- TERNES, M.; HEINRICH, A. J.; SCHNEIDER, W.-D. Spectroscopic manifestations of the Kondo effect on single adatoms. *Journal of Physics: Condensed Matter*, Bristol, v. 21, n. 5, p. 053001, 2009. Citado 2 vezes nas páginas 10 e 50.
- ÚJSÁGHY, O.; KROHA, J.; SZUNYOGH, L.; ZAWADOWSKI, A. Theory of the Fano resonance in the STM tunneling density of states due to a single Kondo impurity. *Physical Review Letters*, College Park, v. 85, n. 12, p. 2557–2560, Sep. 2000. Citado 2 vezes nas páginas 10 e 50.
- UTSUMI, Y.; MARTINEK, J.; SCHÖN, G.; IMAMURA, H.; MAEKAWA, S. Nonequilibrium Kondo effect in a quantum dot coupled to ferromagnetic leads. *Physical Review B: Condensed Matter and Materials Physics*, College Park, v. 71, n. 24, p. 245116, June 2005. Citado na página 10.
- WAHL, P.; DIEKHÖNER, L.; WITTICH, G.; VITALI, L.; SCHNEIDER, M. A.; KERN, K. Kondo effect of molecular complexes at surfaces: ligand control of the local spin coupling. *Physical Review Letters*, College Park, v. 95, n. 16, p. 166601, Oct. 2005. Citado na página 10.
- WEISMANN, A. *Scanning tunnelling spectroscopy of subsurface magnetic atoms in copper electron focusing and Kondo effect*. Tese (Doktorgrades) — Georg-August-Universität, Göttingen, 2008. Citado 3 vezes nas páginas 10, 11 e 29.
- WEISMANN, A.; WENDEROTH, M.; LOUNIS, S.; ZAHN, P.; QUAAS, N.; ULBRICH, R. G.; DEDERICHS, P. H.; BLÜGEL, S. Seeing the Fermi surface in real space by nanoscale electron focusing. *Science*, Washington-DC, v. 323, n. 5918, p. 1190–1193, 2009. Citado 3 vezes nas páginas 10, 14 e 15.

WEYMANN, I. Finite-temperature spintronic transport through Kondo quantum dots: numerical renormalization group study. *Physical Review B: Condensed Matter and Materials Physics*, College Park, v. 83, n. 11, p. 113306, Mar. 2011. Citado na página 10.

WEYMANN, I.; BORDA, L. Underscreened Kondo effect in quantum dots coupled to ferromagnetic leads. *Physical Review B: Condensed Matter and Materials Physics*, College Park, v. 81, n. 11, p. 115445, Mar. 2010. Citado na página 10.

WÖLFLE, P.; DUBI, Y.; BALATSKY, A. V. Tunneling into clean heavy fermion compounds: origin of the fano line shape. *Physical Review Letters*, College Park, v. 105, n. 24, p. 246401, Dec. 2010. Citado na página 10.

ZHANG, P.; XUE, Q.-K.; WANG, Y.; XIE, X. C. Spin-dependent transport through an interacting quantum dot. *Physical Review Letters*, College Park, v. 89, n. 28, p. 286803, Dec. 2002. Citado na página 10.

ANEXO A – PUBLICAÇÃO RELACIONADA AO TRABALHO

PHYSICAL REVIEW B **87**, 125104 (2013)

Dimensionality effects in the local density of states of ferromagnetic hosts probed via STM: Spin-polarized quantum beats and spin filtering

A. C. Seridonio,^{1,2} S. C. Leandro,¹ L. H. Guessi,¹ E. C. Siqueira,¹ F. M. Souza,³ E. Vernek,³ M. S. Figueira,⁴ and J. C. Egues⁵

¹*Departamento de Física e Química, Universidade Estadual Paulista, Ilha Solteira, São Paulo 13385-000, Brazil*

²*Departamento de Física, Instituto de Geociências e Ciências Exatas-IGCE, Universidade Estadual Paulista, Rio Claro, São Paulo 13506-970, Brazil*

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

⁴*Instituto de Física, Universidade Federal Fluminense, Niterói, Rio de Janeiro 24210-340, Brazil*

⁵*Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, São Paulo 13560-970, Brazil*

(Received 15 November 2012; published 5 March 2013)

We theoretically investigate the local density of states (LDOS) probed by an STM tip of ferromagnetic metals hosting a single adatom and a subsurface impurity. We model the system via the two-impurity Anderson Hamiltonian. By using the equation of motion with the relevant Green's functions, we derive analytical expressions for the LDOS of two host types: a surface and a quantum wire. The LDOS reveals Friedel-like oscillations and Fano interference as a function of the STM tip position. These oscillations strongly depend on the host dimension. Interestingly, we find that the spin-dependent Fermi wave numbers of the hosts give rise to spin-polarized *quantum beats* in the LDOS. Although the LDOS for the metallic surface shows a damped beating pattern, it exhibits the opposite behavior in the quantum wire. Due to this absence of damping, the wire operates as a spatially resolved spin filter with a high efficiency.

DOI: 10.1103/PhysRevB.87.125104

PACS number(s): 07.79.Fc, 74.55.+v, 85.75.-d, 72.25.-b

I. INTRODUCTION

The local density of states (LDOS) of electronic systems with impurities can exhibit Fano line shapes due to the quantum interference between different electron paths. Such interference arises from the itinerant electrons that travel through the host and tunnel into the impurity sites.^{1,2} For a single magnetic adatom in the Kondo regime³ probed by a scanning tunneling microscope (STM) tip, interesting features manifest when one has a spin-polarized electron bath present. Here, we mention the splitting of the Kondo peak in the differential conductance due to the itinerant magnetism of the host.⁴ Such a hallmark has already been found experimentally in an Fe island with a Co adatom.⁵ Additionally, the STM system can also operate as a Fano-Kondo spin filter due to a spin-polarized tip and a nonmagnetic host.^{6,7} In the absence of a ferromagnetic host, the Fano-Kondo profile becomes doubly degenerate.^{8–23} Away from the Kondo regime, a spin diode emerges.²⁴

In the condensed-matter literature on scanning microscopy, there is a profusion of work discussing spin-dependent phenomena employing ferromagnetic leads coupled to quantum dots or adatoms in the Kondo regime.^{4,6,7,25–44} Here, we mention those with metallic samples and buried impurities in which the anisotropy of the Fermi surface plays an important role in electron tunneling.^{45–50} According to the experiment of Prütser *et al.*,⁴⁵ such anisotropy allows atoms of Fe and Co beneath the Cu(100) surface to scatter electrons in preferential directions of the material due to an effect called “electron focusing.” In this scenario, the STM becomes a new tool for the detection of the Fermi surface signatures in the real lattice of a metal. In contrast, much less attention has been devoted to spin-polarized systems away from the Kondo regime^{51–53} and with two impurities.

Thus, in this paper, we present a theoretical description of the systems sketched in Fig. 1. We show that interesting phenomena, such as the spin-polarized quantum beats in

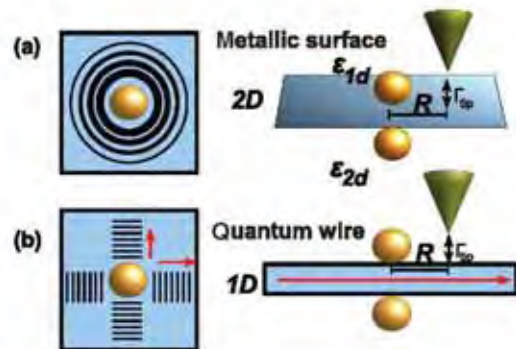


FIG. 1. (Color online) Side-coupled geometry with two impurities in the presence of an STM tip. $\Gamma_{\text{tip}} = \pi w^2 \rho_{\text{tip}}$, where w and ρ_{tip} are the tip-host hopping term and the DOS for the STM probe, respectively. (a) Left panel: 2D evanescent waves appear in the LDOS of a metallic surface. The system is treated as a two-dimensional electron gas shown in the right panel. (b) Left panel: The confinement of 1D waves in specific directions (perpendicular wave fronts) is due to the electron-focusing effect (see Ref. 45). Each direction is modeled by a quantum wire as illustrated in the right panel.

the LDOS and the spin-filtering effect, arise. To this end, we consider two distinct geometries consistent with recent experiments: a metallic surface and a quantum wire. The two-dimensional (2D) case emulates the Fe island in Ref. 5. The quantum wire on the other hand, mimics the electron-focusing effect investigated in Ref. 45. Interestingly, we note that the pioneering quantum wire treatment for electron focusing in a side-coupled geometry can be found in Ref. 49. In this treatment, the noninteracting single-impurity Anderson model⁵⁴ was solved in one dimension (1D) by considering the impurity above the wire. We should also point out that the full *ab initio* calculation that yields to electron focusing in Ref. 45

can be qualitatively recovered by the simple quantum wire model adopted in Ref. 49.

Here, we extend this one-dimensional treatment of the Anderson Hamiltonian by including a spin-dependent DOS for the wire, a second lateral impurity right beneath it, and Coulomb interaction in both impurities. We perform our study in the framework of the two-impurity Anderson model by employing the equation-of-motion approach to calculate the LDOS of the system. The Hubbard I approximation⁵⁵ is used by assuming, for the sake of simplicity, infinite Coulomb energies at the impurities. We show that the LDOS can be written in terms of the Fano factor, the Friedel-like function for charge oscillations, and the spin-dependent Fermi wave numbers of the host. Such quantities lead to spin-polarized quantum beats in the LDOS. We also show that this effect is strongly correlated to the host dimensionality. Thus, the quantum beats in the LDOS of the metallic surface present a long-range damped behavior in contrast to the undamped one found in the quantum wire system. Such distinct features originate from the specific forms assumed by the Fano factor and Friedel function, which depend on the dimensionality of the host. Therefore, the metallic surface and the quantum wire become spatially resolved spin filters where the latter displays a higher efficiency due to the undamped LDOS.

This paper is organized as follows. In Sec. II, we show the theoretical model of the ferromagnetic hosts with the impurities in the side-coupled geometry as sketched in Fig. 1 and derive the LDOS formula for both systems, the metallic surface, and the quantum wire. The decoupling scheme Hubbard I⁵⁵ for the Green's functions is presented in Sec. III. In Sec. IV, we discuss the results for the quantum beats in the LDOS and the spin filtering. The conclusions appear in Sec. V.

