

UNIVERSIDADE ESTADUAL PAULISTA "JÚLIO DE MESQUITA FILHO"

Faculdade de Engenharia de Ilha Solteira

WILLIAM NOBUHIRO MIZOBATA

**INTERAÇÃO ENTRE IMPUREZAS ENTERRADAS
EM UM SEMIMETAL DE WEYL: CASO
MAGNÉTICO**

Ilha Solteira, SP

Fevereiro de 2019.

WILLIAM NOBUHIRO MIZOBATA

**INTERAÇÃO ENTRE IMPUREZAS ENTERRADAS
EM UM SEMIMETAL DE WEYL: CASO
MAGNÉTICO**

Dissertação apresentada ao Departamento de Física e Química da Faculdade de Engenharia de Ilha Solteira - UNESP, para a obtenção de Título de Mestre em Ciência dos Materiais, na Área de Física da Matéria Condensada.

Orientador: Prof. Dr. Antônio Carlos Ferreira Seridonio

Ilha Solteira, SP
Fevereiro de 2019.

FICHA CATALOGRÁFICA

Desenvolvido pelo Serviço Técnico de Biblioteca e Documentação

Mizobata, William Nobuhiro.

M685i Interação entre impurezas enterradas em um semimetal de weyl: caso magnético / William Nobuhiro Mizobata. -- Ilha Solteira: [s.n.], 2019
66 f. : il.

Dissertação (mestrado) - Universidade Estadual Paulista. Faculdade de Engenharia. Área de conhecimento: Física da Matéria Condensada, 2019

Orientador: Antonio Carlos Ferreira Seridonio
Inclui bibliografia


Sandra Maria Clemente de Souza
DSTB/STRAUD
Supervisão de Seção
CRB 8-4740

1. Semimetal de weyl-drac. 2. Interação entre impurezas. 3. Magnetização de impurezas.

CERTIFICADO DE APROVAÇÃO

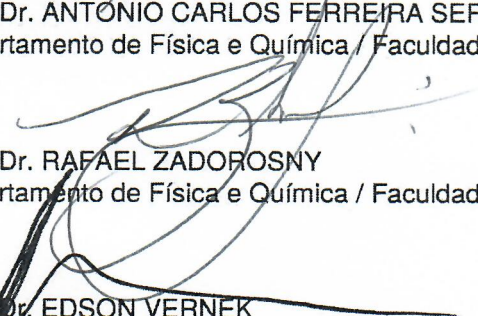
TÍTULO DA DISSERTAÇÃO: Interação entre impurezas enterradas em um semimental de Weyl: Caso magnético

AUTOR: WILLIAM NOBUHIRO MIZOBATA

ORIENTADOR: ANTONIO CARLOS FERREIRA SERIDONIO

Aprovado como parte das exigências para obtenção do Título de Mestre em CIÊNCIA DOS MATERIAIS, área: Física da Matéria Condensada pela Comissão Examinadora:


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


Prof. Dr. RAFAEL ZADOROSNY
Departamento de Física e Química / Faculdade de Engenharia de Ilha Solteira


Prof. Dr. EDSON VERNEK
Departamento de Física / Universidade Federal de Uberlândia

Ilha Solteira, 27 de fevereiro de 2019

© 2019 William Nobuhiro Mizobata
All rights reserved.

This study was financed in part by the Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior - Brasil (CAPES) - Finance Code 001.

*Aos meus pais, **Sônia** e **Rubens**, que me apoiaram sempre e nunca desistiram de mim.
A minha amada **Pâmela** e minha filha **Helena**, pelo carinho e amor que me motivam
todos dia para realizar meus sonhos.*

It's my life.

É a minha vida.

Bon jovi, It's my life.

Agradecimentos

Agradeço ao meu orientador Prof. Antonio Carlos Ferreira Seridonio. Aos meus amigos e companheiros de trabalho, Luciano, Yuri e Renan. À fundação CAPES (Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior) pelo suporte financeiro, no qual foi extremamente importante para a realização da pesquisa. À minha família e ao meu grande amor, Pâmela e minha querida filha Helena.

Resumo

Investigamos teoricamente um sistema composto por duas impurezas afastadas e enteradas em um semimetal de Weyl. Analisamos a densidade de estados local para duas situações: com simetrias de reversão temporal e inversão preservadas e; simetria de reversão temporal quebrada e inversão preservada. Na situação em que as duas simetrias são preservadas, o Hamiltoniano descreve um semimetal de Dirac. Sendo assim, verificamos a densidade de estados local em dois pontos diferentes do semimetal de Dirac e os orbitais moleculares formado pelas impurezas. É possível observar que em alguns pontos, a densidade de estados total, que pode ser obtido experimentalmente via espectroscopia de varredura por tunelamento, há a presença de apenas dois picos, enquanto que em outro ponto há a presença de quatro picos. Sendo assim, a presença de dois picos nos leva a crer que não há interação entre as impurezas, entretanto, em outro ponto que contém quatro picos em sua densidade de estados, mostra que há interação entre as impurezas. Analisamos os orbitais moleculares realizando uma topografia espacial da densidade de estados e é possível observar estados ligante e antiligante entre as impurezas com orbitais s . A segunda situação, com a quebra de simetria de reversão temporal e simetria de inversão preservada, temos um semimetal de Weyl com as bandas de energias separadas no espaço dos momentos e com energias degeneradas. Verificamos na densidade de estados local, uma magnetização das impurezas devido a direção do campo de quebra de simetria de reversão temporal aplicado na direção da ligação entre as impurezas. Por fim, levantamos uma topografia espacial no semimetal de Weyl e observamos que os orbitais s das impurezas são excitados para orbitais p formando uma ligação molecular do tipo σ .

Palavras-chave: Semimetal de Weyl, semimetal de Dirac, magnetização.

Abstract

We investigate theoretically the setup composed by two distant impurities and buried in Weyl semimetal. We analyze a local density of states for two situations: with time reversal symmetry and inversion symmetry preserved and; time reversal symmetry broken and inversion symmetry preserved. In the situation that the two symmetries are preserved, the Hamiltonian describes a Dirac semimetal. Therefore, we verified the local density of states in two different points of Dirac semimetal and the molecular orbital formed by the impurities. It is possible to observe that in some points, the total density of states, which can be obtained experimentally via scanning tunneling microscope, there is the presence of just two peaks, while that in another point there is the presence of four peaks. Therefore, the presence of two peaks leads us to believe that there is no interaction between impurities, however, in the another point that contain four peaks in the density of states, show that there is interaction between the impurities. We analyze the molecular orbital realizing a spacial topography of density of states and it is possible to observe bonding and antibonding states between impurities with s orbital. The second situation, with the time reversal symmetry broken and inversion symmetry preserved, we have a Weyl semimetal with separated energy bands in momentum space and degenerate energy. We verified in the local density of states, a magnetization of the impurities due to the time reversal symmetry breaking field applied in the direction of the bond between impurities. Finally, we determined a spatial topography on the Weyl semimetal and observed that the s orbital of impurities are excited to p orbital forming a molecular bond of σ -type.

Keywords: Weyl semimetal, Dirac semimetal, magnetization.

Lista de Figuras

1.1	Estrutura de banda do grafeno. Relação de dispersão entre a energia $E_{\mathbf{k}}$ e os vetores de onda k_x e k_y . Na região do ponto de Dirac, estrutura de banda com a banda de valência e de condução. Entre as bandas de valência e de condução, há um <i>gap</i> pontual conhecido como <i>pseudogap</i>	2
1.2	Nós de Weyl com quiralidades opostas. As setas representam os vetores de <i>spin</i> σ que podem ser paralelos ou antiparalelos ao vetor momento $\mathbf{p}$. A representação da quiralidade é $\chi = \pm 1$	4
1.3	Estrutura de bandas: (a) SMs Dirac, (b) SMs Weyl <i>noncentrosymmetric</i> com quebra de IS e TRS preservada e, (c) SMs Weyl com quebra de TRS e IS preservada. As cores dos cones indica a quiralidade dos nós de Weyl e o nível de Fermi está localizado em $\varepsilon_F = 0$	5
2.1	Representação do modelo proposto por Anderson de uma impureza adsorvida em um metal hospedeiro. A intensidade de hibridização é dada pelo parâmetro V entre a impureza (esfera vermelha) e a banda de condução.	6
2.2	Figura esquemática da densidade de estados para o modelo de Anderson de uma impureza acoplada em um metal.	7
4.1	Representação do sistema proposto: duas impurezas com níveis de energia em $\varepsilon_{d1\sigma}$ e $\varepsilon_{d2\sigma}$, enterradas em um 3D-WSM, na posição $\mathbf{R}_1 = (0, -1, 0)\text{nm}$ e $\mathbf{R}_2 = (0, 1, 0)\text{nm}$ respectivamente. P_1 e P_2 no topo do hospedeiro, representam sítios no qual a Ldos são examinadas por um STM-tip.	16

5.1	Ponta de STM posicionada em $\mathbf{R}_m = (0,0,1)$ na primeira coluna e $\mathbf{R}_m = (1,1,1)$ na segunda coluna. Os painéis (a) e (b) são as densidades de estados das impurezas Dos_{11} (curva sólida verde) e a Dos_{22} (curva tracejada amarela). Nos painéis (c) e (d) temos densidade de estados local induzido pelas impurezas para $j = l$ (curva sólida vermelha) e $j \neq l$ (curva tracejada azul). No painel (c), temos ressonâncias cancelada totalmente pela antirressonância em torno de $\varepsilon \approx \pm 6.7 \times 10^{-2}D$ e no painel (d), cancelamento parcial em que pode ser melhor visualizada na LDOS total. No painel (e), temos a LDOS total que apresenta um estado ligado no contínuo no nível $\varepsilon \approx \pm 6.7 \times 10^{-2}D$ devido a ausência de estados. Entretanto, no painel (f), temos um decaimento do estado ligado no contínuo no nível $\varepsilon \approx \pm 6.7 \times 10^{-2}D$ devido o cancelamento parcial da antirressonância.	44
5.2	Magnetização das impurezas com a variação de Q_y	45
5.3	Ponta de STM posicionada em $\mathbf{R}_m = (0,0,1)$ para $\mathbf{Q} = 0.01\hat{j}$. Painéis (a) e (b) apresentam a Dos_{11} e Dos_{22} , respectivamente, para <i>spin up</i> (curva sólida verde) e <i>spin down</i> (curva tracejada amarela). Painel (c), densidade local de estados $j = l$ (curva sólida vermelha) e $j \neq l$ (curva pontilhada azul). Painel (d), Ldos total apresentando quatro picos na banda de valência e de condução.	46
5.4	Auto-energia com os parâmetros $\mathbf{Q} = 0.02\hat{i}$ e $\mathbf{Q} = 0.02\hat{j}$ separados por <i>spin</i> , sendo que para os painéis: (a)Parte imaginária da auto-energia da correlação entre a impureza-hospedeiro; (b)Parte real da auto-energia da correlação entre impureza-impureza.	47
5.5	Topografia espacial da LDOS na superfície de um WSM 8-por-8nm para quatro energias. Nos painéis (a) e (c) com $\varepsilon \approx -8 \times 10^{-2}D$ e $\varepsilon \approx -5.8 \times 10^{-2}D$, apresentando orbitais moleculares do tipo σ ligantes devido a interferência construtiva da $\Delta Ldos$. Nos painéis (b) e (d) com $\varepsilon \approx -6.7 \times 10^{-2}D$ e $\varepsilon \approx -4.9 \times 10^{-2}D$, apresentando orbitais moleculares do tipo σ anti-ligantes devido a interferências destrutivas.	48

5.6	Ponta de STM posicionada em $\mathbf{R}_m = (0,0,1)$ para $Q_y = 0.157$. Painéis (a) e (b) apresentam a Dos_{11} e Dos_{22} , respectivamente, para <i>spin up</i> (curva sólida verde) e <i>spin down</i> (curva tracejada amarela). Painel (c), densidade local de estados $j = l$ (curva sólida vermelha) e $j \neq l$ (curva pontilhada azul). Painel (d), Ldos total apresentando quatro picos na banda de valência e de condução.	49
5.7	Topografia espacial com número de onda $Q_y = 0.157$ e energia (a) estado antiligante no nível $\varepsilon \approx -6.7 \times 10^{-2}D$ e (b) estado ligante no nível $\varepsilon \approx -5.9 \times 10^{-2}D$ de ligação molecular do tipo σ	50

Lista de abreviações

WSM - *Weyl semimetal* - Semimetal de Weyl.

DSM - *Dirac semimetal* - Semimetal de Dirac.

TRS - *Time reversal symmetry* - Simetria de reversão temporal.

IS - *Inversion symmetry* - Simetria de inversão.

STM - *Scanning tunneling microscope* - Microscópio de varredura por tunelamento.

Ldos - *Local density of states* - Densidade local de estados.

Dos - *Density of states* - Densidade de estados.

Sumário

1	INTRODUÇÃO	1
2	MODELO DE ANDERSON	6
2.1	Modelo de Anderson de uma impureza	6
3	FORMALISMO DAS FUNÇÕES DE GREEN	9
3.1	Funções de Green	9
3.2	Equação do movimento	11
3.3	Aproximação Hubbard I	13
4	MODELO TEÓRICO	15
4.1	Hamiltoniano do Sistema	16
4.2	Densidade local de estados	19
4.3	Funções de Green das impurezas	28
4.4	Auto-Energia	31
4.4.1	Auto-Energia para $R \neq 0$	31
4.4.2	Auto-Energia para $R = 0$	38
5	RESULTADOS E DISCUSSÕES	43
6	CONCLUSÃO	51
	Referências Bibliográficas	53

Capítulo 1

INTRODUÇÃO

Em um gás de elétrons livres, a equação de Schrödinger descreve muito bem os elétrons, com massa de repouso não nulas e velocidade muito inferior à da luz, contendo uma relação de dispersão que é função quadrática do momento

$$E(\mathbf{k}) = \frac{\hbar \mathbf{k}^2}{2m}. \quad (1.1)$$

Tal sistema, pode ser observado em um metal, em que os estados com baixa energia em temperatura igual a zero, abaixo do nível ocupado mais energético ε_F (energia de Fermi), os elétrons preenchem uma esfera conhecida como esfera de Fermi.