II. THEORETICAL MODEL

A. Hamiltonian

In order to probe the LDOS of the ferromagnetic hosts, we represent an STM tip weakly connected to hosts hybridized to a pair of side-coupled impurities as outlined in Fig. 1. The systems we investigate are described according to the two-impurity Anderson model given by the Hamiltonian,³

$$\mathcal{H} = \sum_{\vec{k}\sigma} \varepsilon_{\vec{k}\sigma} c_{\vec{k}\sigma}^\dagger c_{\vec{k}\sigma} + \sum_{j\sigma} \varepsilon_{j\sigma} d_{j\sigma}^\dagger d_{j\sigma} + \sum_j U_j d_{j\uparrow}^\dagger d_{j\uparrow} d_{j\downarrow}^\dagger d_{j\downarrow} + \sum_{j\vec{k}\sigma} \left[\frac{V_{j\vec{k}}}{\sqrt{N}} \phi_{\vec{k}}^*(\vec{R}_j) c_{\vec{k}\sigma}^\dagger d_{j\sigma} + \frac{V_{j\vec{k}}^*}{\sqrt{N}} \phi_{\vec{k}}(\vec{R}_j) d_{j\sigma}^\dagger c_{\vec{k}\sigma} \right]. \quad (1)$$

The spin-polarized electron gas forming the hosts is described by the operator $c_{\vec{k}\sigma}^\dagger$ ($c_{\vec{k}\sigma}$) for the creation (annihilation) of an electron in a quantum state labeled by the wave vector \vec{k} , spin σ , and energy $\varepsilon_{\vec{k}\sigma}$. For the impurities, $d_{j\sigma}^\dagger$ ($d_{j\sigma}$) creates (annihilates) an electron with spin σ in state $\varepsilon_{j\sigma}$ with $j = 1, 2$. The third term of Eq. (1) accounts for the on-site Coulomb interaction U_j at the j th impurity placed at position \vec{R}_j . In our calculations, we assume $U_1 = U_2 \rightarrow \infty$ for the sake of simplicity.⁵⁶ Finally, the last two terms mix the host continuum of states and the levels $\varepsilon_{j\sigma}$. This hybridization occurs at the

impurity sites \vec{R}_j via the host-impurity couplings $V_{j\vec{k}}$ and the plane waves $\phi_{\vec{k}}(\vec{R}_j) = e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}_j}$. \mathcal{N} is the number of conduction states. The ferromagnetic hosts are considered spin-polarized electron baths, characterized by the polarization,

$$P = \frac{\rho_{FM\uparrow} - \rho_{FM\downarrow}}{\rho_{FM\uparrow} + \rho_{FM\downarrow}}, \quad (2)$$

in which

$$\rho_{FM\sigma} = \rho_0(1 + \sigma P) \quad (3)$$

is the density of states of the hosts at the chemical potential in a Stoner-like framework,^{57,58} expressed in terms of the density ρ_0 for the case $P = 0$.

B. LDOS for the spin-polarized systems

To obtain the host LDOS, we introduce the retarded Green's function in the time coordinate,

$$\mathcal{G}_\sigma(t, \vec{R}) = -\frac{i}{\hbar} \theta(t) Z_{FM}^{-1} \sum_n e^{-\beta E_n} \langle n | [\bar{\Psi}_\sigma(\vec{R}, t) \bar{\Psi}_\sigma^\dagger(\vec{R}, 0)]_+ | n \rangle, \quad (4)$$

where

$$\bar{\Psi}_\sigma(\vec{R}) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{k}} \phi_{\vec{k}}(\vec{R}) c_{\vec{k}\sigma} \quad (5)$$

is the fermionic operator describing the quantum state of the host site placed below the STM tip, \hbar is the Planck constant divided by 2π , $\theta(t)$ is the step function at the instant t , $\beta = 1/k_B T$ with k_B as the Boltzmann constant and T as the system temperature, Z_{FM} and $|n\rangle$ are the partition function and a many-body eigenstate of the system Hamiltonian [Eq. (1)], respectively, and $[\dots]_+$ is the anticommutator for Eq. (5) evaluated at distinct times. From Eq. (4), the spin-dependent LDOS at a site \vec{R} of the host [see Fig. 1] can be obtained as

$$\rho_{\text{LDOS}}^\sigma(\varepsilon, \vec{R}) = -\frac{1}{\pi} \text{Im}(\bar{\mathcal{G}}_\sigma(\varepsilon^+, \vec{R})), \quad (6)$$

where $\bar{\mathcal{G}}_\sigma(\varepsilon^+, \vec{R})$ is the time Fourier transform of $\mathcal{G}_\sigma(t, \vec{R})$. Here, $\varepsilon^+ = \varepsilon + i\eta$ and $\eta \rightarrow 0^+$. In what follows, we first develop a general formalism for impurities localized at arbitrary positions \vec{R}_j and \vec{R}_l ; later on, we take the limit $\vec{R}_j = \vec{R}_l = \vec{0}$ in order to treat the side-coupled geometry of this paper.

To obtain an analytical expression for the LDOS, we apply the equation-of-motion approach to Eq. (4). Thus, we substitute Eq. (5) in Eq. (4) and begin the procedure with

$$\mathcal{G}_\sigma(t, \vec{R}) = \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}\vec{q}} \phi_{\vec{k}}(\vec{R}) \phi_{\vec{q}}^*(\vec{R}) \mathcal{G}_{c_{\vec{k}\sigma}^\dagger c_{\vec{q}\sigma}}^\sigma(t) \quad (7)$$

expressed in terms of

$$\mathcal{G}_{c_{\vec{k}\sigma}^\dagger c_{\vec{q}\sigma}}^\sigma(t) = -\frac{i}{\hbar} \theta(t) Z_{FM}^{-1} \sum_n e^{-\beta E_n} \langle n | [c_{\vec{k}\sigma}^\dagger(t), c_{\vec{q}\sigma}^\dagger(0)]_+ | n \rangle. \quad (8)$$

Performing $\frac{\partial}{\partial t}$ on Eq. (8), we find

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \mathcal{G}_{c_{\vec{k}\vec{q}}}^{\sigma}(t) &= -\frac{i}{\hbar} \delta(t) Z_{FM}^{-1} \sum_n e^{-\beta E_n} \langle n | [c_{\vec{k}\sigma}(t), c_{\vec{q}\sigma}^{\dagger}(0)]_+ | n \rangle \\ &+ \left(-\frac{i}{\hbar} \right) \varepsilon_{\vec{k}\sigma} \mathcal{G}_{c_{\vec{k}\vec{q}}}^{\sigma}(t) + \left(-\frac{i}{\hbar} \right) \\ &\times \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_j V_{j\vec{k}} \phi_{\vec{k}}^{\dagger}(\vec{R}_j) \mathcal{G}_{d_j c_{\vec{q}}}^{\sigma}(t), \end{aligned} \quad (9)$$

where we have used

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} c_{\vec{k}\sigma}(t) &= [c_{\vec{k}\sigma}, \mathcal{H}] \\ &= \varepsilon_{\vec{k}\sigma} c_{\vec{k}\sigma}(t) + \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_j V_{j\vec{k}} \phi_{\vec{k}}^{\dagger}(\vec{R}_j) d_{j\sigma}(t). \end{aligned} \quad (10)$$

In the energy coordinate, we solve Eq. (9) for $\mathcal{G}_{c_{\vec{k}\vec{q}}}^{\sigma}(\varepsilon^+)$ and obtain

$$\mathcal{G}_{c_{\vec{k}\vec{q}}}^{\sigma}(\varepsilon^+) = \frac{\delta_{\vec{k}\vec{q}}}{\varepsilon^+ - \varepsilon_{\vec{k}\sigma}} + \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_j \frac{V_{j\vec{k}} \phi_{\vec{k}}^{\dagger}(\vec{R}_j)}{\varepsilon^+ - \varepsilon_{\vec{k}\sigma}} \mathcal{G}_{d_j c_{\vec{q}}}^{\sigma}(\varepsilon^+). \quad (11)$$

Notice that we need to find the mixed Green's function $\mathcal{G}_{d_j c_{\vec{q}}}^{\sigma}(\varepsilon^+)$. To this end, we define the advanced Green's function,

$$\mathcal{F}_{d_j c_{\vec{q}}}^{\sigma}(t) = \frac{i}{\hbar} \theta(-t) Z_{FM}^{-1} \sum_n e^{-\beta E_n} \langle n | [d_{j\sigma}^{\dagger}(0), c_{\vec{q}\sigma}(t)]_+ | n \rangle, \quad (12)$$

which results in

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \mathcal{F}_{d_j c_{\vec{q}}}^{\sigma}(t) &= -\frac{i}{\hbar} \delta(t) Z_{FM}^{-1} \sum_n e^{-\beta E_n} \\ &\times \langle n | [d_{j\sigma}^{\dagger}(0), c_{\vec{q}\sigma}(t)]_+ | n \rangle - \frac{i}{\hbar} \varepsilon_{\vec{q}\sigma} \mathcal{F}_{d_j c_{\vec{q}}}^{\sigma}(t) \\ &+ \left(-\frac{i}{\hbar} \right) \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_l V_{l\vec{q}} \phi_{\vec{q}}^{\dagger}(\vec{R}_l) \mathcal{F}_{d_l d_j}^{\sigma}(t), \end{aligned} \quad (13)$$

where, once again, we used Eq. (10), interchanging $\vec{k} \leftrightarrow \vec{q}$. Thus, the Fourier transform of Eq. (13) becomes

$$\varepsilon^- \mathcal{F}_{d_j c_{\vec{q}}}^{\sigma}(\varepsilon^-) = \varepsilon_{\vec{q}\sigma} \mathcal{F}_{d_j c_{\vec{q}}}^{\sigma}(\varepsilon^-) + \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_l V_{l\vec{q}} \phi_{\vec{q}}^{\dagger}(\vec{R}_l) \mathcal{F}_{d_l d_j}^{\sigma}(\varepsilon^-), \quad (14)$$

with $\varepsilon^- = \varepsilon - i\eta$. Applying the property,

$$\mathcal{G}_{d_j c_{\vec{q}}}^{\sigma}(\varepsilon^+) = \left[\mathcal{F}_{d_j c_{\vec{q}}}^{\sigma}(\varepsilon^-) \right]^{\dagger} \quad (15)$$

to Eq. (14), we show that

$$\varepsilon^+ \mathcal{G}_{d_j c_{\vec{q}}}^{\sigma}(\varepsilon^+) = \varepsilon_{\vec{q}\sigma} \mathcal{G}_{d_j c_{\vec{q}}}^{\sigma}(\varepsilon^+) + \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_l V_{l\vec{q}} \phi_{\vec{q}}^{\dagger}(\vec{R}_l) \mathcal{G}_{d_l d_j}^{\sigma}(\varepsilon^+), \quad (16)$$

and

$$\mathcal{G}_{d_j c_{\vec{q}}}^{\sigma}(\varepsilon^+) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_l \frac{V_{l\vec{q}} \phi_{\vec{q}}^{\dagger}(\vec{R}_l)}{\varepsilon^+ - \varepsilon_{\vec{q}\sigma}} \mathcal{G}_{d_l d_j}^{\sigma}(\varepsilon^+). \quad (17)$$

Now, we substitute Eq. (17) into Eq. (11) and the latter into Eq. (7) in the energy coordinate to obtain

$$\begin{aligned} \mathcal{G}_{\sigma}(\varepsilon^+, R) &= \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} \frac{|\phi_{\vec{k}}(\vec{R})|^2}{\varepsilon^+ - \varepsilon_{\vec{k}\sigma}} \\ &+ (\pi\rho_0)^2 \sum_l (q_{j\sigma} - iA_{j\sigma})(q_l - iA_{l\sigma}) \mathcal{G}_{d_l d_j}^{\sigma}(\varepsilon) \\ &+ (\pi\rho_0)^2 \sum_{j \neq l} (q_{j\sigma} - iA_{j\sigma})(q_{l\sigma} - iA_{l\sigma}) \mathcal{G}_{d_l d_j}^{\sigma}(\varepsilon). \end{aligned} \quad (18)$$

It is worth mentioning that the imaginary part of the first term of Eq. (18) gives the background DOS of the host [Eq. (3)] and the others describe impurity contributions with

$$q_{j\sigma} = \frac{1}{\pi\rho_0 N} \sum_{\vec{k}} \frac{V_{j\vec{k}} \phi_{\vec{k}}^{\dagger}(\vec{R}_j) \phi_{\vec{k}}(\vec{R})}{\varepsilon - \varepsilon_{\vec{k}\sigma}} \quad (19)$$

being the Fano parameter due to the single coupling $V_{j\vec{k}}$ between the host and a given impurity. This factor encodes the quantum interference originated by electrons traveling through the ferromagnetic conduction band that tunnel to the impurity state and return to the band and those that do not perform such trajectories. The definition of Eq. (19) is in accordance with Fano's theory^{1,2} and leads to interference patterns in the LDOS as we see in Sec. IV. Additionally, we recognize

$$A_{j\sigma} = \frac{1}{\rho_0 N} \sum_{\vec{k}} V_{j\vec{k}} \phi_{\vec{k}}^{\dagger}(\vec{R}_j) \phi_{\vec{k}}(\vec{R}) \delta(\varepsilon - \varepsilon_{\vec{k}\sigma}) = |A_{j\sigma}| e^{i\alpha_{j\sigma}} \quad (20)$$

as an expression that we call the Friedel function because it leads to Friedel-like oscillations in the LDOS with $\alpha_{j\sigma}$ as a spin-dependent phase. In the end, the Green's function $\mathcal{G}_{\sigma}(\varepsilon^+, R)$, indeed, depends on $\mathcal{G}_{d_j d_j}^{\sigma}(\varepsilon)$ and the mixed Green's function $\mathcal{G}_{d_l d_j}^{\sigma}(\varepsilon)$. Finally, from Eqs. (6) and (18), the LDOS of the ferromagnetic systems can be recast as the expression,

$$\begin{aligned} \rho_{\text{LDOS}}^{\sigma}(\varepsilon, R) &= \rho_{FM\sigma} + \pi\rho_0^2 \sum_j \left[(|A_{j\sigma}|^2 - q_{j\sigma}^2) \text{Im} \left\{ \mathcal{G}_{d_j d_j}^{\sigma}(\varepsilon) \right\} \right. \\ &+ 2q_{j\sigma} |A_{j\sigma}| \sin \left(\alpha_{j\sigma} + \frac{\pi}{2} \right) \text{Re} \left\{ \mathcal{G}_{d_j d_j}^{\sigma}(\varepsilon) \right\} \\ &+ \pi\rho_0^2 \sum_{j \neq l} \Delta\varrho_{j\sigma} \end{aligned} \quad (21)$$

where

$$\begin{aligned} \Delta\varrho_{j\sigma} &= -q_{j\sigma} q_{l\sigma} \text{Im} \left\{ \mathcal{G}_{d_l d_j}^{\sigma}(\varepsilon) \right\} + \left[|A_{j\sigma}| q_{l\sigma} \cos \left(\alpha_{j\sigma} + \frac{\pi}{2} \right) \right. \\ &+ |A_{l\sigma}| |A_{j\sigma}| \cos(\alpha_{j\sigma} - \alpha_{l\sigma}) \\ &- q_{j\sigma} |A_{l\sigma}| \cos \left(\alpha_{l\sigma} + \frac{\pi}{2} \right) \left. \right] \text{Im} \left\{ \mathcal{G}_{d_l d_j}^{\sigma}(\varepsilon) \right\} \\ &+ \left[q_{j\sigma} |A_{l\sigma}| \sin \left(\alpha_{l\sigma} + \frac{\pi}{2} \right) + q_{l\sigma} |A_{j\sigma}| \right. \\ &\times \sin \left(\alpha_{j\sigma} + \frac{\pi}{2} \right) + |A_j| |A_l| \sin(\alpha_{j\sigma} - \alpha_{l\sigma}) \left. \right] \\ &\times \text{Re} \left\{ \mathcal{G}_{d_l d_j}^{\sigma}(\varepsilon) \right\}, \end{aligned} \quad (22)$$

The set of Eqs. (21) and (22) is the main analytical finding of this paper. It describes the spin-dependent LDOS in ferromagnetic hosts with two impurities localized at distinct sites \vec{R}_j . In the absence of the last term of Eq. (21), it reduces to the case of two decoupled systems with one impurity each. The terms in Eq. (22), indeed, hybridize such single-impurity problems via the mixed Green's functions $\tilde{G}_{d,j,d}^\sigma(\varepsilon)$. Thus, the LDOS formula encodes the single Fano factor $q_{j\sigma}$, the Friedel-like function $A_{j\sigma}$, and the new interfering term $\Delta\varrho_{j\sigma}$.

We close this section by recalling that phase $\alpha_{j\sigma}$ is nonzero for the quantum wire system as we will see later. The quantities $q_{j\sigma}$ and $A_{j\sigma}$ in the quantum wire device are, indeed, functions that exhibit undamped oscillations as the tip moves away from the impurities. Conversely, damped oscillations are predicted in the metallic surface setup. In this case, $\alpha_{j\sigma} = 0$, and $A_{j\sigma}$ becomes a real function. Thus, the quantity $|A_{j\sigma}|$ should be read just as $A_{j\sigma}$ in Eqs. (21) and (22). Moreover, a ferromagnetic environment is characterized by two spin-dependent Fermi wave numbers, namely, $k_{F\uparrow}$ and $k_{F\downarrow}$, which, at low polarization P , introduce a slight difference between them. As a result, this feature leads to a full LDOS $\rho_{\text{LDOS}}^\uparrow + \rho_{\text{LDOS}}^\downarrow$ with spin-polarized quantum beats that can be damped or undamped depending upon the system dimensionality.³⁹ We will look more closely at these features later.

In STM experiments, in particular, within the linear-response regime and neglecting tip-atom coupling, the differential conductance $G = G^\uparrow + G^\downarrow$ is the observable measured by the tip, whose spin component is given by⁴

$$G^\sigma = \frac{e^2}{h} \pi \Gamma_{\text{tip}} \int_{-\infty}^{+\infty} \rho_{\text{LDOS}}^\sigma(\varepsilon) \left[-\frac{\partial f}{\partial \varepsilon}(\varepsilon - \phi) \right] d\varepsilon, \quad (23)$$

where e is the electron charge ($e > 0$), $\Gamma_{\text{tip}} = \pi w^2 \rho_{\text{tip}}$ is the tip-host coupling expressed in terms of the hopping term w and the DOS ρ_{tip} for the STM probe, f is the Fermi-Dirac distribution, and ϕ is the applied bias. For $\phi < 0$, the host is the source of electrons, and the tip is the drain. For $\phi > 0$, we have the opposite. It is useful to define the dimensionless LDOS,

$$\text{LDOS} = \frac{\rho_{\text{LDOS}}^\uparrow + \rho_{\text{LDOS}}^\downarrow}{\rho_{\text{FM}\uparrow} + \rho_{\text{FM}\downarrow}} \quad (24)$$

and the transport polarization,

$$P_T = \frac{G^\uparrow - G^\downarrow}{G^\uparrow + G^\downarrow}, \quad (25)$$

in order to investigate the spin-polarized quantum beats as we see in Sec. IV. Recall that, in the absence of the impurities, the transport polarization of Eq. (25) becomes $P_T = P$ for low enough temperatures as established by Eq. (2). In Sec. IV, we verify that Eq. (25) oscillates around P , exhibiting two distinct behaviors as a result of the system dimensionality—damped spin-polarized quantum beats in the metallic surface setup and an undamped pattern in the quantum wire device.

C. Fano and Friedel-like functions for the metallic surface system

In this section, we calculate the expressions for the Fano parameter [Eq. (19)] and the Friedel-like function [Eq. (20)]

in the metallic surface case where no manifestation of electron focusing occurs. This calculation was previously performed in the single-impurity problem,⁴ and now we present an extension applied to the double-impurity system. We begin by taking into account the linear dispersion relation,

$$\varepsilon_{k\sigma} = k_{F\sigma}^{-1} D_\sigma (k - k_{F\sigma}), \quad (26)$$

which depends on the expression,

$$k_{F\downarrow} = \sqrt{\frac{1-P}{1+P}} k_{F\uparrow} \quad (27)$$

determined from Eq. (3) and on the bottom band $D_\sigma = D + \sigma\Delta$ with D as the unpolarized half-width and Δ as the Stoner splitting.³⁵ In particular, for a small polarization P , Eq. (27) results in slightly different Fermi wave numbers and, consequently, in spin-polarized quantum beats in the full LDOS as we will see.