Em 1928, o físico teórico britânico Paul Adrien Maurice Dirac, propôs, na tentativa de linearizar a equação de Schrödinger, uma equação conhecida como *equação de Dirac* [1]. Tal equação resultou no sucesso da conciliação da relatividade especial com a mecânica quântica por ser capaz de descrever elétrons relativísticos, diferente da equação de Schrödinger. Tais elétrons relativísticos contêm uma relação de dispersão linear que é função do módulo do momento

$$E(\mathbf{k}) = C |\mathbf{k}|, \quad (1.2)$$

sendo C uma constante geral que depende das características do sistema em estudo.

Em física da matéria condensada, este fenômeno pode ser observado em certos materiais que satisfazem a equação de Dirac, como por exemplo: grafeno, semimetal de Dirac (DSM) e semimetal de Weyl (WSM).

O grafeno é um material bidimensional composto por átomos de carbono formando células hexagonais, sua estrutura de banda exibe uma relação de dispersão linear, formando cones de Dirac localizados nos cantos da zona de Brillouin [2–5], como apresenta a (Fig. 1.1).

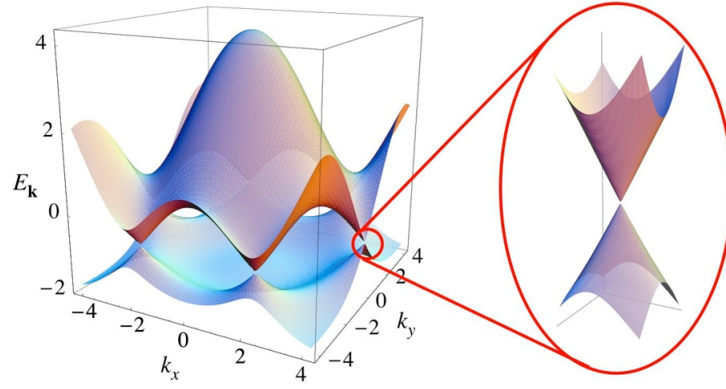


Figura 1.1: Estrutura de banda do grafeno. Relação de dispersão entre a energia $E_{\mathbf{k}}$ e os vetores de onda k_x e k_y . Na região do ponto de Dirac, estrutura de banda com a banda de valência e de condução. Entre as bandas de valência e de condução, há um *gap* pontual conhecido como *pseudogap*

Fonte: A. H. Castro Neto *et al*, Rev. Mod. Phys. 81, 109 (2009).

O semimetal de Dirac, diferente do grafeno, além de ser um material tridimensional, possui uma relação de dispersão linear nas três direções no espaço dos momentos[6–8]. Entre as banda de valência e de condução deste material, na região do nível de Fermi, há um *gap* pontual conhecido como *pseudogap* contendo pontos de Dirac que, em torno destes pontos, há uma dispersão de quasipartículas dos férmions de Dirac relativísticos com massa efetiva zero [9–11]. O Halmiltoniano que descreve a relação de dispersão do Dirac é

$$H(\mathbf{k}) = v_F \chi \mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\sigma}, \quad (1.3)$$

em que $\mathbf{k} = k_x, k_y, k_z$ é o vetor de onda, $\boldsymbol{\sigma} = \sigma_x, \sigma_y, \sigma_z$ são as matrizes de Pauli, v_F é a velocidade de Fermi e $\chi = \pm 1$ é a quiralidade. A quiralidade é definida pela projeção do vetor de *spin* $\mathbf{s}$ com o momento da partícula $\mathbf{p}$

$$\chi = \frac{\mathbf{p} \cdot \mathbf{s}}{|\mathbf{p}| |\mathbf{s}|}. \quad (1.4)$$

Para este caso, esta quantidade representa uma estrutura de banda para $\chi = 1$ e outra para $\chi = -1$. Devido a esta quantidade, é possível descrever uma degenerescência dupla na estrutura de banda do semimetal de Dirac, ou seja, podemos imaginar dois cones de Dirac sobrepostos com a mesma energia e no mesmo ponto $\mathbf{k}$. Tal degenerescência é protegida por dois tipos de simetrias: reversão temporal (TRS) e de inversão (IS) [12–14]. As duas simetrias são degeneradas quando, TRS: $\sigma_y H_\chi^*(\mathbf{k}) \sigma_y = H_\chi(-\mathbf{k})$ e IS: $\sigma_x H_\chi(\mathbf{k}) \sigma_x = H_\chi(-\mathbf{k})$ [15, 16]. Entretanto, ao quebrar estas simetrias, a degenerescência é perdida tornando-se um semimetal de Weyl [17]. A quebra das simetrias pode gerar uma separação dos cones no espaço dos momentos e(ou) alterar as energias, gerando nós de Weyl com quiralidades definidas. Estes nós de Weyl podem ser vistos como monopolos magnéticos no espaço dos momentos, agindo como emissor e receptor de linhas de campo [18], como apresentado na (Fig. 1.2).

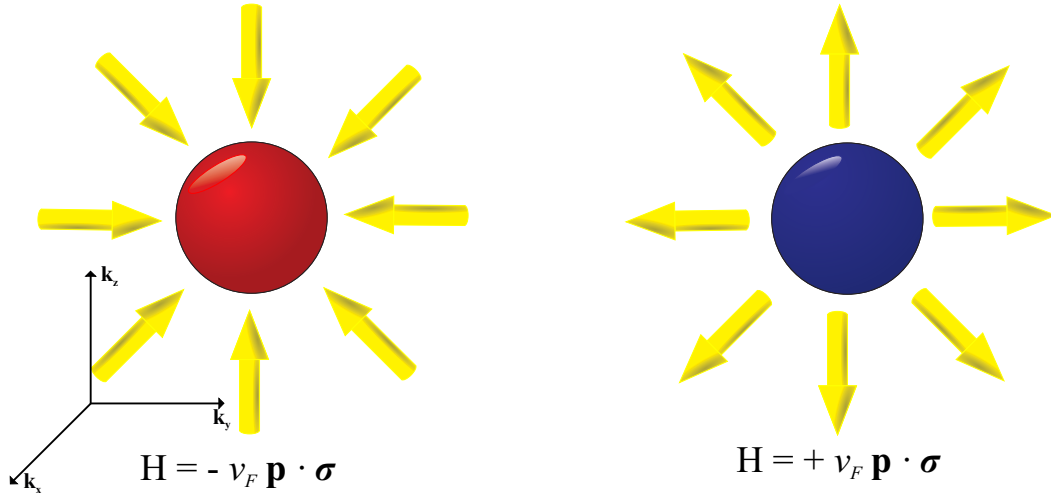


Figura 1.2: Nós de Weyl com quiralidades opostas. As setas representam os vetores de *spin* σ que podem ser paralelos ou antiparalelos ao vetor momento $\mathbf{p}$. A representação da quiralidade é $\chi = \pm 1$.

O Hamiltoniano que descreve a relação de dispersão do semimetal de Weyl é

$$H_{\chi}(\mathbf{k}) = \chi [\hbar v_F \boldsymbol{\sigma} \cdot (\mathbf{k} - \chi \mathbf{Q}) + \sigma_0 Q_0], \quad (1.5)$$

onde $\mathbf{Q}$ é um campo pseudo-magnético responsável pela separação dos cones no espaço $\mathbf{k}$ e Q_0 é responsável pela mudança nas energias dos cones. O campo pseudo-magnético $\mathbf{Q}$ pode ser interpretado como um análogo do potencial vetor responsável pelos níveis de Landau, em que os níveis de energia de uma partícula carregada é quantizada sobre a atuação de um campo magnético. A quiralidade, no mesmo contexto, é um análogo a carga da partícula.

Com este Hamiltoniano, é possível descrever três tipos de semimetais. O regime que preserva as duas simetrias, quando $\mathbf{Q} = 0$ e $Q_0 = 0$, retoma ao Hamiltoniano do Dirac-3D, descrevendo a degenerescência do par de nós de Weyl devido à quiralidade, resultando em duas bandas de energia sobrepostas Fig. 1.3(a). A situação em que temos uma quebra de *IS*, mas que preserva a *TRS*, há uma separação dos nós de Weyl na energia mas no mesmo ponto $\mathbf{k}$ Fig. 1.3(b). A outra situação é a quebra de *TRS*, mas que preserva

a IS , temos uma separação das bandas de energia no espaço dos momentos e quiralidades opostas, uma em $-\mathbf{k}$ e a outra em $\mathbf{k}$ Fig. 1.3(c). Com a simetria de inversão preservada, garante que os cones separados tenham a mesma energia.

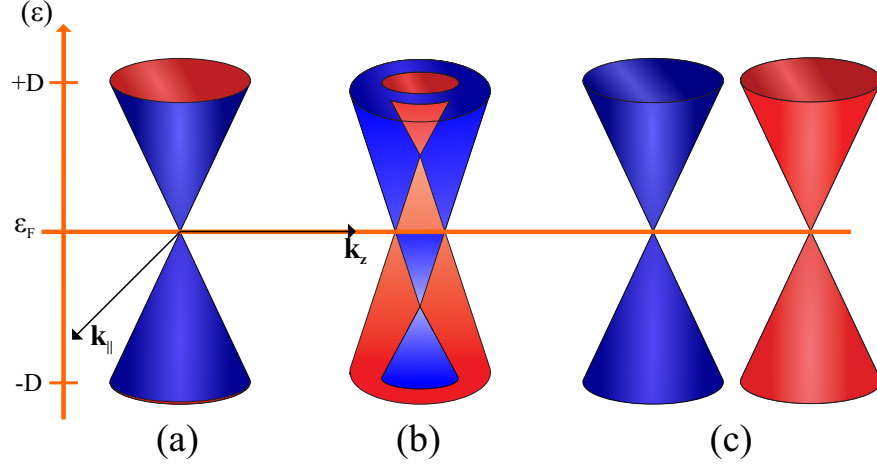


Figura 1.3: Estrutura de bandas: (a) SMs Dirac, (b) SMs Weyl *noncentrosymmetric* com quebra de IS e TRS preservada e, (c) SMs Weyl com quebra de TRS e IS preservada. As cores dos cones indica a quiralidade dos nós de Weyl e o nível de Fermi está localizado em $\varepsilon_F = 0$.

Dentro deste contexto, investigamos a correlação de impurezas nos semimetais de Dirac e Weyl, com quebra de TRS e IS preservada e, o papel do campo $\mathbf{Q}$ no espalhamento eletrônico. Tais propriedades eletrônicas podem ser investigadas teoricamente através da densidade de estados local (Ldos) induzida na superfície do material e experimentalmente detectada por microscopia de varredura por tunelamento (STM - Scanning Tunneling Microscope).

Portanto, organizamos este trabalho da seguinte forma: No Capítulo 2, abordamos o modelo de Anderson que descreve a interação de hospedeiro-impureza-STM. No Capítulo 3, introduzimos formalismo das funções de Green aplicado ao cálculo da equação do movimento e a aproximação Hubbard I. No Capítulo 4, apresentamos o modelo teórico efetivo e as principais passagens dos cálculos realizados. No Capítulo 5, discutimos os resultados sobre o sistema e no Capítulo 6, as conclusões sobre a transição do semimetal de Dirac 3D para o Weyl 3D.

Capítulo 2

MODELO DE ANDERSON

Em 1961, P. W. Anderson apresentou um modelo [19] para explicar resultados experimentais em que impurezas com orbitais d ou f incompletos possuem momentos magnéticos bem definidos quando dissolvidos em metais simples, como o cobre [20].

Com o propósito de descrever a transição de impurezas metálicas em um hospedeiro não magnético, Anderson propôs um modelo capaz de mostrar o comportamento dinâmico e ainda simples o suficiente para permitir cálculos explícitos.

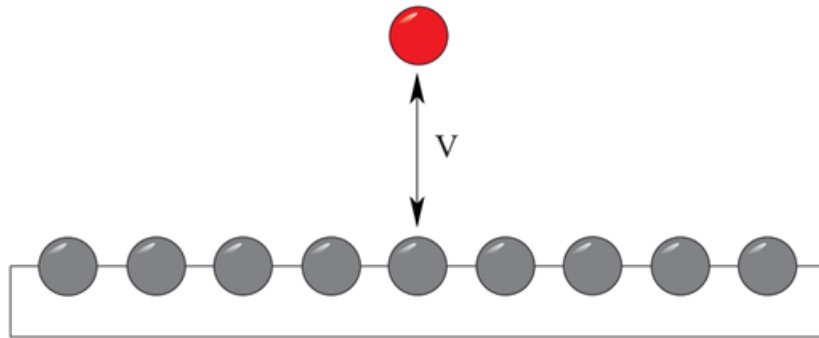


Figura 2.1: Representação do modelo proposto por Anderson de uma impureza adsorvida em um metal hospedeiro. A intensidade de hibridização é dada pelo parâmetro V entre a impureza (esfera vermelha) e a banda de condução.