In order to solve Eq. (20), we assume $\phi_{\vec{k}}(\vec{R}) = e^{i\vec{k}\cdot\vec{R} \cos \theta_{\vec{k}}}$ for the electronic 2D wave function and use

$$J_0(\xi) = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} e^{i\xi \cos \theta} d\theta, \quad (28)$$

the angular representation for the zeroth-order Bessel function. Thus, in the wideband limit $|\varepsilon| \ll D_\sigma$ with the flat-band DOS,

$$\rho_{\text{FM}\sigma} = \frac{S}{\mathcal{N}2\pi} \left\{ k \left(\frac{d\varepsilon_{k\sigma}}{dk} \right)^{-1} \right\}_{k=k_{F\sigma}} \quad (29)$$

expressed in terms of the spin-dependent Fermi wave number $k_{F\sigma}$, the periodicity area S in the host, and by using $V_{j\vec{k}} = V$, we find

$$A_{j\sigma} = \frac{\rho_{\text{FM}\sigma}}{\rho_0} V J_0(k_{F\sigma} \vec{R}) = A_{j\sigma}^{2D} \quad (30)$$

for the Friedel-like function with $\vec{R} = |\vec{R} - \vec{R}_j|$ as the relative coordinate of the STM tip with respect to the j th impurity. Notice that, according to Eq. (20), phase $\alpha_{j\sigma}$ is zero and Eq. (30) is a real quantity. In the case of the Fano parameter, we start defining the advanced Green's function,

$$\tilde{G}_{j\sigma} = \frac{1}{\mathcal{N}} \sum_{\vec{k}} \frac{V_{j\vec{k}} \phi_{\vec{k}}(\vec{R}_j) \phi_{\vec{k}}(\vec{R})}{\varepsilon - \varepsilon_{k\sigma} - i\eta}, \quad (31)$$

by assuming the spin and energy dependencies in the Lorentzian shape,

$$V_{j\vec{k}\sigma} = V \frac{\Delta^2}{\Delta^2 + \varepsilon_{k\sigma}^2}, \quad (32)$$

in order to obtain an analytical solution for $q_{j\sigma}$ via a regularization procedure.⁴ Later on, we take the limit $\Delta \gg |\varepsilon_{k\sigma}|$ to show that Eq. (32) recovers the case $V_{j\vec{k}\sigma} = V$. Thus, we can write the identities,

$$q_{j\sigma} = \frac{1}{\pi\rho_0} \text{Re}(\tilde{G}_{j\sigma}) = q_{j\sigma}^{2D}, \quad (33)$$

and

$$A_{j\sigma}^{2D} = \frac{1}{\pi\rho_0} \text{Im}(\tilde{G}_{j\sigma}), \quad (34)$$

which allow us to close the calculation. Equations (33) and (34) imply the relation,

$$q_{j\sigma}^{2D} = \frac{1}{\pi\rho_0} \mathcal{G}_{j\sigma} - iA_{j\sigma}^{2D}. \quad (35)$$

As the Friedel function is already known from Eq. (30), the quantity $\frac{1}{\pi\rho_0} \mathcal{G}_{j\sigma}(\varepsilon, R)$ provides a relationship for the Fano parameter. To this end, we can write

$$\frac{1}{\pi\rho_0} \mathcal{G}_{j\sigma} = \frac{1}{2} \frac{\rho_{FM\sigma}}{\rho_0} V \sum_{l=1}^2 \mathcal{G}_{jl\sigma}, \quad (36)$$

with $\mathcal{G}_{jl\sigma}(\varepsilon, R)$ obeying the following integral representation:

$$\mathcal{G}_{jl\sigma} = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} d\varepsilon_{k\sigma} \frac{\Delta^2}{\Delta^2 + \varepsilon_{k\sigma}^2} \frac{1}{\varepsilon - \varepsilon_{k\sigma} - i\eta} H_0^{(j)}(k\bar{R}). \quad (37)$$

In the equation above, we have used, for the sake of simplicity, Eq. (26) and the Hankel functions $H_0^{(1)}(\xi) = J_0(\xi) + iY_0(\xi)$ and $H_0^{(2)}(\xi) = J_0(\xi) - iY_0(\xi)$. Looking at Eq. (37), we calculate the integral $\mathcal{G}_{j1\sigma}$ by choosing a counterclockwise contour over a semicircle in the upper half of the complex plane, which includes the simple pole $\varepsilon_{k\sigma} = +i\Delta$. Applying the residue theorem, we obtain

$$\mathcal{G}_{j1\sigma} = H_0^{(j)}(k_\Delta \bar{R}) \frac{\Delta}{\varepsilon - i\Delta}, \quad (38)$$

with $k_\Delta = k_{F\sigma}(1 + i\frac{\Delta}{D_\sigma})$. For the evaluation of $\mathcal{G}_{j2\sigma}$, we used a clockwise contour over a semicircle in the lower-half plane, including the poles $\varepsilon_{k\sigma} = \varepsilon - i\eta$ and $\varepsilon_{k\sigma} = -i\Delta$, which yields

$$\mathcal{G}_{j2\sigma} = 2iH_0^{(j)}(k_\varepsilon \bar{R}) \frac{\Delta^2}{\Delta^2 + \varepsilon^2} + \frac{\Delta}{\varepsilon + i\Delta} H_0^{(j)}(k_\Delta \bar{R}), \quad (39)$$

with $k_\varepsilon = k_{F\sigma}(1 + \frac{\varepsilon}{D_\sigma})$. Taking the property $H_0^{(2)}(\xi) = [H_0^{(1)}(\xi^*)]^*$ for the second term in Eq. (39) into account, Eq. (36) becomes

$$\frac{1}{\pi\rho_0} \mathcal{G}_{j\sigma} = \frac{\rho_{FM\sigma}}{\rho_0} V \left[iH_0^{(j)}(k_\varepsilon \bar{R}) \frac{\Delta^2}{\Delta^2 + \varepsilon^2} + \text{Re} \left\{ H_0^{(j)}(k_\Delta \bar{R}) \frac{\Delta}{\varepsilon - i\Delta} \right\} \right], \quad (40)$$

Explicit calculation of the terms in the brackets of Eq. (40) leads to

$$iH_0^{(j)}(k_\varepsilon \bar{R}) \frac{\Delta^2}{\Delta^2 + \varepsilon^2} = iJ_0(k_{F\sigma} \bar{R}) + Y_0(k_{F\sigma} \bar{R}) \quad (41)$$

and

$$\text{Re} \left\{ H_0^{(j)}(k_\Delta \bar{R}) \frac{\Delta}{\varepsilon - i\Delta} \right\} = -Y_0(k_{F\sigma} \bar{R}), \quad (42)$$

where we have assumed $|\varepsilon| \ll D_\sigma$, $\Delta \ll D_\sigma$, and $\Delta \gg |\varepsilon|$. In order to ensure the limit $V_{j\bar{k}} = V$ in Eq. (32), we perform the substitution of Eqs. (30), (40), (41), and (42) in Eq. (35), showing that

$$q_{j\sigma}^{2D} = 0 \quad (43)$$

for any value of $k_{F\sigma} \bar{R}$.

To summarize, the zero value of the Fano parameter given by Eq. (43) and the zeroth-order Bessel function $J_0(k_{F\sigma} \bar{R})$ found in Eq. (30) lead to long-range damped spin-polarized quantum beats in the full LDOS. This feature is discussed in Sec. IV.

D. Fano and Friedel-like functions for the quantum wire system

Here, we determine the Fano parameter in Eq. (19) and the Friedel-like function in Eq. (20) for the quantum wire case. Following Weismann,⁴⁹ we use $\phi_{\bar{k}}(\bar{R}) = e^{i\bar{k}\bar{R}}$ as the electron wave function in which the direction introduced by \bar{R} defines the STM tip-impurity distance where electron focusing manifests. We also use the dispersion relation,

$$\varepsilon_{k\sigma} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} - D_\sigma \quad (44)$$

measured with respect to the bottom band D_σ and the flat DOS,

$$\rho_{FM\sigma} = \frac{\mathcal{L}}{\mathcal{N}2\pi} \left(\frac{d\varepsilon_{k\sigma}}{dk} \right)_{k=k_{F\sigma}}^{-1} = \frac{\mathcal{L}}{\mathcal{N}2\pi} \frac{m}{\hbar^2 k_{F\sigma}}, \quad (45)$$

with m as the effective electron mass and \mathcal{L} as the length of periodicity in the wire. Additionally, in the wideband limit $|\varepsilon| \ll D_\sigma$, we find the following complex Friedel-like function:

$$A_{j\sigma} = V \frac{\rho_{FM\sigma}}{\rho_0} e^{ik_{F\sigma} \bar{R}} = A_{j\sigma}^{1D} \quad (46)$$

characterized by a spin-dependent phase $\alpha_{j\sigma} = k_{F\sigma} \bar{R}$. This phase results in undamped oscillatory behavior as a function of $\bar{R} = |\bar{R} - \bar{R}_j|$, which also appears in $q_{j\sigma}^{1D}$. Thus, we take Eqs. (44) and (45) into account rewriting Eq. (19) as

$$q_{j\sigma} = \frac{V}{\pi\rho_0 \mathcal{N}} \sum_{\bar{k}} \frac{e^{i\bar{k}\bar{R}}}{\varepsilon - \varepsilon_{\bar{k}}} = 2V \frac{\mathcal{L}}{\rho_0 \mathcal{N} \pi} \frac{m}{\hbar^2} \mathcal{I} \equiv q_{j\sigma}^{1D}, \quad (47)$$

with

$$\mathcal{I} = -\frac{1}{2\pi} \text{P} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{e^{i\bar{k}\bar{R}}}{k^2 - k_\varepsilon^2} dk = \frac{\sin(k_{F\sigma} \bar{R})}{2k_{F\sigma}}, \quad (48)$$

in the limit $|\varepsilon| \ll D_\sigma$ and with P as the principal value. Finally, we obtain the Fano factor,

$$q_{j\sigma}^{1D} = 2V \frac{\rho_{FM\sigma}}{\rho_0} \sin(k_{F\sigma} \bar{R}), \quad (49)$$

which also presents spin-dependent Fermi wave numbers $k_{F\uparrow}$ and $k_{F\downarrow}$ as in Eq. (46). Here, they are still connected via Eq. (27), thus, leading to undamped spin-polarized quantum beats in the full LDOS.

III. CALCULATION OF THE IMPURITY GREEN'S FUNCTION

In the present section, we calculate $\mathcal{G}_{j,d}^{\sigma}(\varepsilon)$ ($j, l = 1, 2$) that appear in Eqs. (21) and (22) for the LDOS. To handle the interacting term of the Hamiltonian, we adopt the Hubbard I approximation,⁵⁵ which provides reliable results at temperatures above the Kondo temperature.⁵⁵ We begin by repeating the equation-of-motion approach for these Green's functions,

which results in

$$(\varepsilon - \tilde{\varepsilon}_{jd\sigma} + i\Gamma_{j|\sigma})\tilde{\mathcal{G}}_{d_j d_j}^{\sigma} = 1 + U_l \tilde{\mathcal{G}}_{d_{l\sigma} n_{d_l \sigma}, d_{j\sigma}} + (\Sigma_{j|\sigma}^R - i\Gamma_{j|\sigma})\tilde{\mathcal{G}}_{d_j d_j}^{\sigma}, \quad (50)$$

and

$$(\varepsilon - \tilde{\varepsilon}_{ld\sigma} + i\Gamma_{l|\sigma})\tilde{\mathcal{G}}_{d_l d_l}^{\sigma} = U_l \tilde{\mathcal{G}}_{d_{l\sigma} n_{d_l \sigma}, d_{j\sigma}} + (\Sigma_{l|\sigma}^R - i\Gamma_{l|\sigma})\tilde{\mathcal{G}}_{d_l d_l}^{\sigma}, \quad (51)$$

where $\tilde{\varepsilon}_{jd\sigma} = \varepsilon_{jd} + \Sigma_{j|\sigma}^R$ for $l \neq j$. In the equation above, $\tilde{\mathcal{G}}_{d_{l\sigma} n_{d_l \sigma}, d_{j\sigma}}$ is a higher-order Green's function obtained from the time Fourier transform of

$$\begin{aligned} \tilde{\mathcal{G}}_{d_{l\sigma} n_{d_l \sigma}, d_{j\sigma}}(t) &= -\frac{i}{\hbar} \theta(t) Z_{FM}^{-1} \\ &\times \sum_n e^{-\beta E_n} \langle n | [d_{l\sigma}(t) n_{d_l \sigma}(t), d_{j\sigma}^\dagger(0)]_+ | n \rangle, \end{aligned} \quad (52)$$

with $n_{d_l \sigma} = d_{l\sigma}^\dagger d_{l\sigma}$ being the number operator of the l th impurity with spin $\bar{\sigma}$ (opposite to σ). Here,

$$\Sigma_{l|\sigma}^R = \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} \frac{V_{j\vec{k}}^* V_{l\vec{k}} \phi_{\vec{k}}^*(\vec{R}_l) \phi_{\vec{k}}^*(\vec{R}_l)}{\varepsilon - \varepsilon_{\vec{k}\sigma}} \quad (53)$$

represents the real part of the noninteracting self-energy $\Sigma_{l|\sigma}$ and

$$\begin{aligned} \Sigma_{l|\sigma}^I &= -\Gamma_{l|\sigma} \\ &= -\frac{1}{N} \pi \sum_{\vec{k}} V_{j\vec{k}}^* V_{l\vec{k}} \phi_{\vec{k}}^*(\vec{R}_l) \phi_{\vec{k}}^*(\vec{R}_l) \delta(\varepsilon - \varepsilon_{\vec{k}\sigma}) \end{aligned} \quad (54)$$

describes the corresponding imaginary part, which plays the role of a generalized Anderson parameter $\Gamma_{l|\sigma}$. In order to close the system of Green's functions in Eqs. (50) and (51), we first take the time derivative of Eq. (52) and then perform the time Fourier transform. With that, we obtain

$$\begin{aligned} (\varepsilon^+ - \varepsilon_{ld} - U_l) \tilde{\mathcal{G}}_{d_{l\sigma} n_{d_l \sigma}, d_{j\sigma}} & \\ &= \delta_{lj} \langle n_{d_l \sigma} \rangle + \left(-\sum_{\vec{k}} \frac{1}{\sqrt{N}} V_{l\vec{k}} \phi_{\vec{k}}^*(\vec{R}_l) \right) \tilde{\mathcal{G}}_{c_{l\sigma}^\dagger d_{l\sigma}, d_{j\sigma}} \\ &+ \left(\sum_{\vec{k}} \frac{1}{\sqrt{N}} V_{j\vec{k}}^* \phi_{\vec{k}}^*(\vec{R}_l) \right) \tilde{\mathcal{G}}_{c_{l\sigma} d_{l\sigma}, d_{j\sigma}} \\ &+ \left(\sum_{\vec{k}} \frac{1}{\sqrt{N}} V_{l\vec{k}} \phi_{\vec{k}}^*(\vec{R}_l) \right) \tilde{\mathcal{G}}_{d_{l\sigma} c_{l\sigma}, d_{j\sigma}}, \end{aligned} \quad (55)$$

which also depends on new Green's functions on the same order of $\tilde{\mathcal{G}}_{d_{l\sigma} n_{d_l \sigma}, d_{j\sigma}}$ and on the average occupation number $\langle n_{d_l \sigma} \rangle$, that is, calculated as

$$\langle n_{d_l \sigma} \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} d\varepsilon \left\{ -\frac{1}{\pi} \text{Im}(\tilde{\mathcal{G}}_{d_l d_l}^{\sigma}) \right\} f(\varepsilon). \quad (56)$$

Within the Hubbard I approximation, we truncate the Green's functions $\tilde{\mathcal{G}}_{c_{l\sigma}^\dagger d_{l\sigma}, d_{j\sigma}}$ and $\tilde{\mathcal{G}}_{d_{l\sigma} c_{l\sigma}, d_{j\sigma}}$ according to

the decoupling scheme,

$$\tilde{\mathcal{G}}_{c_{l\sigma}^\dagger d_{l\sigma}, d_{j\sigma}} \simeq \langle c_{l\sigma}^\dagger d_{l\sigma} \rangle \tilde{\mathcal{G}}_{d_l d_l}^{\sigma}, \quad (57)$$

$$\tilde{\mathcal{G}}_{d_{l\sigma} c_{l\sigma}, d_{j\sigma}} \simeq \langle c_{l\sigma}^\dagger d_{l\sigma} \rangle \tilde{\mathcal{G}}_{d_l d_l}^{\sigma}, \quad (58)$$

and apply the equation-of-motion approach to $\tilde{\mathcal{G}}_{c_{l\sigma}^\dagger d_{l\sigma}, d_{j\sigma}}$. In order to cancel the second term with the last one in Eq. (55), we simultaneously combine the approximations in Eqs. (57) and (58) with the property,

$$\sum_{\vec{k}} \frac{1}{\sqrt{N}} V_{l\vec{k}} \phi_{\vec{k}}^*(\vec{R}_l) = \sum_{\vec{k}} \frac{1}{\sqrt{N}} V_{l\vec{k}}^* \phi_{\vec{k}}(\vec{R}_l), \quad (59)$$

which is only fulfilled on a metallic surface system, whereas, for the quantum wire, it holds in the side-coupled geometry $\vec{R}_l = \vec{R}_j = \vec{0}$. Bearing this in mind, we can rewrite Eq. (55) as follows:

$$\begin{aligned} (\varepsilon - \varepsilon_{ld} - U_l + i\eta) \tilde{\mathcal{G}}_{d_{l\sigma} n_{d_l \sigma}, d_{j\sigma}} & \\ &= \delta_{lj} \langle n_{d_l \sigma} \rangle + \left(\sum_{\vec{k}} \frac{1}{\sqrt{N}} V_{l\vec{k}}^* \phi_{\vec{k}}^*(\vec{R}_l) \right) \tilde{\mathcal{G}}_{c_{l\sigma}^\dagger d_{l\sigma}, d_{j\sigma}}. \end{aligned} \quad (60)$$

Once again, employing the equation-of-motion approach for $\tilde{\mathcal{G}}_{c_{l\sigma}^\dagger d_{l\sigma}, d_{j\sigma}}$, we find

$$\begin{aligned} (\varepsilon^+ - \varepsilon_{l\sigma}) \tilde{\mathcal{G}}_{c_{l\sigma}^\dagger d_{l\sigma}, d_{j\sigma}} &= V_{l\vec{k}} \frac{1}{\sqrt{N}} \phi_{\vec{k}}^*(\vec{R}_l) \tilde{\mathcal{G}}_{d_l n_{d_l \sigma}, d_{j\sigma}} \\ &+ \sum_{\vec{q}} V_{l\vec{q}}^* \frac{1}{\sqrt{N}} \phi_{\vec{q}}^*(\vec{R}_l) \tilde{\mathcal{G}}_{c_{l\sigma}^\dagger c_{l\sigma}, d_{j\sigma}} \\ &- \sum_{\vec{q}} V_{l\vec{q}} \frac{1}{\sqrt{N}} \phi_{\vec{q}}^*(\vec{R}_l) \tilde{\mathcal{G}}_{c_{l\sigma}^\dagger c_{l\sigma}, d_{j\sigma}} \\ &+ \sum_{j \neq l} V_{j\vec{k}} \frac{1}{\sqrt{N}} \phi_{\vec{k}}^*(\vec{R}_j) \tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\sigma} n_{d_j \sigma}, d_{j\sigma}}. \end{aligned} \quad (61)$$