2.1 Modelo de Anderson de uma impureza

Neste modelo, o metal é representado por elétrons em uma banda com energias $\varepsilon_{\mathbf{k}}$ e números de onda $\mathbf{k}$, enquanto que a impureza é representada como um orbital extra

com duas orientações de *spins* $\sigma = \uparrow, \downarrow$ e energia ε_d . A transição entre os orbitais e a banda de condução é permitida por um termo de hibridização $V_{\mathbf{k},d}$. Além disso, Anderson introduziu uma repulsão de Coulomb entre dois elétrons de *spins* contrários para reduzir a probabilidade de dupla ocupação. Este termo é essencial para a formação de um momento magnético no orbital localizado, já que para ser “magnético” este orbital deve ser ocupado isoladamente, tendo apenas um elétron ocupado com um determinado *spin*. Agrupando todos os termos, temos que o Hamiltoniano de Anderson é

$$H_{SIAM} = \sum_{\mathbf{k}\sigma} \varepsilon_k c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma} + \sum_{\mathbf{k}\sigma} V_{\mathbf{k},d} \left(c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger d_\sigma + d_\sigma^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma} \right) + \sum_{\sigma} \varepsilon_d d_\sigma^\dagger d_\sigma + U d_\uparrow^\dagger d_\uparrow d_\downarrow^\dagger d_\downarrow, \quad (2.1)$$

onde $c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger (c_{\mathbf{k}\sigma})$ cria (destrói) elétrons de condução com memento $\mathbf{k}$ e *spin* σ , $d_\sigma^\dagger (d_\sigma)$ cria (destrói) elétrons localizados na impureza com *spin* σ . No modelo, $\varepsilon_d = -\frac{U}{2}$ representa uma simetria de partícula-buraco e é conhecida como Anderson simétrico. Tal simetria pode ser visualizada na Fig. 2.2, em que uma impureza acoplada em um hospedeiro, são gerados dois picos iguais e conhecidos como picos de Hubbard na Ldos em função da energia.

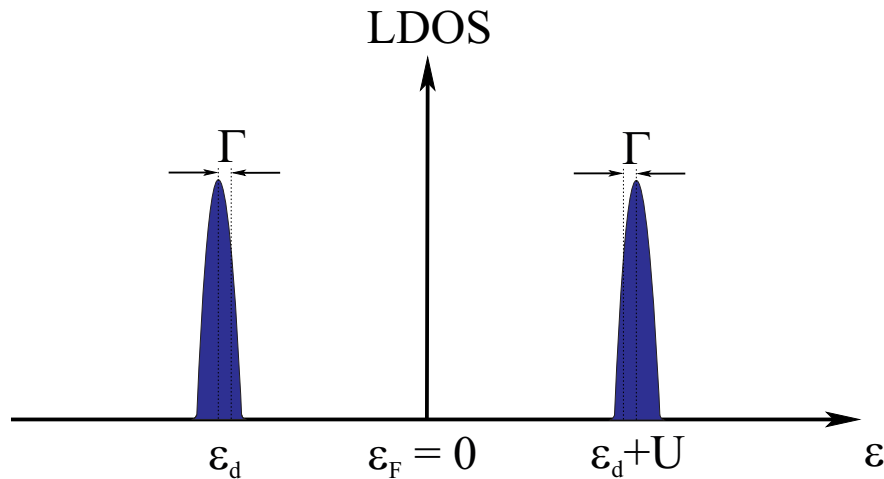


Figura 2.2: Figura esquemática da densidade de estados para o modelo de Anderson de uma impureza acoplada em um metal.

Em que Γ é o parâmetro de Anderson, responsável pela semi-largura dos picos de Hubbard. De acordo com a regra de ouro de Fermi [21], o valor de Γ é inversamente proporcional ao tempo de vida do elétron, como podemos ver na seguinte equação

$$\tau = \frac{\hbar}{2\pi |V|^2 \rho_0} = \frac{\hbar}{2\Gamma}, \quad (2.2)$$

em que τ é o tempo de vida do elétron num dado nível energético, V é o termo de hibridização e ρ_0 é a densidade de estados do hospedeiro.

Capítulo 3

FORMALISMO DAS FUNÇÕES DE GREEN

Agora que explicamos o Hamiltoniano e o modelo de Anderson, podemos ter uma ideia do que se trata nosso sistema. O propósito desta dissertação é descrever a dispersão eletrônica devido a interação impureza-hospedeiro com a quebra de simetria de reversão temporal. Para realizar estes estudos, é preciso determinar a densidade de estados local ou, densidade espectral do sistema (ρ_{LDOS}), que é definida pela parte imaginária da função de Green retardada.

$$\rho_{LDOS}(\mathbf{R}) = -\frac{1}{\pi} \text{Im} \left[\sum_{\chi} \tilde{\mathcal{G}}_{\chi}^R(\varepsilon, \mathbf{R}) \right]. \quad (3.1)$$

3.1 Funções de Green

As funções de Green são funções de correlação, das quais é possível extrair informação sobre o sistema em estudo, tais como densidade de estados. As funções de Green tem um grande papel neste trabalho, pois ela representa um formalismo muito adequado para sistemas com interações entre partículas, capaz de trabalhar com problemas de muitos corpos na mecânica quântica. Para descrever a dispersão de elétrons em nosso sistema, utilizaremos as funções de Green retardada e avançada [21]

$$\mathcal{G}^R(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t') = -i\theta(t - t') \langle [\psi(\mathbf{r}, t), \psi^{\dagger}(\mathbf{r}', t')]_{+} \rangle, \quad (3.2)$$

$$\mathcal{G}^A(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t') = i\theta(t' - t) \langle [\psi(\mathbf{r}, t), \psi^\dagger(\mathbf{r}', t')]_+ \rangle, \quad (3.3)$$

onde $\theta(t - t')$ é uma função degrau, $[\dots]_+$ é a relação de anticomutação e $\langle \dots \rangle$ representa uma média térmica. Tal média térmica é expressa por:

$$\langle [\psi(\mathbf{r}, t), \psi^\dagger(\mathbf{r}', t')]_+ \rangle = \frac{1}{Z} T_r \left\{ e^{-\beta H} [\psi(\mathbf{r}, t), \psi^\dagger(\mathbf{r}', t')]_+ \right\}, \quad (3.4)$$

em que $Z = T_r \{e^{-\beta H}\}$ é a função de partição, T_r representa o traço, $\beta = \frac{1}{k_B T}$ e H é o Hamiltoniano do sistema. Definindo um estado $|n\rangle$ que é um auto estado do Hamiltoniano ($H|n\rangle = E|n\rangle$) temos a expressão final das funções de Green retardada e avançada

$$\mathcal{G}^R(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t') = -i\theta(t - t') \sum_n \frac{1}{Z} e^{-\beta E_n} \langle n | [\psi(\mathbf{r}, t), \psi^\dagger(\mathbf{r}', t')]_+ | n \rangle, \quad (3.5)$$

$$\mathcal{G}^A(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t') = i\theta(t' - t) \sum_n \frac{1}{Z} e^{-\beta E_n} \langle n | [\psi(\mathbf{r}, t), \psi^\dagger(\mathbf{r}', t')]_+ | n \rangle, \quad (3.6)$$

que satisfazem a seguinte relação

$$\mathcal{G}^R(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t') = [\mathcal{G}^A(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t')]^\dagger. \quad (3.7)$$

Pode-se notar que a diferença entre a função de Green retardada e a avançada, é que a primeira é modulada pela função degrau $\theta(t - t')$ em que $t < t'$, $\mathcal{G}^R(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t') = 0$, enquanto a segunda, para $t > t'$, $\mathcal{G}^A(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t') = 0$. As funções de Green são definidas no domínio do tempo, porém, de acordo com a Eq. (3.1), a LDOS é proporcional a parte imaginária de uma função de Green no domínio das energias. Portanto, é preciso realizar uma transformada de Fourier do domínio do tempo para o domínio das energias, que pode ser realizada pelo método da equação do movimento (EOM: equation of motion).

3.2 Equação do movimento

Para explicar o método da equação do movimento, vamos utilizar uma definição simples de função de Green retardada na representação de Heisenberg

$$\mathcal{G}_{AB}^R(t,0) = -\frac{i}{\hbar}\theta(t-0) \langle [\hat{A}(t), \hat{B}^\dagger(0)]_+ \rangle, \quad (3.8)$$

onde $\hat{A}$ e $\hat{B}$ são operadores fermiônicos e a dependência espacial foi omitida e $t' = 0$. Realizando a transformada de Fourier para o espaço das energias, a função de Green pode ser reescrita por

$$-\frac{i}{\hbar}(\varepsilon + i\eta) \tilde{\mathcal{G}}_{AB}^R(\varepsilon) = \int_{-\infty}^{\infty} dt \frac{\partial}{\partial t} \left\{ -\frac{i}{\hbar}\theta(t-0) \langle [\hat{A}(t), \hat{B}^\dagger(0)]_+ \rangle \right\} e^{\frac{i}{\hbar}(\varepsilon + i\eta)t}, \quad (3.9)$$

sendo que

$$\tilde{\mathcal{G}}_{AB}^R(\varepsilon) = \int_{-\infty}^{\infty} dt \mathcal{G}_{AB}^R(t,0) e^{\frac{i}{\hbar}(\varepsilon + i\eta)t} \quad (3.10)$$

e

$$-\frac{i}{\hbar}(\varepsilon + i\eta) \tilde{\mathcal{G}}_{AB}^R(\varepsilon) = \int_{-\infty}^{\infty} dt \frac{\partial}{\partial t} \mathcal{G}_{AB}^R(t,0) e^{\frac{i}{\hbar}(\varepsilon + i\eta)t} \quad (3.11)$$

e $\eta \rightarrow 0^+$ um infinitesimal positivo para que a expressão convirja nos limites. Realizando a derivada temporal, temos

$$\begin{aligned} -\frac{i}{\hbar}(\varepsilon + i\eta) \tilde{\mathcal{G}}_{AB}^R(\varepsilon) &= -\frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} dt \frac{\partial}{\partial t} \theta(t-0) \left\{ \langle [\hat{A}(t), \hat{B}^\dagger(0)]_+ \rangle \right\} e^{\frac{i}{\hbar}(\varepsilon + i\eta)t} \\ &+ \left(-\frac{i}{\hbar} \right) \int_{-\infty}^{\infty} dt \left\{ \theta(t-0) \left\langle \left[\frac{\partial}{\partial t} \hat{A}(t), \hat{B}^\dagger(0) \right]_+ \right\rangle \right\} e^{\frac{i}{\hbar}(\varepsilon + i\eta)t} \end{aligned} \quad (3.12)$$

a derivada temporal da função degrau resulta em uma delta de Dirac $\delta(t-0)$. Enquanto a derivada temporal do operador de aniquilação, pela equação de Heisenberg, é definido

por $\frac{\partial \hat{A}(t)}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar} [\hat{A}, H]$. Portanto

$$\begin{aligned} -\frac{i}{\hbar} (\varepsilon + i\eta) \tilde{\mathcal{G}}_{\mathcal{AB}}^R(\varepsilon) &= -\frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} dt \delta(t-0) \left\{ \langle [\hat{A}(t), \hat{B}^\dagger(0)]_+ \rangle \right\} e^{\frac{i}{\hbar}(\varepsilon+i\eta)t} \\ &+ \left(-\frac{i}{\hbar} \right) \int_{-\infty}^{\infty} dt \left\{ \theta(t-0) \langle \left[-\frac{i}{\hbar} [\hat{A}, H], \hat{B}^\dagger(0) \right]_+ \rangle \right\} e^{\frac{i}{\hbar}(\varepsilon+i\eta)t}, \end{aligned} \quad (3.13)$$

resolvendo a integral do primeiro termo, obtemos que

$$\begin{aligned} (\varepsilon + i\eta) \tilde{\mathcal{G}}_{\mathcal{AB}}^R(\varepsilon) &= \langle [\hat{A}(0), \hat{B}^\dagger(0)]_+ \rangle \\ &+ \int_{-\infty}^{\infty} dt \left\{ -\frac{i}{\hbar} \theta(t-0) \langle [[\hat{A}, H], \hat{B}^\dagger(0)]_+ \rangle \right\} e^{\frac{i}{\hbar}(\varepsilon+i\eta)t} \\ &= \langle [\hat{A}(0), \hat{B}^\dagger(0)]_+ \rangle \\ &+ \int_{-\infty}^{\infty} dt \mathcal{G}_{[\hat{A}, H]\mathcal{B}}^R(t) e^{\frac{i}{\hbar}(\varepsilon+i\eta)t}, \end{aligned} \quad (3.14)$$

pela definição da equação Eq. (3.8) e Eq. (3.10), temos que o segundo termo é uma nova função de Green $\tilde{\mathcal{G}}_{[\hat{A}, H]\mathcal{B}}^R(\varepsilon)$. Portanto

$$(\varepsilon + i\eta) \tilde{\mathcal{G}}_{\mathcal{AB}}^R(\varepsilon) = \langle [\hat{A}, \hat{B}^\dagger]_+ \rangle + \tilde{\mathcal{G}}_{[\hat{A}, H]\mathcal{B}}^R(\varepsilon) \quad (3.15)$$

A ideia básica deste método é gerar uma série de equações diferenciais acopladas, diferenciando as funções de Green. Como apresentado, o cálculo de $\tilde{\mathcal{G}}_{\mathcal{AB}}^R$ gerou uma nova função $\tilde{\mathcal{G}}_{[H, \hat{A}]\mathcal{B}}^R$. O cálculo terminaria apenas quando um conjunto de n equações e n funções de Green é obtido. Porém, existem casos que essa séries de equações geradas é infinita, portanto, é necessário invocar argumentos físicos para truncar o conjunto de equações de uma maneira razoável, como por exemplo, a aproximação Hubbard I.