Here, we continue with the Hubbard I scheme, proceeding as in Eqs. (57) and (58) by making the following approximations:

$$\tilde{\mathcal{G}}_{c_{l\sigma}^\dagger d_{l\sigma}, d_{j\sigma}} \simeq \langle d_{l\sigma}^\dagger c_{l\sigma} \rangle \tilde{\mathcal{G}}_{c_{l\sigma}^\dagger d_{l\sigma}}, \quad (62)$$

$$\tilde{\mathcal{G}}_{c_{l\sigma}^\dagger c_{l\sigma}, d_{j\sigma}} \simeq \langle d_{l\sigma}^\dagger c_{l\sigma} \rangle \tilde{\mathcal{G}}_{c_{l\sigma}^\dagger d_{l\sigma}}, \quad (63)$$

$$\tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\sigma} n_{d_j \sigma}, d_{j\sigma}} \simeq \langle n_{d_j \sigma} \rangle \tilde{\mathcal{G}}_{d_j d_j}^{\sigma}, \quad (64)$$

and replacing Eq. (59) in Eq. (61) to show that

$$\begin{aligned} \tilde{\mathcal{G}}_{c_{l\sigma}^\dagger d_{l\sigma}, d_{j\sigma}} &= \frac{V_{l\vec{k}} \frac{1}{\sqrt{N}} \phi_{\vec{k}}^*(\vec{R}_l)}{(\varepsilon^+ - \varepsilon_{l\sigma})} \tilde{\mathcal{G}}_{d_l n_{d_l \sigma}, d_{j\sigma}} \\ &+ \frac{\sum_{j \neq l} V_{j\vec{k}} \frac{1}{\sqrt{N}} \phi_{\vec{k}}^*(\vec{R}_j)}{(\varepsilon^+ - \varepsilon_{l\sigma})} \langle n_{d_j \sigma} \rangle \tilde{\mathcal{G}}_{d_j d_j}^{\sigma}. \end{aligned} \quad (65)$$

To close the original setup of Green's functions in Eqs. (50) and (51), we substitute Eq. (65) in Eq. (60) and obtain

$$\begin{aligned} (\varepsilon - \varepsilon_{ld} - U_l + i\Gamma_{l|\sigma}^0) \tilde{\mathcal{G}}_{d_{l\sigma} n_{d_l \sigma}, d_{j\sigma}} & \\ &= \delta_{lj} \langle n_{d_l \sigma} \rangle + \langle n_{d_l \sigma} \rangle \sum_{j \neq l} [\Sigma_{j|\sigma}^R(\varepsilon) - i\Gamma_{j|\sigma}] \tilde{\mathcal{G}}_{d_j d_j}^{\sigma}. \end{aligned} \quad (66)$$

where

$$\Gamma_{ll\sigma}^0 = \pi \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} |V_{l\vec{k}}|^2 \delta(\varepsilon - \varepsilon_{\vec{k}\sigma}), \quad (67)$$

which allows us to determine all the necessary Green's functions for the LDOS. Thus, to solve the system composed by Eqs. (50), (51), and (66), we now assume the side-coupled geometry $\vec{R}_1 = \vec{R}_2 = \vec{0}$ with symmetric couplings $V_{j\vec{k}} = V_{i\vec{k}}$ [see Fig. 1]. By adopting the wideband limit, for the sake of simplicity, from Eqs. (53), (54), and (67), we verify that $\Sigma_{jj\sigma}^R = \Sigma_{jj\sigma}^A = 0$ and $\Gamma_{jj\sigma} = \Gamma_{lj\sigma} = \Gamma_{ll\sigma}^0 = \Gamma_\sigma = \Gamma \frac{\rho_{\text{DOS}}}{\rho_0}$ (see Ref. 60 for a precise definition of the wideband limit). We also consider the infinite Coulomb correlation limit ($U_1 = U_2 \rightarrow \infty$). A geometry with $\vec{R}_1 \neq \vec{R}_2 \neq \vec{0}$ and beyond the wideband approximation will be published elsewhere. Thus, the direct Green's function for the impurity $j = 1$ reduces to the form

$$\tilde{G}_{d_1 d_1}^\sigma(\varepsilon) = \frac{1 - \langle n_{d_1 \sigma} \rangle}{\varepsilon - \varepsilon_{12d\sigma} + i\tilde{\Delta}_{12\sigma}}, \quad (68)$$

where

$$\varepsilon_{12d\sigma} = \varepsilon_{1d} + \tilde{\Sigma}_{12\sigma}(\varepsilon) \quad (69)$$

represents a renormalized energy level dressed by the real part of the nondiagonal self-energy,

$$\tilde{\Sigma}_{12\sigma}(\varepsilon) = -(1 - \langle n_{d_1 \sigma} \rangle)(1 - \langle n_{d_2 \sigma} \rangle) \frac{(\varepsilon - \varepsilon_{2d})}{(\varepsilon - \varepsilon_{2d})^2 + \Gamma_\sigma^2} \Gamma_\sigma^2, \quad (70)$$

and

$$\begin{aligned} \tilde{\Delta}_{12\sigma} &= \Gamma_\sigma - (1 - \langle n_{d_1 \sigma} \rangle)(1 - \langle n_{d_2 \sigma} \rangle) \Gamma_\sigma \\ &\approx \frac{\Gamma_\sigma^2}{(\varepsilon - \varepsilon_{2d})^2 + \Gamma_\sigma^2} \end{aligned} \quad (71)$$

is an effective hybridization function. The mixed Green's function $\tilde{G}_{d_2 d_1}^\sigma(\varepsilon)$ becomes

$$\tilde{G}_{d_2 d_1}^\sigma(\varepsilon) = -i\Gamma_\sigma \left\{ \frac{1 - \langle n_{d_2 \sigma} \rangle}{(\varepsilon - \varepsilon_{2d} + i\Gamma_\sigma)} \right\} \tilde{G}_{d_1 d_1}^\sigma(\varepsilon). \quad (72)$$

Notice that the other Green's functions $\tilde{G}_{d_1 d_2}^\sigma$ and $\tilde{G}_{d_1 d_1}^\sigma$ can be derived by swapping $1 \leftrightarrow 2$ in Eqs. (68) and (72).

IV. NUMERICAL RESULTS

A. Numerical parameters

Here, we present the results obtained via the formulation developed in the previous section. The energy scale adopted is the Anderson parameter Γ . We employ the following set of model parameters: $\Gamma = 0.2$ eV, $\varepsilon_{1d} = -10\Gamma$, and $\varepsilon_{2d} = -4.5\Gamma$.^{15,21} Such values correspond to a Kondo temperature $T_K \approx 50$ K found in the system Co/Cu(111) with Coulomb interaction $U = 2.9$ eV.^{13,15,19} Thus, the Hubbard I approximation is employed with $T = \Gamma/10k_B = 231.1$ K just to avoid Kondo physics. Defining $k_{F\uparrow} = k_F$, we measure the lateral distance R between the STM tip and the impurities in units of k_F^{-1}

by introducing the dimensionless parameter $k_F R$ [see Fig. 1]. Finally, in order to generate spin-polarized quantum beats in the LDOS, we substitute Eq. (2) with $P = 0.1$ in Eq. (27).

B. Metallic surface

We begin the analysis in the metallic surface apparatus by dividing our paper into regions we call short, intermediate, and long ranges. The short-range limit presented in Fig. 2(a) reveals that the LDOS, given by Eq. (24) as a function of energy, exhibits two Fano antiresonances. Each one corresponds to the discrete levels of the adatom ($j = 1$) and the subsurface impurity ($j = 2$). The main feature in this situation is that the Fano profile conserves its line shape when the dimensionless parameter $k_F R$ is changed. Additionally, this profile is suppressed for increasing distances, tending to the DOS background of the host.

In Fig. 2(b), we look at how the LDOS evolves with $k_F R$ exactly at the Fano antiresonance $\varepsilon = \varepsilon_{d_1} = -10\Gamma$. At the host site ($k_F R = 0$), the LDOS presents a depletion. Such a dip in the LDOS is a result of charge screening around the impurities by conduction electrons, which suppresses the LDOS of the

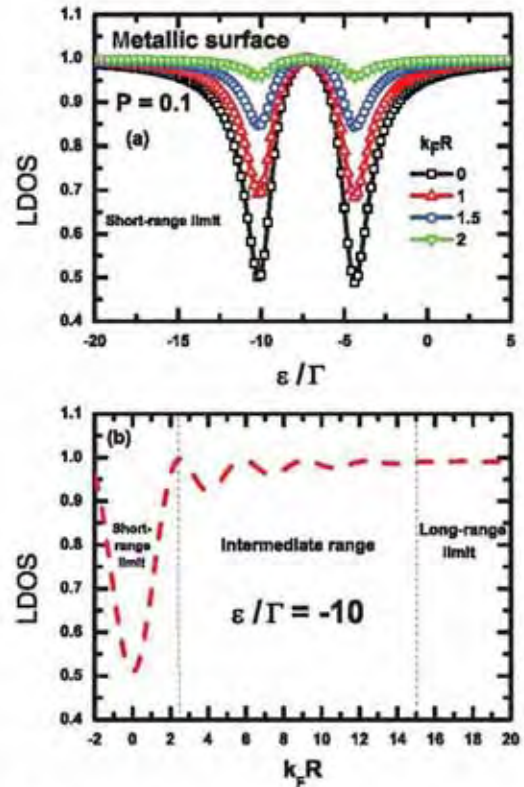


FIG. 2. (Color online) In both panels, we use $k_B T = 0.1\Gamma$. (a) LDOS [Eq. (24)] of a metallic surface with $P = 0.1$ as a function of ε/Γ for different values of $k_F R$ in the short-range limit [see panel (b)]. The Fano profile presents two antiresonances placed at $\varepsilon = \varepsilon_{d_1} = -10\Gamma$ and $\varepsilon = \varepsilon_{d_2} = -4.5\Gamma$, which display an evanescent behavior for increasing distances. (b) Keeping the energy at $\varepsilon = -10\Gamma$, Friedel oscillations appear in the LDOS.

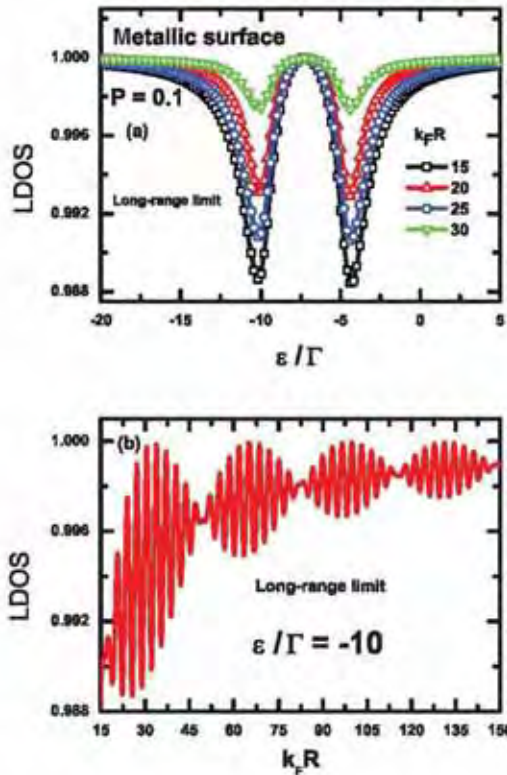


FIG. 3. (Color online) In both panels, we use $k_B T = 0.1\Gamma$. (a) LDOS [Eq. (24)] of a metallic surface with $P = 0.1$ as a function of ε/Γ for different values of $k_F R$ in the long-range limit [see panel (b)]. The Fano profile presents two antiresonances placed at $\varepsilon = \varepsilon_{1d} = -10\Gamma$ and $\varepsilon = \varepsilon_{2d} = -4.5\Gamma$, which display an oscillatory behavior for increasing distances. (b) Damped spin-polarized quantum beats emerge in the LDOS as a function of $k_F R$ with $\varepsilon = \varepsilon_{1d} = -10\Gamma$.

host. Beyond the adatom position, the LDOS is, indeed, dictated by Friedel oscillations, which also lead to a strong decay in the long-range limit [see Fig. 2(b)]. The evanescent feature of the LDOS is a result of the interplay between the Friedel-like expression $A_{j\sigma}^{2D}$ and the Fano parameter $q_{j\sigma}^{2D}$. These quantities are governed by Eqs. (30) and (43) where the former evolves spatially according to the zeroth-order Bessel function J_0 . Such damping in the LDOS has already been observed experimentally in a system composed by an Fe host and a Co adatom.⁵

In Fig. 3(a), we plot the Fano line shape in the long-range regime ($k_F R > 15$). The same dips at $\varepsilon = -10\Gamma$ and $\varepsilon = -4.5\Gamma$ are observed as in the short-range limit [Fig. 2(a)]. However, a contrasting feature is found between these two limits. Whereas, in the short-range case, the dips become suppressed as $k_F R$ increases, in both regions of intermediate and long ranges, the dip oscillates with $k_F R$. This is a result of the oscillatory profile observed in the LDOS for increasing $k_F R$ [see Fig. 2(b)]. In the long-range limit, the oscillations of the dip can be more clearly visualized in Fig. 3(b) where we show the LDOS at $\varepsilon = \varepsilon_{d_1} = -10\Gamma$. A peculiar beating is

observed in the LDOS due to the slightly different Fermi wave numbers [see Eq. (27)].

C. Quantum wire

Figure 4(a) shows the LDOS plotted against energy for different $k_F R$ values in the short-range limit. For the STM tip at $k_F R = 0$, the LDOS shows the two-dip structure already observed in Fig. 2(a). In contrast, as $k_F R$ increases, the antiresonances change to resonances, passing through intermediate profiles (asymmetric Fano line shapes). We emphasize that this behavior in the LDOS was recently observed in the experiment performed by Prüser *et al.* with atoms of Fe and Co beneath the Cu(100) surface.⁴⁵

In Fig. 4(b), we observe the evolution of the LDOS with $k_F R$. Nonevanescing oscillations occur, modulated by an amplitude beating. This undamped behavior is encoded by Eqs. (46) and (49) for Friedel-like oscillations ($A_{j\sigma}^{1D}$) and Fano interference ($q_{j\sigma}^{1D}$), respectively. These quantities are simple trigonometric functions without damping. This feature is due to the absence of an extra dimension for the scattering of the

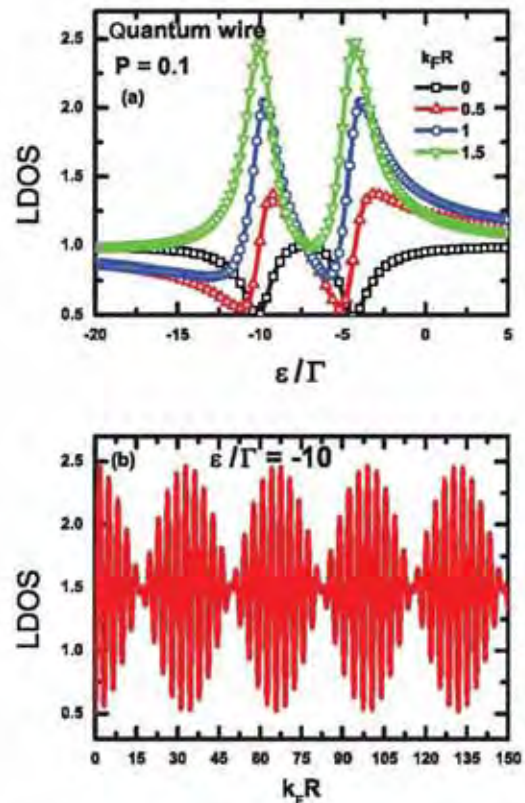


FIG. 4. (Color online) (a) LDOS [Eq. (24)] at $k_B T = 0.1\Gamma$ of a quantum wire with $P = 0.1$ as a function of ε/Γ for different values of positions $k_F R$. Fano profiles appear around $\varepsilon = \varepsilon_{1d} = -10\Gamma$ and $\varepsilon = \varepsilon_{2d} = -4.5\Gamma$. This pair of antiresonances (black line) can be tuned to resonances (green line) by moving the STM tip laterally. (b) In opposition to the metallic surface device, undamped spin-polarized quantum beats in the LDOS at $\varepsilon = \varepsilon_{1d} = -10\Gamma$ manifest.

electronic wave. On the other hand, in 2D, this propagation is spread in a plane leading to a spatial decay in the LDOS. Thus, the amplitude of the undamped beats is much larger than in the metallic surface device. This means that, in such cases, the LDOS signal can be more easily resolved experimentally.

D. Transport polarization

Another quantity we investigate is the spin polarization given by Eq. (25). As the differential conductance of Eq. (23) is a function of the spin-dependent LDOS $\rho_{\text{LDOS}}^{\sigma}$ of Eq. (21), the ferromagnetic hosts filter electrons that tunnel into (or out of) the STM tip. This filtering is dominated by the majority-spin component. Thus, devices without impurities behave as spin filters with a spatially uniform polarization that coincides with the value given by Eq. (2). Here, we adopt $P = 0.1$. Due to the impurities in the side-coupled geometry and the host dimensionality, this polarization is perturbed in two different forms. In both the metallic surface and the quantum wire as we can see in Figs. 5(a) and 5(b) with applied bias $\phi = \varepsilon_{1d} = -10\Gamma$, the polarization oscillates around $P_T =$

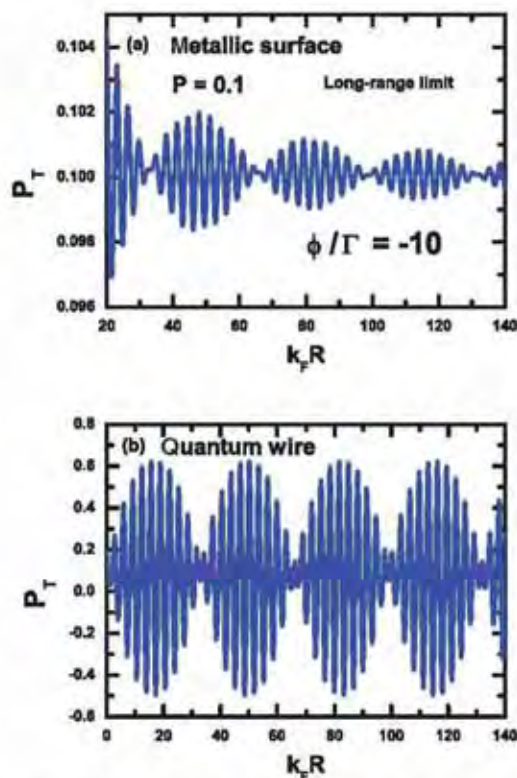


FIG. 5. (Color online) Transport polarization of the ferromagnetic hosts [Eq. (25)] at $k_F T = 0.1\Gamma$ and applied bias $\phi = \varepsilon_{1d} = -10\Gamma$. (a) Damped spin-polarized quantum beats appear in the polarization of the metallic surface device. (b) Undamped types occur in the polarization of the quantum wire. In both situations, we have a spatially resolved spin filter with a polarization that oscillates around $P = 0.1$. In the quantum wire case, this oscillation is more pronounced.

$P = 0.1$. Unlike the metallic surface system where small deviations with damping occur, the electron-focusing effect in the quantum wire leads to undamped and pronounced oscillations. The polarization in the latter case does not exceed $P_T \approx +0.62$ or fall below $P_T \approx -0.5$. Therefore, the polarized current through the junction formed by the STM tip and the surface alternates from spins up (+0.62) to down (-0.5) depending on the tip position. Additionally, along this probing direction, the polarization not only can invert the orientation of the majority-spin component, but also can become zero at some sites where locally, the unbalance of spins is totally suppressed. As a result, we have a tunneling current without polarization in specific positions on the sample surface. On the other hand, as we can see in Fig. 5(a), the amplitude of the beats in the metallic surface polarization is extremely suppressed and does not change its signal ($P_T > 0$). Thus, the quantum wire operates as a spatially resolved spin filter with a higher efficiency.

V. CONCLUSIONS

In order to investigate a ferromagnetic system with two impurities, we have calculated the LDOS and the spin polarization of hosts in two different dimensionalities. Impurities in the side-coupled geometry, as outlined in Fig. 1, were taken into account. We analyzed both a metallic surface and a quantum wire described by the two-impurity Anderson model in the picture of a spin-polarized electron gas with impurities away from the Kondo regime. We presented a model in which an unperturbed 1D electron host in the presence of localized states produces undamped behavior in the LDOS Fano profile [see Figs. 4(a) and 4(b)], similar to that observed experimentally.⁴⁵ In contrast, our 2D model revealed a damped oscillatory behavior [Figs. 2(a), 2(b), 3(a), and 3(b)]. We demonstrated that these opposed features originated from the interplay between the Friedel-like function and the Fano parameter, which assumed different functional forms according to the host dimensionality. Keeping the energy fixed and tuning the STM tip position, we verified the emergence of spin-polarized quantum beats in the LDOS given by Eq. (24) as well as in the transport polarization of Eq. (25). Such an effect is due to interference between the slightly different Fermi wave numbers $k_{F\uparrow}$ and $k_{F\downarrow}$ [Eq. (27)] in the LDOS, achievable in hosts with low spin polarizations. Therefore, the quantum wire setup behaves as a spatially resolved spin filter with a high efficiency as we can see in Fig. 5(b). Away from the adatom, this device can magnify or can locally invert the original spin orientation of the host, also displaying sites where this polarization is completely quenched. As a possible experimental implementation of this apparatus, we suggest the systems investigated by Prüser.⁴⁵ Such setups present the same one-dimensional character as our effective quantum wire model.