3.3 Aproximação Hubbard I

Considerando um sistema interagente em que dois elétrons de *spins* opostos não podem ocupar o mesmo estado e, sendo assim, repellido para um estado $\varepsilon = \varepsilon_d + U$ devido a uma repulsão de Coulomb, pode-se verificar a presença de funções de Green de alta ordem, por exemplo $\tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\sigma}n_{jd\bar{\sigma}}d_{l\sigma}}$ do modelo de Anderson. Após a aplicação do método da EOM na mesma, obtemos a seguinte equação:

$$\begin{aligned}
 (\varepsilon - \varepsilon_{j\sigma} - U_j + i\eta) \tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\sigma}n_{jd\bar{\sigma}}d_{l\sigma}}(\varepsilon) &= 1 - \sum_{\mathbf{k}} V_{j\mathbf{k}} \tilde{\mathcal{G}}_{c_{\mathbf{k}\bar{\sigma}}^\dagger d_{j\bar{\sigma}} d_{j\sigma} d_{l\sigma}}(\varepsilon) \\
 &+ \sum_{\mathbf{k}} V_{j\mathbf{k}} \tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\bar{\sigma}}^\dagger c_{\mathbf{k}\bar{\sigma}} d_{j\sigma} d_{l\sigma}}(\varepsilon) + \sum_{\mathbf{k}} V_{j\mathbf{k}} \tilde{\mathcal{G}}_{c_{\mathbf{k}\sigma} d_{j\bar{\sigma}}^\dagger d_{j\sigma} d_{l\sigma}}(\varepsilon)
 \end{aligned} \tag{3.16}$$

O cálculo da função de Green de alta ordem deu origem a outras funções de Green de alta ordem. Realizando o cálculo das novas funções de Green, outras funções de Green novas e assim, sucessivamente. Devido a essa infinidade de equações, é necessário a aplicação de um método de aproximação para solucionar o conjunto de funções de Green. No caso deste trabalho, utilizamos o método de aproximação de Hubbard I [22], realizando um truncamento destas funções de Green por meio de campo médio, que pode ser resumido pela seguinte equação:

$$\tilde{\mathcal{G}}_{ABCD} = \langle \mathcal{AB} \rangle \tilde{\mathcal{G}}_{CD} \tag{3.17}$$

com $\langle \mathcal{AB} \rangle = \langle \mathcal{B}^\dagger \mathcal{A}^\dagger \rangle$. Em certas condições de temperatura, é possível o surgimento do efeito Kondo para $T \ll T_K$, em que T é a temperatura do sistema e T_K a temperatura Kondo. O efeito Kondo, dentro desta condição conhecida como regime Kondo, ocorre quando há um acoplamento do tipo antiferromagnético entre os *spin* localizados na impureza e os elétrons de condução do hospedeiro. Portanto, os elétrons de condução formam uma nuvem com o intuito de blindar o momento magnético localizado na impureza. Consequentemente, observa-se na densidade de estado um pico centrado no nível de Fermi,

denominado pico de Kondo. Para o caso deste trabalho, não há problema em utilizar a condição em que a temperatura é $T \ll T_K$ devido ao *pseudogap* na banda de energia do semimetal localizada no nível de Fermi em $\varepsilon_F = 0$, pois não há estados e não é consideramos impurezas magnéticas. Entretanto, é possível estudar o efeito Kondo em um caso de quebra de simetria de inversão e simetria de reversão temporal preservada, pois o nível de Fermi apresenta um nível com estados finito.

Aplicando o método descrito pela Eq. (3.17) na Eq. (3.16), temos que:

$$V_{j\mathbf{k}} \tilde{\mathcal{G}}_{c_{\mathbf{k}\bar{\sigma}}^\dagger d_{j\bar{\sigma}} d_{j\sigma} d_{l\sigma}}(\varepsilon) = \langle V_{j\mathbf{k}}^* c_{\mathbf{k}\bar{\sigma}}^\dagger d_{j\bar{\sigma}} \rangle \tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\sigma} d_{l\sigma}}(\varepsilon), \quad (3.18)$$

e

$$V_{j\mathbf{k}} \tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\bar{\sigma}}^\dagger c_{\mathbf{k}\bar{\sigma}} d_{j\sigma} d_{l\sigma}}(\varepsilon) = \langle V_{j\mathbf{k}} d_{j\bar{\sigma}}^\dagger c_{\mathbf{k}\bar{\sigma}} \rangle \tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\sigma} d_{l\sigma}}(\varepsilon), \quad (3.19)$$

resultando Eq. (3.16) em:

$$(\varepsilon - \varepsilon_{j\sigma} - U_j + i\eta) \tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\sigma} n_{jd\bar{\sigma}} d_{l\sigma}}(\varepsilon) = 1 + \sum_{\mathbf{k}} V_{j\mathbf{k}} \tilde{\mathcal{G}}_{c_{\mathbf{k}\sigma} d_{j\bar{\sigma}}^\dagger d_{j\bar{\sigma}} d_{l\sigma}}(\varepsilon). \quad (3.20)$$

Em seguida, é preciso calcular $\tilde{\mathcal{G}}_{c_{\mathbf{p}\sigma} d_{j\bar{\sigma}}^\dagger d_{j\bar{\sigma}} d_{l\sigma}}(\varepsilon)$. Neste trabalho, temos uma situação semelhante que esta detalhado no próximo capítulo.

Capítulo 4

MODELO TEÓRICO

Neste trabalho, consideramos um semimetal de Weyl 3D com um par de impurezas enterradas e separadas por uma distância $\mathbf{R}_{12}$ (Fig. 4.1). O WSM estudado se encontra em um regime de simetria de reversão temporal quebrada sem aplicação de campo externo, sendo possível observar em um semimetal de Weyl (TaAs) [24]. A motivação de estudarmos a interação entre duas impurezas afastadas e enterradas em um WSM, é devido as propriedades relativística que o semimetal apresenta. Em casos que as impurezas não estão em um meio relativístico que o WSM, ou DSM, proporciona, a uma grande distância não há interação entre elas. E para investigar esta interação, realizamos simulações de STM em locais pontuais extraindo densidades de estados calculando funções de Green.

Neste capítulo será apresentado o Hamiltoniano do sistema, os cálculos das funções de Green via método da equação de movimento e o cálculo das funções de Green das impurezas, onde utilizamos a aproximação Hubbard I.

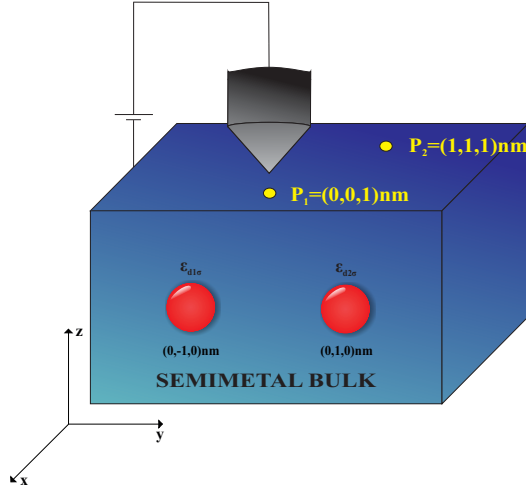


Figura 4.1: Representação do sistema proposto: duas impurezas com níveis de energia em $\epsilon_{d1\sigma}$ e $\epsilon_{d2\sigma}$, enterradas em um 3D-WSM, na posição $\mathbf{R}_1 = (0, -1, 0)\text{nm}$ e $\mathbf{R}_2 = (0, 1, 0)\text{nm}$ respectivamente. P_1 e P_2 no topo do hospedeiro, representam sítios no qual a Ldos são examinadas por um STM-tip.

4.1 Hamiltoniano do Sistema

O Hamiltoniano efetivo que descreve os elétrons livres em um semimetal de Weyl

$$H_0 = \sum_{\mathbf{k}\chi} \psi_{\chi}^{\dagger}(\mathbf{k}) h_{\chi}(\mathbf{k}) \psi_{\chi}(\mathbf{k}). \quad (4.1)$$

O Hamiltoniano que descreve um par de nós de Weyl de quiralidade oposta

$$h_{\chi}(\mathbf{k}) = \chi [\hbar v_F \boldsymbol{\sigma} \cdot (\mathbf{k} - \chi \mathbf{Q}) + \sigma_0 Q_0], \quad (4.2)$$

onde $\chi = \pm 1$ refere-se à quiralidade dos nós de Weyl, v_F é a velocidade de Fermi, $\boldsymbol{\sigma} = \{\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z\}$ são as matrizes de Pauli, $\mathbf{k}$ é o vetor de onda, $\mathbf{Q}$ é o potencial vetor e Q_0 é responsável pela mudança na energia dos cones. Os termos

$$\psi_\chi(\mathbf{k}) = \begin{pmatrix} c_{\mathbf{k}\chi\uparrow} \\ c_{\mathbf{k}\chi\downarrow} \end{pmatrix} \quad \psi_\chi^\dagger(\mathbf{k}) = \begin{pmatrix} c_{\mathbf{k}\chi\uparrow}^\dagger & c_{\mathbf{k}\chi\downarrow}^\dagger \end{pmatrix} \quad (4.3)$$

são *spinores* com operadores fermiônicos de criação e destruição de elétrons em estados quânticos rotulados pelo vetor de onda $\mathbf{k}$, *spin* σ e quiralidade χ . As matrizes de Pauli são

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (4.4)$$

Para realizar cálculos futuros, realizamos uma troca de variável, onde

$$\mathbf{p} = (\mathbf{k} - \chi \mathbf{Q}) \quad (4.5)$$

$$\mathbf{a} = (\mathbf{q} - \chi \mathbf{Q}) \quad (4.6)$$

Assim, o nosso Hamiltoniano pode ser expresso como

$$h_\chi(\mathbf{p}) = \chi [\hbar v_F \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p} + \sigma_0 Q_0]. \quad (4.7)$$

Aplicando os operadores de campo no Hamiltoniano, temos

$$\begin{aligned} H_0 = \sum_{\mathbf{p}\chi} \chi \Big\{ & (v_F p_z + Q_0) c_{\mathbf{p}\chi\uparrow}^\dagger c_{\mathbf{p}\chi\uparrow} + v_F p_- c_{\mathbf{p}\chi\uparrow}^\dagger c_{\mathbf{p}\chi\downarrow} \\ & + v_F p_+ c_{\mathbf{p}\chi\downarrow}^\dagger c_{\mathbf{p}\chi\uparrow} + (-v_F p_z + Q_0) c_{\mathbf{p}\chi\downarrow}^\dagger c_{\mathbf{p}\chi\downarrow} \Big\}, \end{aligned} \quad (4.8)$$

por simplicidade, vamos assumir $\hbar = 1$ e $p_\pm = (p_x \pm ip_y)$ com $p_+ p_- = p_x^2 + p_y^2$.

Adicionando o termo que descreve as impurezas $j = 1, 2$ (modelo de Anderson)

$$H_{imp} = \sum_{j\sigma} \varepsilon_{j\sigma} d_{j\sigma}^\dagger d_{j\sigma} + \sum_j U_j d_{j\uparrow}^\dagger d_{j\uparrow} d_{j\downarrow}^\dagger d_{j\downarrow} \quad (4.9)$$

e o termo de hibridização

$$H_{hyb} = \sum_{j\mathbf{p}\sigma\chi} V_{j\mathbf{p}} (d_{j\sigma}^\dagger c_{\mathbf{p}\chi\sigma} + \text{H.c.}), \quad (4.10)$$

no qual $V_{j\mathbf{p}} = \frac{v_0}{\sqrt{N}} e^{i(\mathbf{p}+\chi\mathbf{Q})\cdot\mathbf{R}_j}$. Sendo assim, temos um novo Hamiltoniano

$$\begin{aligned} H &= H_0 + H_{imp} + H_{hyb} \\ &= \sum_{\mathbf{p}\chi} \chi \left\{ (v_F p_z + Q_0) c_{\mathbf{p}\chi\uparrow}^\dagger c_{\mathbf{p}\chi\uparrow} + v_F p_- c_{\mathbf{p}\chi\uparrow}^\dagger c_{\mathbf{p}\chi\downarrow} \right. \\ &\quad \left. + v_F p_+ c_{\mathbf{p}\chi\downarrow}^\dagger c_{\mathbf{p}\chi\uparrow} + (-v_F p_z + Q_0) c_{\mathbf{p}\chi\downarrow}^\dagger c_{\mathbf{p}\chi\downarrow} \right\} \\ &\quad + \sum_{j\sigma} \varepsilon_{j\sigma} d_{j\sigma}^\dagger d_{j\sigma} + \sum_{j\mathbf{p}\sigma\chi} V_{j\mathbf{p}} (d_{j\sigma}^\dagger c_{\mathbf{p}\chi\sigma} + \text{H.c.}) + \sum_j U_j d_{j\uparrow}^\dagger d_{j\uparrow} d_{j\downarrow}^\dagger d_{j\downarrow} \end{aligned} \quad (4.11)$$