ACKNOWLEDGMENTS

This work was supported by the Brazilian agencies CNPq, CAPES, FAPEMIG, and PRoPe/UNESP. Support from the PRP/USP within the Research Support Center initiative (NAP Q-NANO) is also acknowledged.

- ¹U. Fano, *Phys. Rev.* **124**, 1866 (1961).
- ²A. E. Miroschnichenko, S. Flach, and Y. S. Kivshar, *Rev. Mod. Phys.* **82**, 2257 (2010).
- ³A. C. Hewson, *The Kondo Problem to Heavy Fermions* (Cambridge University Press, Cambridge, UK, 1993).
- ⁴A. C. Seridonio, F. S. Oracio, F. M. Souza, and M. S. Figueira, *Phys. Rev. B* **85**, 165109 (2012).
- ⁵S. L. Kawahara, J. Lagoute, V. Repain, C. Chacon, Y. Girard, J. Klein, and S. Rousset, *Phys. Rev. B* **82**, 020406R (2010).
- ⁶A. C. Seridonio, F. M. Souza, and I. A. Shelykh, *J. Phys.: Condens. Matter* **21**, 095003 (2009).
- ⁷A. C. Seridonio, F. M. Souza, J. Del Nero, and I. A. Shelykh, *Physica E* **41**, 1611 (2009).
- ⁸V. Madhavan, W. Chen, T. Jamneala, M. F. Crommie, and N. S. Wingreen, *Science* **280**, 567 (1998).
- ⁹A. Schiller and S. Hershfield, *Phys. Rev. B* **61**, 9036 (2000).
- ¹⁰M. Plihal and J. W. Gadzuk, *Phys. Rev. B* **63**, 085404 (2001).
- ¹¹H. C. Manoharan, C. P. Lutz, and D. M. Eigler, *Nature (London)* **403**, 512 (2000).
- ¹²V. Madhavan, W. Chen, T. Jamneala, M. F. Crommie, and N. S. Wingreen, *Phys. Rev. B* **64**, 165412 (2001).
- ¹³N. Knorr, M. A. Schneider, L. Diekhöner, P. Wahl, and K. Kern, *Phys. Rev. Lett.* **88**, 096804 (2002).
- ¹⁴P. Wahl, L. Diekhöner, G. Wittich, L. Vitali, M. A. Schneider, and K. Kern, *Phys. Rev. Lett.* **95**, 166601 (2005).
- ¹⁵C.-Y. Lin, A. H. Castro Neto, and B. A. Jones, *Phys. Rev. Lett.* **97**, 156102 (2006).
- ¹⁶Y.-S. Fu, S.-H. Ji, X. Chen, X.-C. Ma, R. Wu, C.-C. Wang, W.-H. Duan, X.-H. Qiu, B. Sun, P. Zhang, J.-F. Jia, and Q.-K. Xue, *Phys. Rev. Lett.* **99**, 256601 (2007).
- ¹⁷J. M. Aguiar-Hualde, G. Chiappe, E. Louis, and E. V. Anda, *Phys. Rev. B* **76**, 155427 (2007).
- ¹⁸G. Chiappe and E. Louis, *Phys. Rev. Lett.* **97**, 076806 (2006).
- ¹⁹O. Újsághy, J. Kroha, L. Szunyogh, and A. Zawadowski, *Phys. Rev. Lett.* **85**, 2557 (2000).
- ²⁰A. 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).
- ²¹M. Ternes, A. J. Heinrich, and W. D. Schneider, *J. Phys.: Condens. Matter* **21**, 053001 (2009).
- ²²J. Figgins and D. K. Morr, *Phys. Rev. Lett.* **104**, 187202 (2010).
- ²³P. Wölfle, Y. Dubi, and A. V. Balatsky, *Phys. Rev. Lett.* **105**, 246401 (2010).
- ²⁴P. H. Penteado, F. M. Souza, A. C. Seridonio, E. Vernek, and J. C. Egues, *Phys. Rev. B* **84**, 125439 (2011).
- ²⁵N. Néel, J. Kröger, and R. Berndt, *Phys. Rev. B* **82**, 233401 (2010).
- ²⁶P. Zhang, Q.-K. Xue, Y. P. Wang, and X. C. Xie, *Phys. Rev. Lett.* **89**, 286803 (2002).
- ²⁷Y. Qi, J. X. Zhu, S. Zhang, and C. S. Ting, *Phys. Rev. B* **78**, 045305 (2008).
- ²⁸J. Martinek, M. Sindel, L. Borda, J. Barnaś, J. König, G. Schön, and J. von Delft, *Phys. Rev. Lett.* **91**, 247202 (2003).
- ²⁹J. Martinek, Y. Utsumi, H. Imamura, J. Barnaś, S. Maekawa, J. König, and G. Schön, *Phys. Rev. Lett.* **91**, 127203 (2003).
- ³⁰M.-S. Choi, D. Sánchez, and R. López, *Phys. Rev. Lett.* **92**, 056601 (2004).
- ³¹J. Martinek, M. Sindel, L. Borda, J. Barnaś, R. Bulla, J. König, G. Schön, S. Maekawa, and J. von Delft, *Phys. Rev. B* **72**, 121302(R) (2005).
- ³²Y. Utsumi, J. Martinek, G. Schön, H. Imamura, and S. Maekawa, *Phys. Rev. B* **71**, 245116 (2005).
- ³³R. Świrakowicz, M. Wilczyński, M. Wawrzyniak, and J. Barnaś, *Phys. Rev. B* **73**, 193312 (2006).
- ³⁴A. N. Pasupathy, R. C. Bialczak, J. Martinek, J. E. Grose, L. A. K. Donev, P. L. McEuen, and D. C. Ralph, *Science* **306**, 86 (2004).
- ³⁵M. Sindel, L. Borda, J. Martinek, R. Bulla, J. König, G. Schön, S. Maekawa, and J. von Delft, *Phys. Rev. B* **76**, 045321 (2007).
- ³⁶K. Hamaya, M. Kitabatake, K. Shibata, M. Jung, M. Kawamura, K. Hirakawa, T. Machida, and T. Taniyama, *Appl. Phys. Lett.* **91**, 232105 (2007).
- ³⁷K. 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).
- ³⁸M. R. Calvo, J. Fernández-Rossier, J. J. Palacios, D. Jacob, D. Natelson, and C. Untiedt, *Nature (London)* **458**, 1150 (2009).
- ³⁹J. Hauptmann, J. Paaske, and P. Lindelof, *Nat. Phys.* **4**, 373 (2008).
- ⁴⁰I. Weymann and L. Borda, *Phys. Rev. B* **81**, 115445 (2010).
- ⁴¹I. Weymann, *Phys. Rev. B* **83**, 113306 (2011).
- ⁴²M. Misiorny, I. Weymann, and J. Barnaś, *Phys. Rev. Lett.* **106**, 126602 (2011).
- ⁴³M. Gaass, A. K. Hüttel, K. Kang, I. Weymann, J. von Delft, and C. Strunk, *Phys. Rev. Lett.* **107**, 176808 (2011).
- ⁴⁴M. Misiorny, I. Weymann, and J. Barnaś, *Phys. Rev. B* **84**, 035445 (2011).
- ⁴⁵H. Prüser, M. Wenderoth, A. Weismann, and R. G. Ulbrich, *Phys. Rev. Lett.* **108**, 166604 (2012).
- ⁴⁶H. Prüser, M. Wenderoth, P. E. Dargel, A. Weismann, R. Peters, T. Pruschke, and R. G. Ulbrich, *Nat. Phys.* **7**, 203 (2011).
- ⁴⁷S. Lounis, P. Zahn, A. Weismann, M. Wenderoth, R. G. Ulbrich, I. Mertig, P. H. Dederichs, and S. Blügel, *Phys. Rev. B* **83**, 035427 (2011).
- ⁴⁸A. Weismann, M. Wenderoth, S. Lounis, P. Zahn, N. Quaa, R. G. Ulbrich, P. H. Dederichs, and S. Blügel, *Science* **323**, 1190 (2009).
- ⁴⁹A. Weismann, Ph.D. thesis, Georg-August-Universität zu Göttingen, 2008.
- ⁵⁰S. Lounis, Ph.D. thesis, Rheinisch-Westfälische Technische Hochschule (RWTH) Aachen, 2007.
- ⁵¹A. Stroppa, X. Duan, M. Peressi, D. Furlanetto, and S. Modesti, *Phys. Rev. B* **75**, 195335 (2007).
- ⁵²F. M. Souza, *Phys. Rev. B* **76**, 205315 (2007).
- ⁵³P. Trocha, *Phys. Rev. B* **82**, 115320 (2010).
- ⁵⁴P. W. Anderson, *Phys. Rev.* **124**, 41 (1961).
- ⁵⁵H. 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).
- ⁵⁶The occupancy of the impurities can strongly depend on the positions of the levels $\epsilon_{j,d}$. In our calculations, we adopt $\epsilon_{j,d}$ much smaller than the Fermi level, so the self-consistent calculation yields occupations close to unity (single occupancy).
- ⁵⁷E. C. Stoner, *Proc. R. Soc. London, Ser. A* **169**, 339 (1939).
- ⁵⁸F. M. Souza, J. C. Egues, and A. P. Jauho, *Braz. J. Phys.* **34**, 565 (2004).
- ⁵⁹Quantum dot systems may also display a beating pattern, in particular, if one considers two alternate dot levels with slightly different frequencies. In this case, quantum beats appear in the electrical current as a function of time (see Refs. 52 and 53).

⁶⁰The wideband limit consists of (i) neglecting the real part of the tunneling self-energy $\Sigma_{i\sigma}^R$ (level shift) and (ii) assuming that the linewidths $\Gamma_{i\sigma}$ are energy-independent constants (see Ref. 55). To summarize, the metallic behavior of the hosts lies in the vicinity of the Fermi level, which ensures the aforemen-

tioned assumptions. Thus, we can safely extrapolate to infinity the limits of the integral in Eq. (56) to calculate $\langle n_{d,\sigma} \rangle$ (see Ref. 61).

⁶¹A. P. Jauho, N. S. Wingreen, and Y. Meir, Phys. Rev. B **50**, 5528 (1994).