Nosso primeiro interesse é calcular a densidade local de estados (LDOS) por quiralidade

$$\rho_{LDOS}(\varepsilon) = -\frac{1}{\pi} \text{Im} \left[\tilde{\mathcal{G}}(\varepsilon) \right] \quad (4.12)$$

no qual, por hora, omitimos a dependência em $\mathbf{R}_m$, e

$$\mathcal{G}(t) = -\frac{i}{\hbar} \theta(t) Z^{-1} \sum_n e^{-\beta E_n} \left\langle n \left| [\psi(\mathbf{R}_m, t), \psi^\dagger(\mathbf{R}_m, 0)]_+ \right| n \right\rangle \quad (4.13)$$

onde

$$\psi(\mathbf{R}_m, t) = \frac{1}{\sqrt{\mathcal{N}}} \sum_{\mathbf{p}\chi} e^{-i\mathbf{p}\cdot\mathbf{R}_m} \begin{pmatrix} c_{\mathbf{p}\chi\uparrow}(t) \\ c_{\mathbf{p}\chi\downarrow}(t) \end{pmatrix} \quad (4.14)$$

e

$$\psi^\dagger(\mathbf{R}_m, t) = \frac{1}{\sqrt{\mathcal{N}}} \sum_{\mathbf{a}\chi} e^{i\mathbf{a}\cdot\mathbf{R}_m} \begin{pmatrix} c_{\mathbf{a}\chi'\uparrow}^\dagger(t) & c_{\mathbf{a}\chi'\downarrow}^\dagger(t) \end{pmatrix} \quad (4.15)$$

representa o operador de campo fermiônico. Portanto, podemos escrever nossa função de Green como

$$\mathcal{G}(t) = \frac{1}{\mathcal{N}} \sum_{\mathbf{p}\mathbf{a}} \sum_{\chi\chi'} e^{-i(\mathbf{p}-\mathbf{a})\cdot\mathbf{R}_m} \begin{pmatrix} \mathcal{G}_{c_{\mathbf{p}\chi\uparrow}c_{\mathbf{a}\chi'\uparrow}}(t) & \mathcal{G}_{c_{\mathbf{p}\chi\uparrow}c_{\mathbf{a}\chi'\downarrow}}(t) \\ \mathcal{G}_{c_{\mathbf{p}\chi\downarrow}c_{\mathbf{a}\chi'\uparrow}}(t) & \mathcal{G}_{c_{\mathbf{p}\chi\downarrow}c_{\mathbf{a}\chi'\downarrow}}(t) \end{pmatrix}. \quad (4.16)$$

Porém, queremos uma função de Green dependente da energia, portanto

$$\mathcal{G}(\varepsilon) = \frac{1}{\mathcal{N}} \sum_{\mathbf{p}\mathbf{a}} \sum_{\chi\chi'} e^{-i(\mathbf{p}-\mathbf{a})\cdot\mathbf{R}_m} \begin{pmatrix} \mathcal{G}_{c_{\mathbf{p}\chi\uparrow}c_{\mathbf{a}\chi'\uparrow}}(\varepsilon) & \mathcal{G}_{c_{\mathbf{p}\chi\uparrow}c_{\mathbf{a}\chi'\downarrow}}(\varepsilon) \\ \mathcal{G}_{c_{\mathbf{p}\chi\downarrow}c_{\mathbf{a}\chi'\uparrow}}(\varepsilon) & \mathcal{G}_{c_{\mathbf{p}\chi\downarrow}c_{\mathbf{a}\chi'\downarrow}}(\varepsilon) \end{pmatrix}. \quad (4.17)$$

4.2 Densidade local de estados

Para encontrar a LDOS, é preciso calcular a função de Green

$$\mathcal{G}_{c_{\mathbf{p}\chi\sigma}c_{\mathbf{a}\chi'\sigma'}}(t) = -\frac{i}{\hbar} \theta(t) Z^{-1} \sum_n e^{-\beta E_n} \left\langle n \left| \left[c_{\mathbf{p}\chi\sigma}(t), c_{\mathbf{a}\chi'\sigma'}^\dagger(0) \right]_+ \right| n \right\rangle. \quad (4.18)$$

Para calcular esta função de Green, é preciso evocar o método da equação de movimento (EOM), apresentada na seção 3.2. Sendo assim, temos

$$\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial t} \mathcal{G}_{c_{\mathbf{p}\chi\sigma} c_{\mathbf{a}\chi'\sigma'}}(t) &= -\frac{i}{\hbar} \delta(t) Z^{-1} \sum_n e^{-\beta E_n} \left\langle n \left| \left[c_{\mathbf{p}\chi\sigma}(t), c_{\mathbf{a}\chi'\sigma'}^\dagger(0) \right]_+ \right| n \right\rangle \\
&+ \left(-\frac{i}{\hbar} \right) v_F \chi (p_+ \delta_{\sigma\downarrow} + (p_z + Q_0) \delta_{\sigma\uparrow}) \mathcal{G}_{c_{\mathbf{p}\chi\uparrow} c_{\mathbf{a}\chi'\sigma'}}(t) \\
&+ \left(-\frac{i}{\hbar} \right) v_F \chi (p_- \delta_{\sigma\uparrow} + (-p_z + Q_0) \delta_{\sigma\downarrow}) \mathcal{G}_{c_{\mathbf{p}\chi\downarrow} c_{\mathbf{a}\chi'\sigma'}}(t) \\
&+ \left(-\frac{i}{\hbar} \right) \sum_j V_{j\mathbf{p}} \mathcal{G}_{d_{j\sigma} c_{\mathbf{a}\chi'\sigma'}}(t). \tag{4.19}
\end{aligned}$$

Realizando a transformada de Fourier, temos

$$\begin{aligned}
(\varepsilon + i\eta) \tilde{\mathcal{G}}_{c_{\mathbf{p}\chi\sigma} c_{\mathbf{a}\chi'\sigma'}}(\varepsilon) &= \delta_{\mathbf{p}\mathbf{a}} \delta_{\chi\chi'} \delta_{\sigma\sigma'} + v_F \chi (v_F p_+ \delta_{\sigma\downarrow} + (v_F p_z + Q_0) \delta_{\sigma\uparrow}) \tilde{\mathcal{G}}_{c_{\mathbf{p}\chi\uparrow} c_{\mathbf{a}\chi'\sigma'}}(\varepsilon) \\
&+ \chi (v_F p_- \delta_{\sigma\uparrow} + (-v_F p_z + Q_0) \delta_{\sigma\downarrow}) \tilde{\mathcal{G}}_{c_{\mathbf{p}\chi\downarrow} c_{\mathbf{a}\chi'\sigma'}}(\varepsilon) \\
&+ \sum_j V_{j\mathbf{p}} \tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\sigma} c_{\mathbf{a}\chi'\sigma'}}(\varepsilon). \tag{4.20}
\end{aligned}$$

Utilizando a Eq. (4.20), podemos escrever quatro funções de Green para $\sigma = \uparrow, \downarrow$ e $\sigma' = \uparrow, \downarrow$

$$\begin{aligned}
\tilde{\mathcal{G}}_{c_{\mathbf{p}\chi\uparrow} c_{\mathbf{a}\chi'\uparrow}}(\varepsilon) &= \frac{\delta_{\mathbf{p}\mathbf{a}} \delta_{\chi\chi'}}{\tilde{\varepsilon}_\chi - v_F \chi p_z} + \frac{v_F \chi p_-}{\tilde{\varepsilon}_\chi - v_F \chi p_z} \tilde{\mathcal{G}}_{c_{\mathbf{p}\chi\downarrow} c_{\mathbf{a}\chi'\uparrow}}(\varepsilon) \\
&+ \sum_j \frac{V_{j\mathbf{p}}}{\tilde{\varepsilon}_\chi - v_F \chi p_z} \tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\uparrow} c_{\mathbf{a}\chi'\uparrow}}(\varepsilon) \tag{4.21}
\end{aligned}$$

$$\tilde{\mathcal{G}}_{c_{\mathbf{p}\chi\downarrow} c_{\mathbf{a}\chi'\uparrow}}(\varepsilon) = \frac{v_F \chi p_+}{\tilde{\varepsilon}_\chi + v_F \chi p_z} \tilde{\mathcal{G}}_{c_{\mathbf{p}\chi\uparrow} c_{\mathbf{a}\chi'\uparrow}}(\varepsilon) + \sum_j \frac{V_{j\mathbf{p}}}{\tilde{\varepsilon}_\chi + v_F \chi p_z} \tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\downarrow} c_{\mathbf{a}\chi'\uparrow}}(\varepsilon) \tag{4.22}$$

$$\begin{aligned}
\tilde{\mathcal{G}}_{c_{\mathbf{p}\chi\downarrow}c_{\mathbf{a}\chi'\downarrow}}(\varepsilon) &= \frac{\delta_{\mathbf{p}\mathbf{a}}\delta_{\chi\chi'}}{\tilde{\varepsilon}_{\chi} + v_F\chi p_z} + \frac{v_F\chi p_+}{\tilde{\varepsilon}_{\chi} + v_F\chi p_z}\tilde{\mathcal{G}}_{c_{\mathbf{p}\chi\uparrow}c_{\mathbf{a}\chi'\downarrow}}(\varepsilon) \\
&+ \sum_j \frac{V_{j\mathbf{p}}}{\tilde{\varepsilon}_{\chi} + v_F\chi p_z}\tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\downarrow}c_{\mathbf{a}\chi'\downarrow}}(\varepsilon)
\end{aligned} \tag{4.23}$$

$$\tilde{\mathcal{G}}_{c_{\mathbf{p}\chi\uparrow}c_{\mathbf{a}\chi'\downarrow}}(\varepsilon) = \frac{v_F\chi p_-}{\tilde{\varepsilon}_{\chi} - v_F\chi p_z}\tilde{\mathcal{G}}_{c_{\mathbf{p}\chi\downarrow}c_{\mathbf{a}\chi'\downarrow}}(\varepsilon) + \sum_j \frac{V_{j\mathbf{p}}}{\tilde{\varepsilon}_{\chi} - v_F\chi p_z}\tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\uparrow}c_{\mathbf{a}\chi'\downarrow}}(\varepsilon), \tag{4.24}$$

onde nós consideramos $\tilde{\varepsilon}_{\chi} = \varepsilon + i\eta - \chi Q_0$. Combinando as Eq. (4.21), Eq. (4.22), Eq. (4.23) e Eq. (4.24), temos

$$\begin{aligned}
\tilde{\mathcal{G}}_{c_{\mathbf{p}\chi\uparrow}c_{\mathbf{a}\chi'\uparrow}}(\varepsilon) &= \frac{\delta_{\mathbf{p}\mathbf{a}}\delta_{\chi\chi'}(\tilde{\varepsilon}_{\chi} + v_F\chi p_z)}{\tilde{\varepsilon}_{\chi}^2 - (v_F p)^2} + \sum_j \frac{V_{j\mathbf{p}}(\tilde{\varepsilon}_{\chi} + v_F\chi p_z)}{\tilde{\varepsilon}_{\chi}^2 - (v_F p)^2}\tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\uparrow}c_{\mathbf{a}\chi'\uparrow}}(\varepsilon) \\
&+ \frac{v_F\chi p_- \sum_j V_{j\mathbf{p}}}{\tilde{\varepsilon}_{\chi}^2 - (v_F p)^2}\tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\downarrow}c_{\mathbf{a}\chi'\uparrow}}(\varepsilon)
\end{aligned} \tag{4.25}$$

$$\begin{aligned}
\tilde{\mathcal{G}}_{c_{\mathbf{p}\chi\downarrow}c_{\mathbf{a}\chi'\downarrow}}(\varepsilon) &= \frac{\delta_{\mathbf{p}\mathbf{a}}\delta_{\chi\chi'}(\tilde{\varepsilon}_{\chi} - v_F\chi p_z)}{\tilde{\varepsilon}_{\chi}^2 - (v_F p)^2} + \sum_j \frac{V_{j\mathbf{p}}(\tilde{\varepsilon}_{\chi} - v_F\chi p_z)}{\tilde{\varepsilon}_{\chi}^2 - (v_F p)^2}\tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\downarrow}c_{\mathbf{a}\chi'\downarrow}}(\varepsilon) \\
&+ \frac{v_F\chi p_+ \sum_j V_{j\mathbf{p}}}{\tilde{\varepsilon}_{\chi}^2 - (v_F p)^2}\tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\uparrow}c_{\mathbf{a}\chi'\downarrow}}(\varepsilon)
\end{aligned} \tag{4.26}$$

Agora, precisamos calcular $\tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\sigma}c_{\mathbf{a}\chi'\sigma'}}(\varepsilon)$. Para este caso, utilizaremos a função de Green avançada

$$\mathcal{F}_{d_{j\sigma}c_{\mathbf{a}\chi'\sigma'}}(t) = \frac{i}{\hbar}\theta(-t)Z^{-1}\sum_n e^{-\beta E_n} \langle n | \left[d_{j\sigma}^{\dagger}(0), c_{\mathbf{a}\chi'\sigma'}(t) \right]_+ | n \rangle, \tag{4.27}$$

aplicando a EOM e a transformada de Fourier, temos que

$$\begin{aligned}
(\varepsilon - i\eta) \tilde{\mathcal{F}}_{d_{j\sigma}c_{\mathbf{a}\chi'\sigma'}}(\varepsilon) &= \chi' (v_F a_+ \delta_{\sigma'\downarrow} + (v_F a_z + Q_0) \delta_{\sigma'\uparrow}) \tilde{\mathcal{F}}_{d_{j\sigma}c_{\mathbf{a}\chi'\uparrow}}(\varepsilon) \\
&+ \chi' (v_F a_- \delta_{\sigma'\uparrow} + (-v_F a_z + Q_0) \delta_{\sigma'\downarrow}) \tilde{\mathcal{F}}_{d_{j\sigma}c_{\mathbf{a}\chi'\downarrow}}(\varepsilon) \\
&+ \sum_l V_{l\mathbf{a}} \tilde{\mathcal{F}}_{d_{j\sigma}d_{l\sigma'}}(\varepsilon).
\end{aligned} \tag{4.28}$$

Aplicando a propriedade $\tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\sigma}c_{\mathbf{a}\chi'\sigma'}}(\varepsilon) = \left[\tilde{\mathcal{F}}_{d_{j\sigma}c_{\mathbf{a}\chi'\sigma'}}(\varepsilon) \right]^\dagger$, temos a função de Green retardada

$$\begin{aligned}
(\varepsilon + i\eta) \tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\sigma}c_{\mathbf{a}\chi'\sigma'}}(\varepsilon) &= \chi' (v_F a_- \delta_{\sigma'\downarrow} + (v_F a_z + Q_0) \delta_{\sigma'\uparrow}) \tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\sigma}c_{\mathbf{a}\chi'\uparrow}}(\varepsilon) \\
&+ \chi' (v_F a_+ \delta_{\sigma'\uparrow} + (-v_F a_z + Q_0) \delta_{\sigma'\downarrow}) \tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\sigma}c_{\mathbf{a}\chi'\downarrow}}(\varepsilon) \\
&+ \sum_l V_{l\mathbf{a}}^* \tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\sigma}d_{l\sigma'}}(\varepsilon).
\end{aligned} \tag{4.29}$$

Para $\sigma' = \uparrow, \downarrow$, temos

$$\tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\sigma}c_{\mathbf{a}\chi'\uparrow}}(\varepsilon) = \frac{v_F \chi' a_+}{\tilde{\varepsilon}_{\chi'} - v_F \chi' a_z} \tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\sigma}c_{\mathbf{a}\chi'\downarrow}}(\varepsilon) + \sum_l \frac{V_{l\mathbf{a}}^*}{\tilde{\varepsilon}_{\chi'} - v_F \chi' a_z} \tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\sigma}d_{l\uparrow}}(\varepsilon) \tag{4.30}$$

$$\tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\sigma}c_{\mathbf{a}\chi'\downarrow}}(\varepsilon) = \frac{v_F \chi' a_-}{\tilde{\varepsilon}_{\chi'} + v_F \chi' a_z} \tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\sigma}c_{\mathbf{a}\chi'\uparrow}}(\varepsilon) + \sum_l \frac{V_{l\mathbf{a}}^*}{\tilde{\varepsilon}_{\chi'} + v_F \chi' a_z} \tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\sigma}d_{l\downarrow}}(\varepsilon) \tag{4.31}$$

Combinando as Eq. (4.30) e Eq. (4.31), temos

$$\tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\sigma}c_{\mathbf{a}\chi'\uparrow}}(\varepsilon) = \sum_l \frac{(\tilde{\varepsilon}_{\chi'} + v_F \chi' a_z) V_{l\mathbf{a}}^*}{\tilde{\varepsilon}_{\chi'}^2 - (v_F a)^2} \tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\sigma}d_{l\uparrow}}(\varepsilon) + \frac{\sum_l v_F \chi' a_+ V_{l\mathbf{a}}^*}{\tilde{\varepsilon}_{\chi'}^2 - (v_F a)^2} \tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\sigma}d_{l\downarrow}}(\varepsilon) \tag{4.32}$$

$$\tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\sigma}c_{\mathbf{a}\chi'\downarrow}}(\varepsilon) = \sum_l \frac{(\tilde{\varepsilon}_{\chi'} - v_F\chi'a_z)V_{l\mathbf{a}}^*}{\tilde{\varepsilon}_{\chi'}^2 - (v_Fa)^2} \tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\sigma}d_{l\downarrow}}(\varepsilon) + \frac{\sum_l v_F\chi'a_- V_{l\mathbf{a}}^*}{\tilde{\varepsilon}_{\chi'}^2 - (v_Fa)^2} \tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\sigma}d_{l\uparrow}}(\varepsilon) \quad (4.33)$$

Substituindo $\sigma = \uparrow, \downarrow$, obtemos quatro funções de Green

$$\tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\uparrow}c_{\mathbf{a}\chi'\uparrow}}(\varepsilon) = \sum_l \frac{(\tilde{\varepsilon}_{\chi'} + v_F\chi'a_z)V_{l\mathbf{a}}^*}{\tilde{\varepsilon}_{\chi'}^2 - (v_Fa)^2} \tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\uparrow}d_{l\uparrow}}(\varepsilon) + \frac{\sum_l v_F\chi'a_+ V_{l\mathbf{a}}^*}{\tilde{\varepsilon}_{\chi'}^2 - (v_Fa)^2} \tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\uparrow}d_{l\downarrow}}(\varepsilon) \quad (4.34)$$

$$\tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\downarrow}c_{\mathbf{a}\chi'\uparrow}}(\varepsilon) = \sum_l \frac{(\tilde{\varepsilon}_{\chi'} + v_F\chi'a_z)V_{l\mathbf{a}}^*}{\tilde{\varepsilon}_{\chi'}^2 - (v_Fa)^2} \tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\downarrow}d_{l\uparrow}}(\varepsilon) + \frac{\sum_l v_F\chi'a_+ V_{l\mathbf{a}}^*}{\tilde{\varepsilon}_{\chi'}^2 - (v_Fa)^2} \tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\downarrow}d_{l\downarrow}}(\varepsilon) \quad (4.35)$$

$$\tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\uparrow}c_{\mathbf{a}\chi'\downarrow}}(\varepsilon) = \sum_l \frac{(\tilde{\varepsilon}_{\chi'} - v_F\chi'a_z)V_{l\mathbf{a}}^*}{\tilde{\varepsilon}_{\chi'}^2 - (v_Fa)^2} \tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\uparrow}d_{l\downarrow}}(\varepsilon) + \frac{\sum_l v_F\chi'a_- V_{l\mathbf{a}}^*}{\tilde{\varepsilon}_{\chi'}^2 - (v_Fa)^2} \tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\uparrow}d_{l\uparrow}}(\varepsilon) \quad (4.36)$$

$$\tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\downarrow}c_{\mathbf{a}\chi'\downarrow}}(\varepsilon) = \sum_l \frac{(\tilde{\varepsilon}_{\chi'} - v_F\chi'a_z)V_{l\mathbf{a}}^*}{\tilde{\varepsilon}_{\chi'}^2 - (v_Fa)^2} \tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\downarrow}d_{l\downarrow}}(\varepsilon) + \frac{\sum_l v_F\chi'a_- V_{l\mathbf{a}}^*}{\tilde{\varepsilon}_{\chi'}^2 - (v_Fa)^2} \tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\downarrow}d_{l\uparrow}}(\varepsilon) \quad (4.37)$$

Agora, vamos que calcular a função de Green $\mathcal{G}_{c_{\mathbf{p}\chi\sigma}d_{l\sigma'}}(t)$, utilizando a função de Green retardada

$$\mathcal{G}_{c_{\mathbf{p}\chi\sigma}d_{l\sigma'}}(t) = -\frac{i}{\hbar}\theta(t) Z^{-1} \sum_n e^{-\beta E_n} \left\langle n \left| \left[c_{\mathbf{p}\chi\sigma}(t), d_{l\sigma'}^\dagger(0) \right]_+ \right| n \right\rangle. \quad (4.38)$$

aplicando a EOM e a transformada de Fourier, temos

$$\begin{aligned}
(\varepsilon + i\eta) \tilde{\mathcal{G}}_{c_{\mathbf{p}\chi\sigma}d_{l\sigma'}}(\varepsilon) &= \chi(v_F p_+ \delta_{\sigma\downarrow} + (v_F p_z + Q_0) \delta_{\sigma\uparrow}) \tilde{\mathcal{G}}_{c_{\mathbf{p}\chi\uparrow}d_{l\sigma'}}(\varepsilon) \\
&+ \chi(v_F p_- \delta_{\sigma\uparrow} + (-v_F p_z + Q_0) \delta_{\sigma\downarrow}) \tilde{\mathcal{G}}_{c_{\mathbf{p}\chi\downarrow}d_{l\sigma'}}(\varepsilon) \\
&+ \sum_j V_{j\mathbf{p}} \tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\sigma}d_{l\sigma'}}(\varepsilon), \tag{4.39}
\end{aligned}$$

substituindo $\sigma = \uparrow, \downarrow$, temos

$$\tilde{\mathcal{G}}_{c_{\mathbf{p}\chi\uparrow}d_{l\sigma'}}(\varepsilon) = \frac{v_F \chi p_-}{\tilde{\varepsilon}_\chi - v_F \chi p_z} \tilde{\mathcal{G}}_{c_{\mathbf{p}\chi\downarrow}d_{l\sigma'}}(\varepsilon) + \sum_j \frac{V_{j\mathbf{p}}}{\tilde{\varepsilon}_\chi - v_F \chi p_z} \tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\uparrow}d_{l\sigma'}}(\varepsilon), \tag{4.40}$$

$$\tilde{\mathcal{G}}_{c_{\mathbf{p}\chi\downarrow}d_{l\sigma'}}(\varepsilon) = \frac{v_F \chi p_+}{\tilde{\varepsilon}_\chi + v_F \chi p_z} \tilde{\mathcal{G}}_{c_{\mathbf{p}\chi\uparrow}d_{l\sigma'}}(\varepsilon) + \sum_j \frac{V_{j\mathbf{p}}}{\tilde{\varepsilon}_\chi + v_F \chi p_z} \tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\downarrow}d_{l\sigma'}}(\varepsilon). \tag{4.41}$$

Combinando as Eq. (4.40) e Eq. (4.41), temos

$$\tilde{\mathcal{G}}_{c_{\mathbf{p}\chi\uparrow}d_{l\sigma'}}(\varepsilon) = \sum_j \frac{(\tilde{\varepsilon}_\chi + v_F \chi p_z) V_{j\mathbf{p}}}{\tilde{\varepsilon}_\chi^2 - (v_F p)^2} \tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\uparrow}d_{l\sigma'}}(\varepsilon) + \frac{\sum_j v_F \chi p_- V_{j\mathbf{p}}}{\tilde{\varepsilon}_\chi^2 - (v_F p)^2} \tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\downarrow}d_{l\sigma'}}(\varepsilon) \tag{4.42}$$

$$\tilde{\mathcal{G}}_{c_{\mathbf{p}\chi\downarrow}d_{l\sigma'}}(\varepsilon) = \sum_j \frac{(\tilde{\varepsilon}_\chi - v_F \chi p_z) V_{j\mathbf{p}}}{\tilde{\varepsilon}_\chi^2 - (v_F p)^2} \tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\downarrow}d_{l\sigma'}}(\varepsilon) + \frac{\sum_j v_F \chi p_+ V_{j\mathbf{p}}}{\tilde{\varepsilon}_\chi^2 - (v_F p)^2} \tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\uparrow}d_{l\sigma'}}(\varepsilon). \tag{4.43}$$

Substituindo $\sigma' = \uparrow, \downarrow$, ganhamos quatro novas funções de Green

$$\tilde{\mathcal{G}}_{c_{\mathbf{p}\chi\uparrow}d_{l\uparrow}}(\varepsilon) = \sum_j \frac{(\tilde{\varepsilon}_\chi + v_F \chi p_z) V_{j\mathbf{p}}}{\tilde{\varepsilon}_\chi^2 - (v_F p)^2} \tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\uparrow}d_{l\uparrow}}(\varepsilon) + \frac{\sum_j v_F \chi p_- V_{j\mathbf{p}}}{\tilde{\varepsilon}_\chi^2 - (v_F p)^2} \tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\downarrow}d_{l\uparrow}}(\varepsilon) \tag{4.44}$$

$$\tilde{\mathcal{G}}_{c_{\mathbf{p}\chi\uparrow}d_{l\downarrow}}(\varepsilon) = \sum_j \frac{(\tilde{\varepsilon}_\chi + v_F \chi p_z) V_{j\mathbf{p}}}{\tilde{\varepsilon}_\chi^2 - (v_F p)^2} \tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\uparrow}d_{l\downarrow}}(\varepsilon) + \frac{\sum_j v_F \chi p_- V_{j\mathbf{p}}}{\tilde{\varepsilon}_\chi^2 - (v_F p)^2} \tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\downarrow}d_{l\downarrow}}(\varepsilon) \tag{4.45}$$

$$\tilde{\mathcal{G}}_{c_{\mathbf{p}\chi\downarrow}d_{l\uparrow}}(\varepsilon) = \sum_j \frac{(\tilde{\varepsilon}_\chi - v_F\chi p_z) V_{j\mathbf{p}}}{\tilde{\varepsilon}_\chi^2 - (v_F p)^2} \tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\downarrow}d_{l\uparrow}}(\varepsilon) + \frac{\sum_j v_F\chi p_+ V_{j\mathbf{p}}}{\tilde{\varepsilon}_\chi^2 - (v_F p)^2} \tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\uparrow}d_{l\uparrow}}(\varepsilon) \quad (4.46)$$

$$\tilde{\mathcal{G}}_{c_{\mathbf{p}\chi\downarrow}d_{l\downarrow}}(\varepsilon) = \sum_j \frac{(\tilde{\varepsilon}_\chi - v_F\chi p_z) V_{j\mathbf{p}}}{\tilde{\varepsilon}_\chi^2 - (v_F p)^2} \tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\downarrow}d_{l\downarrow}}(\varepsilon) + \frac{\sum_j v_F\chi p_+ V_{j\mathbf{p}}}{\tilde{\varepsilon}_\chi^2 - (v_F p)^2} \tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\uparrow}d_{l\downarrow}}(\varepsilon). \quad (4.47)$$

Porém, utilizaremos apenas os termos diagonais. Com isso, podemos considerar que para $\sigma = \sigma'$, temos

$$\tilde{\mathcal{G}}_{c_{\mathbf{p}\chi\sigma}d_{l\sigma}}(\varepsilon) = \sum_j \frac{(\tilde{\varepsilon}_\chi + \sigma v_F\chi p_z) V_{j\mathbf{p}}}{\tilde{\varepsilon}_\chi^2 - (v_F p)^2} \tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\sigma}d_{l\sigma}}(\varepsilon) + \frac{\sum_j v_F\chi p_\sigma V_{j\mathbf{p}}}{\tilde{\varepsilon}_\chi^2 - (v_F p)^2} \tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\bar{\sigma}}d_{l\sigma}}(\varepsilon), \quad (4.48)$$

onde o termo $\sigma = 1, -1$ para *spin* $\sigma = \uparrow, \downarrow$.

Retomando para as Eq. (4.25) e Eq. (4.26) e combinando com as Eq. (4.34), Eq. (4.35), Eq. (4.36) e Eq. (4.37) calculadas anteriormente, obtemos

$$\begin{aligned} \tilde{\mathcal{G}}_{c_{\mathbf{p}\chi\uparrow}c_{\mathbf{a}\chi'\uparrow}}(\varepsilon) &= \frac{\delta_{\mathbf{p}\mathbf{a}}\delta_{\chi\chi'}(\tilde{\varepsilon}_\chi + v_F\chi p_z)}{\tilde{\varepsilon}_\chi^2 - (v_F p)^2} \\ &+ \sum_{jl} \left[\frac{V_{j\mathbf{p}}(\tilde{\varepsilon}_\chi + v_F\chi p_z)}{\tilde{\varepsilon}_\chi^2 - (v_F p)^2} \right] \left[\frac{(\tilde{\varepsilon}_{\chi'} + v_F\chi' a_z) V_{l\mathbf{a}}^*}{\tilde{\varepsilon}_{\chi'}^2 - (v_F a)^2} \right] \tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\uparrow}d_{l\uparrow}}(\varepsilon) \\ &+ \sum_{jl} \left[\frac{V_{j\mathbf{p}}(\tilde{\varepsilon}_\chi + v_F\chi p_z)}{\tilde{\varepsilon}_\chi^2 - (v_F p)^2} \right] \left[\frac{v_F\chi' a_+ V_{l\mathbf{a}}^*}{\tilde{\varepsilon}_{\chi'}^2 - (v_F a)^2} \right] \tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\uparrow}d_{l\downarrow}}(\varepsilon) \\ &+ \sum_{jl} \left[\frac{V_{j\mathbf{p}}v_F\chi p_-}{\tilde{\varepsilon}_\chi^2 - (v_F p)^2} \right] \left[\frac{(\tilde{\varepsilon}_{\chi'} + v_F\chi' a_z) V_{l\mathbf{a}}^*}{\tilde{\varepsilon}_{\chi'}^2 - (v_F a)^2} \right] \tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\downarrow}d_{l\uparrow}}(\varepsilon) \\ &+ \sum_{jl} \left[\frac{V_{j\mathbf{p}}v_F\chi p_-}{\tilde{\varepsilon}_\chi^2 - (v_F p)^2} \right] \left[\frac{v_F\chi' a_+ V_{l\mathbf{a}}^*}{\tilde{\varepsilon}_{\chi'}^2 - (v_F a)^2} \right] \tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\downarrow}d_{l\downarrow}}(\varepsilon) \end{aligned} \quad (4.49)$$

$$\begin{aligned}
\tilde{\mathcal{G}}_{c_{\mathbf{p}\chi\downarrow}c_{\mathbf{a}\chi'\downarrow}}(\varepsilon) &= \frac{\delta_{\mathbf{p}\mathbf{a}}\delta_{\chi\chi'}(\tilde{\varepsilon}_\chi - v_F\chi p_z)}{\tilde{\varepsilon}_\chi^2 - (v_F p)^2} \\
&+ \sum_{jl} \left[\frac{V_{j\mathbf{p}}(\tilde{\varepsilon}_\chi - v_F\chi p_z)}{\tilde{\varepsilon}_\chi^2 - (v_F p)^2} \right] \left[\frac{(\tilde{\varepsilon}_{\chi'} - v_F\chi' a_z) V_{l\mathbf{a}}^*}{\tilde{\varepsilon}_{\chi'}^2 - (v_F a)^2} \right] \tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\downarrow}d_{l\downarrow}}(\varepsilon) \\
&+ \sum_{jl} \left[\frac{V_{j\mathbf{p}}(\tilde{\varepsilon}_\chi - v_F\chi p_z)}{\tilde{\varepsilon}_\chi^2 - (v_F p)^2} \right] \left[\frac{v_F\chi' a_- V_{l\mathbf{a}}^*}{\tilde{\varepsilon}_{\chi'}^2 - (v_F a)^2} \right] \tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\downarrow}d_{l\uparrow}}(\varepsilon) \\
&+ \sum_{jl} \left[\frac{V_{j\mathbf{p}}v_F\chi p_+}{\tilde{\varepsilon}_\chi^2 - (v_F p)^2} \right] \left[\frac{(\tilde{\varepsilon}_{\chi'} - v_F\chi' a_z) V_{l\mathbf{a}}^*}{\tilde{\varepsilon}_{\chi'}^2 - (v_F a)^2} \right] \tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\uparrow}d_{l\downarrow}}(\varepsilon) \\
&+ \sum_{jl} \left[\frac{V_{j\mathbf{p}}v_F\chi p_+}{\tilde{\varepsilon}_\chi^2 - (v_F p)^2} \right] \left[\frac{v_F\chi' a_- V_{l\mathbf{a}}^*}{\tilde{\varepsilon}_{\chi'}^2 - (v_F a)^2} \right] \tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\uparrow}d_{l\uparrow}}(\varepsilon). \tag{4.50}
\end{aligned}$$

Retomando para a Eq. (4.17), temos

$$\begin{aligned}
\mathcal{G}(\varepsilon) &= \frac{1}{\mathcal{N}} \sum_{\mathbf{p}\chi} 2 \frac{\tilde{\varepsilon}_\chi}{\tilde{\varepsilon}_\chi^2 - (v_F p)^2} \\
&+ \frac{1}{v_0^2} \sum_{\chi\chi'} \sum_{jl} \left[\Sigma_{p_{\sigma z}}^\chi(\mathbf{R}_{mj}) \tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\uparrow}d_{l\uparrow}}(\varepsilon) \Sigma_{a_{\sigma z}}^{\chi'}(\mathbf{R}_{lm}) \right] \\
&+ \frac{1}{v_0^2} \sum_{\chi\chi'} \sum_{jl} \left[\Sigma_{p_\sigma}^\chi(\mathbf{R}_{mj}) \tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\uparrow}d_{l\uparrow}}(\varepsilon) \Sigma_{a_{\bar{\sigma}}}^{\chi'}(\mathbf{R}_{lm}) \right] \\
&+ \frac{1}{v_0^2} \sum_{\chi\chi'} \sum_{jl} \left[\Sigma_{p_{\sigma z}}^\chi(\mathbf{R}_{mj}) \tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\uparrow}d_{l\downarrow}}(\varepsilon) \Sigma_{a_\sigma}^{\chi'}(\mathbf{R}_{lm}) \right] \\
&+ \frac{1}{v_0^2} \sum_{\chi\chi'} \sum_{jl} \left[\Sigma_{p_\sigma}^\chi(\mathbf{R}_{mj}) \tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\uparrow}d_{l\downarrow}}(\varepsilon) \Sigma_{a_{\bar{\sigma}z}}^{\chi'}(\mathbf{R}_{lm}) \right] \\
&+ \frac{1}{v_0^2} \sum_{\chi\chi'} \sum_{jl} \left[\Sigma_{p_\sigma}^\chi(\mathbf{R}_{mj}) \tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\downarrow}d_{l\uparrow}}(\varepsilon) \Sigma_{a_{\bar{\sigma}z}}^{\chi'}(\mathbf{R}_{lm}) \right] \\
&+ \frac{1}{v_0^2} \sum_{\chi\chi'} \sum_{jl} \left[\Sigma_{p_{\sigma z}}^\chi(\mathbf{R}_{mj}) \tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\downarrow}d_{l\uparrow}}(\varepsilon) \Sigma_{a_\sigma}^{\chi'}(\mathbf{R}_{lm}) \right] \\
&+ \frac{1}{v_0^2} \sum_{\chi\chi'} \sum_{jl} \left[\Sigma_{p_\sigma}^\chi(\mathbf{R}_{mj}) \tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\downarrow}d_{l\downarrow}}(\varepsilon) \Sigma_{a_{\bar{\sigma}}}^{\chi'}(\mathbf{R}_{lm}) \right] \\
&+ \frac{1}{v_0^2} \sum_{\chi\chi'} \sum_{jl} \left[\Sigma_{p_{\sigma z}}^\chi(\mathbf{R}_{mj}) \tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\downarrow}d_{l\downarrow}}(\varepsilon) \Sigma_{a_{\sigma z}}^{\chi'}(\mathbf{R}_{lm}) \right] \tag{4.51}
\end{aligned}$$

em que $\Sigma_{p_{\sigma z}}^\chi, \Sigma_{p_\sigma}^\chi, \Sigma_{a_{\sigma z}}^{\chi'}$ e $\Sigma_{a_\sigma}^{\chi'}$ são auto-energias definidas como

$$\Sigma_{p_{\sigma z}}^{\chi} = \frac{v_0^2}{\mathcal{N}} \sum_{\mathbf{p}} \frac{\tilde{\varepsilon}_{\chi} + \sigma v_F \chi p_z}{\tilde{\varepsilon}_{\chi}^2 - (v_F p)^2} e^{-i\mathbf{p} \cdot (\mathbf{R}_m - \mathbf{R}_j)} e^{-i\chi \mathbf{Q} \cdot (\mathbf{R}_m - \mathbf{R}_j)} \quad (4.52)$$

$$\Sigma_{p_{\sigma}}^{\chi} = \frac{v_0^2}{\mathcal{N}} \sum_{\mathbf{p}} \frac{v_F \chi (p_x + \sigma i p_y)}{\tilde{\varepsilon}_{\chi}^2 - (v_F p)^2} e^{-i\mathbf{p} \cdot (\mathbf{R}_m - \mathbf{R}_j)} e^{-i\chi \mathbf{Q} \cdot (\mathbf{R}_m - \mathbf{R}_j)} \quad (4.53)$$

$$\Sigma_{a_{\sigma z}}^{\chi'} = \frac{v_0^2}{\mathcal{N}} \sum_{\mathbf{a}} \frac{\tilde{\varepsilon}_{\chi} + \sigma v_F \chi' a_z}{\tilde{\varepsilon}_{\chi}^2 - (v_F a)^2} e^{-i\mathbf{a} \cdot (\mathbf{R}_l - \mathbf{R}_m)} e^{-i\chi \mathbf{Q} \cdot (\mathbf{R}_l - \mathbf{R}_m)} \quad (4.54)$$

$$\Sigma_{a_{\sigma}}^{\chi'} = \frac{v_0^2}{\mathcal{N}} \sum_{\mathbf{a}} \frac{v_F \chi' (a_x + \sigma i a_y)}{\tilde{\varepsilon}_{\chi}^2 - (v_F a)^2} e^{-i\mathbf{a} \cdot (\mathbf{R}_l - \mathbf{R}_m)} e^{-i\chi \mathbf{Q} \cdot (\mathbf{R}_l - \mathbf{R}_m)} \quad (4.55)$$

Substituindo a Eq. (4.51) em Eq. (4.12), temos

$$\begin{aligned} \rho_{LDOS}(\varepsilon) &= \rho_0 \\ &- \frac{1}{\pi v_0^2} \sum_{\chi\chi'} \sum_{jl} \text{Im} \left[\Sigma_{p_{\sigma z}}^{\chi}(\mathbf{R}_{mj}) \tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\uparrow}d_{l\uparrow}}(\varepsilon) \Sigma_{a_{\sigma z}}^{\chi'}(\mathbf{R}_{lm}) \right] \\ &- \frac{1}{\pi v_0^2} \sum_{\chi\chi'} \sum_{jl} \text{Im} \left[\Sigma_{p_{\sigma}}^{\chi}(\mathbf{R}_{mj}) \tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\uparrow}d_{l\uparrow}}(\varepsilon) \Sigma_{a_{\bar{\sigma}}}^{\chi'}(\mathbf{R}_{lm}) \right] \\ &- \frac{1}{\pi v_0^2} \sum_{\chi\chi'} \sum_{jl} \text{Im} \left[\Sigma_{p_{\sigma z}}^{\chi}(\mathbf{R}_{mj}) \tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\uparrow}d_{l\downarrow}}(\varepsilon) \Sigma_{a_{\sigma}}^{\chi'}(\mathbf{R}_{lm}) \right] \\ &- \frac{1}{\pi v_0^2} \sum_{\chi\chi'} \sum_{jl} \text{Im} \left[\Sigma_{p_{\sigma}}^{\chi}(\mathbf{R}_{mj}) \tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\uparrow}d_{l\downarrow}}(\varepsilon) \Sigma_{a_{\bar{\sigma}z}}^{\chi'}(\mathbf{R}_{lm}) \right] \\ &- \frac{1}{\pi v_0^2} \sum_{\chi\chi'} \sum_{jl} \text{Im} \left[\Sigma_{p_{\sigma}}^{\chi}(\mathbf{R}_{mj}) \tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\downarrow}d_{l\uparrow}}(\varepsilon) \Sigma_{a_{\bar{\sigma}z}}^{\chi'}(\mathbf{R}_{lm}) \right] \\ &- \frac{1}{\pi v_0^2} \sum_{\chi\chi'} \sum_{jl} \text{Im} \left[\Sigma_{p_{\sigma z}}^{\chi}(\mathbf{R}_{mj}) \tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\downarrow}d_{l\uparrow}}(\varepsilon) \Sigma_{a_{\sigma}}^{\chi'}(\mathbf{R}_{lm}) \right] \\ &- \frac{1}{\pi v_0^2} \sum_{\chi\chi'} \sum_{jl} \text{Im} \left[\Sigma_{p_{\sigma}}^{\chi}(\mathbf{R}_{mj}) \tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\downarrow}d_{l\downarrow}}(\varepsilon) \Sigma_{a_{\bar{\sigma}}}^{\chi'}(\mathbf{R}_{lm}) \right] \\ &- \frac{1}{\pi v_0^2} \sum_{\chi\chi'} \sum_{jl} \text{Im} \left[\Sigma_{p_{\sigma z}}^{\chi}(\mathbf{R}_{mj}) \tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\downarrow}d_{l\downarrow}}(\varepsilon) \Sigma_{a_{\sigma z}}^{\chi'}(\mathbf{R}_{lm}) \right] \end{aligned} \quad (4.56)$$

em que

$$\rho_0 = \sum_{\chi} \text{Im} \left[\frac{2}{\pi \mathcal{N}} \sum_{\mathbf{p}} \frac{(\varepsilon_{\chi} + i\eta)}{(\varepsilon_{\chi} + i\eta)^2 - (v_F^2 p^2)} \right] \quad (4.57)$$

é a densidade de estados do 3D-WSM. Como resultado dos cálculos da Eq. (4.57), temos

$$\rho_0(\varepsilon) = \frac{3}{D^3} \varepsilon_{\chi}^2 \quad (4.58)$$

tendo uma diferença no termo da energia $\varepsilon_{\chi} = \varepsilon - \chi Q_0$. Quando $Q_0 = 0$, a densidade de estados retoma a expressão do Dirac 3D.

4.3 Funções de Green das impurezas

Agora é necessário calcular as funções de Green das impurezas. Por definição, tal função de Green é definida por

$$\mathcal{G}_{d_{j\sigma}d_{l\sigma'}}(t) = -\frac{i}{\hbar} \theta(t) Z^{-1} \sum_n e^{-\beta E_n} \left\langle n \left| \left[d_{j\sigma}(t), d_{l\sigma'}^{\dagger}(0) \right]_+ \right| n \right\rangle, \quad (4.59)$$

aplicando a EOM e a transformada de Fourier, resulta em

$$\begin{aligned} (\varepsilon - \varepsilon_{j\sigma} - [\Sigma_{p\sigma z}^{\chi}(0) + \Sigma_{p\sigma z}^{\bar{\chi}}(0)] + i\eta) \tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\sigma}d_{l\sigma}}(\varepsilon) &= \delta_{jl} + U_j \tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\sigma}n_{jd\bar{\sigma}}d_{l\sigma}}(\varepsilon) \\ &+ [\Sigma_{p\sigma z}^{\chi}(\mathbf{R}_{j\bar{j}}) + \Sigma_{p\sigma z}^{\bar{\chi}}(\mathbf{R}_{j\bar{j}})] \tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\sigma}d_{l\sigma}}(\varepsilon). \end{aligned} \quad (4.60)$$

Agora, temos que calcular

$$\mathcal{G}_{d_{j\sigma}n_{jd\bar{\sigma}}d_{l\sigma}}(t) = -\frac{i}{\hbar}\theta(t)Z^{-1}\sum_n e^{-\beta E_n}\left\langle n\left|\left[d_{j\sigma}n_{jd\bar{\sigma}},d_{l\sigma}^\dagger(0)\right]_+\right|n\right\rangle. \quad (4.61)$$

Aplicando a EOM e a transformada de Fourier, temos

$$\begin{aligned} (\varepsilon - \varepsilon_{j\sigma} - U_j + i\eta)\tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\sigma}n_{jd\bar{\sigma}}d_{l\sigma}}(\varepsilon) &= \delta_{jl} \langle n_{jd\bar{\sigma}} \rangle - \sum_{\mathbf{p}\chi} V_{j\mathbf{p}} \tilde{\mathcal{G}}_{c_{\mathbf{p}\chi\bar{\sigma}}^\dagger d_{j\bar{\sigma}} d_{j\sigma} d_{l\sigma}}(\varepsilon) \\ &+ \sum_{\mathbf{p}\chi} V_{j\mathbf{p}} \tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\bar{\sigma}}^\dagger c_{\mathbf{p}\chi\bar{\sigma}} d_{j\sigma} d_{l\sigma}}(\varepsilon) + \sum_{\mathbf{p}\chi} V_{j\mathbf{p}} \tilde{\mathcal{G}}_{c_{\mathbf{p}\chi\sigma} d_{j\bar{\sigma}}^\dagger d_{j\bar{\sigma}} d_{l\sigma}}(\varepsilon). \end{aligned} \quad (4.62)$$

Nesta equação, utilizaremos a aproximação de Hubbard I apresentada na seção 3.3

$$\tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\bar{\sigma}}^\dagger c_{\mathbf{p}\chi\bar{\sigma}} d_{j\sigma} d_{l\sigma}}(\varepsilon) = \langle V_{j\mathbf{p}} d_{j\bar{\sigma}}^\dagger c_{\mathbf{p}\chi\bar{\sigma}} \rangle \tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\sigma} d_{l\sigma}}(\varepsilon) \quad (4.63)$$

$$\tilde{\mathcal{G}}_{c_{\mathbf{p}\chi\bar{\sigma}}^\dagger d_{j\bar{\sigma}} d_{j\sigma} d_{l\sigma}}(\varepsilon) = \langle V_{j\mathbf{p}}^* c_{\mathbf{p}\chi\bar{\sigma}}^\dagger d_{j\bar{\sigma}} \rangle \tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\sigma} d_{l\sigma}}(\varepsilon), \quad (4.64)$$

portanto,

$$(\varepsilon - \varepsilon_{j\sigma} - U_j + i\eta)\tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\sigma}n_{jd\bar{\sigma}}d_{l\sigma}}(\varepsilon) = \delta_{jl} \langle n_{jd\bar{\sigma}} \rangle + \sum_{\mathbf{p}\chi} V_{j\mathbf{p}} \tilde{\mathcal{G}}_{c_{\mathbf{p}\chi\sigma} d_{j\bar{\sigma}}^\dagger d_{j\bar{\sigma}} d_{l\sigma}}(\varepsilon). \quad (4.65)$$

Agora, vamos calcular

$$\mathcal{G}_{c_{\mathbf{p}\chi\sigma} d_{j\bar{\sigma}}^\dagger d_{j\bar{\sigma}} d_{l\sigma'}}(t) = \left(-\frac{i}{\hbar}\right)\theta(t)Z^{-1}\sum_n e^{-\beta E_n}\left\langle n\left|\left[c_{\mathbf{p}\chi\sigma} d_{j\bar{\sigma}}^\dagger d_{j\bar{\sigma}}, d_{l\sigma'}^\dagger(0)\right]_+\right|n\right\rangle \quad (4.66)$$

que, aplicando a EOM e a transformada de Fourier, resulta em

$$\begin{aligned}
\tilde{\mathcal{G}}_{c_{\mathbf{p}\chi\sigma}n_{jd\bar{\sigma}}d_{l\sigma}}(\varepsilon) &= \frac{V_{j\mathbf{p}}v_F\chi p_{\bar{\sigma}}}{\tilde{\varepsilon}_{\chi}^2 - (v_F p)^2} \tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\bar{\sigma}}n_{jd\bar{\sigma}}d_{l\sigma}}(\varepsilon) + \frac{V_{j\mathbf{p}}(\tilde{\varepsilon}_{\chi} + \sigma v_F\chi p_z)}{\tilde{\varepsilon}_{\chi}^2 - (v_F p)^2} \tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\sigma}n_{jd\bar{\sigma}}d_{l\sigma}}(\varepsilon) \\
&+ \frac{V_{j\mathbf{p}}v_F\chi p_{\bar{\sigma}}}{\tilde{\varepsilon}_{\chi}^2 - (v_F p)^2} \tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\bar{\sigma}}n_{jd\bar{\sigma}}d_{l\sigma}}(\varepsilon) + \frac{V_{j\mathbf{p}}(\tilde{\varepsilon}_{\chi} + \sigma v_F\chi p_z) \langle n_{jd\bar{\sigma}} \rangle}{\tilde{\varepsilon}_{\chi}^2 - (v_F p)^2} \tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\sigma}d_{l\sigma}}(\varepsilon).
\end{aligned} \tag{4.67}$$

Substituindo a Eq. (4.65) e Eq. (4.67) em Eq. (4.60) e, deixando em termos de $j = 1, 2$ e $l = 1, 2$, temos

$$\tilde{\mathcal{G}}_{d_{1\sigma}d_{1\sigma}}(\varepsilon) = \frac{\lambda_1^{\bar{\sigma}}}{\left(\varepsilon - \varepsilon_{1\sigma} - \tilde{\Sigma}_{p\sigma z}^{\chi}(0) - \lambda_1^{\bar{\sigma}} \lambda_2^{\bar{\sigma}} \frac{\tilde{\Sigma}_{p\sigma z}^{\chi}(\mathbf{R}_{12}) \tilde{\Sigma}_{d\sigma z}^{\chi}(\mathbf{R}_{21})}{(\varepsilon - \varepsilon_{2\sigma} - \tilde{\Sigma}_{p\sigma z}^{\chi}(0) + i\eta)} + i\eta \right)} \tag{4.68}$$

$$\tilde{\mathcal{G}}_{d_{2\sigma}d_{2\sigma}}(\varepsilon) = \frac{\lambda_2^{\bar{\sigma}}}{\left(\varepsilon - \varepsilon_{2\sigma} - \tilde{\Sigma}_{p\sigma z}^{\chi}(0) - \lambda_1^{\bar{\sigma}} \lambda_2^{\bar{\sigma}} \frac{\tilde{\Sigma}_{p\sigma z}^{\chi}(\mathbf{R}_{21}) \tilde{\Sigma}_{d\sigma z}^{\chi}(\mathbf{R}_{12})}{(\varepsilon - \varepsilon_{1\sigma} - \tilde{\Sigma}_{p\sigma z}^{\chi}(0) + i\eta)} + i\eta \right)} \tag{4.69}$$

$$\tilde{\mathcal{G}}_{d_{1\sigma}d_{2\sigma}}(\varepsilon) = \frac{\lambda_1^{\bar{\sigma}} \tilde{\Sigma}_{p\sigma z}^{\chi}(\mathbf{R}_{12})}{\left(\varepsilon - \varepsilon_{1\sigma} - \tilde{\Sigma}_{p\sigma z}^{\chi}(0) + i\eta \right)} \tilde{\mathcal{G}}_{d_{2\sigma}d_{2\sigma}}(\varepsilon) \tag{4.70}$$

$$\tilde{\mathcal{G}}_{d_{2\sigma}d_{1\sigma}}(\varepsilon) = \frac{\lambda_2^{\bar{\sigma}} \tilde{\Sigma}_{d\sigma z}^{\chi}(\mathbf{R}_{21})}{\left(\varepsilon - \varepsilon_{2\sigma} - \tilde{\Sigma}_{p\sigma z}^{\chi}(0) + i\eta \right)} \tilde{\mathcal{G}}_{d_{1\sigma}d_{1\sigma}}(\varepsilon) \tag{4.71}$$

onde

$$\tilde{\Sigma}_{p\sigma z}^{\chi}(0) = \Sigma_{p\sigma z}^{\chi}(0) + \Sigma_{p\sigma z}^{\bar{\chi}}(0) \tag{4.72}$$

$$\lambda_j^{\bar{\sigma}} = 1 + U_j \frac{\langle n_{jd\bar{\sigma}} \rangle}{(\varepsilon - \varepsilon_{j\sigma} - U_j - [\Sigma_{p\sigma z}^{\chi}(0) + \Sigma_{p\sigma z}^{\bar{\chi}}(0)] + i\eta)} \quad (4.73)$$

4.4 Auto-Energia

Agora, vamos realizar os cálculos das auto-energia não interagente que descrevem a forma com que as impurezas sentem o sistema em que estão adsorvidas. Temos duas situações para realizar o cálculo: $R \neq 0$ e $R = 0$.

4.4.1 Auto-Energia para $R \neq 0$

Primeiramente, vamos calcular $\Sigma_{p\sigma}^{\chi}$. Para calcular esta auto-energia, é preciso converter a somatória para coordenadas esféricas que pode ser escrita como

$$\sum_{\vec{p}} = \frac{\Omega}{(2\pi)^3} \int_0^\infty \int_0^\pi \int_0^{2\pi} p^2 \sin\theta dp d\theta d\phi \quad (4.74)$$

Sendo assim, temos que

$$\begin{aligned} \Sigma_{p\sigma}^{\chi} &= e^{-i\chi\mathbf{Q}\cdot\mathbf{R}_{mj}} \frac{v_0^2 v_F \chi \Omega}{\mathcal{N} (2\pi)^3} \int_0^\infty \int_0^\pi \int_0^{2\pi} p^2 \sin\theta dp d\theta d\phi \frac{(p_x + \sigma i p_y) e^{-ip\cdot\mathbf{R}_{mj}}}{\varepsilon_\chi^2 - (v_F p)^2} \\ &= e^{-i\chi\mathbf{Q}\cdot\mathbf{R}_{mj}} \frac{v_0^2 v_F \chi \Omega}{\mathcal{N} (2\pi)^3} \int_0^\infty \int_0^\pi p^2 \sin\theta dp d\theta \frac{p \sin\theta e^{-ip|\mathbf{R}_{mj}|\cos\theta}}{\varepsilon_\chi^2 - (v_F p)^2} \int_0^{2\pi} \cos\phi d\phi \\ &+ e^{-i\chi\mathbf{Q}\cdot\mathbf{R}_{mj}} \sigma i \frac{v_0^2 v_F \chi \Omega}{\mathcal{N} (2\pi)^3} \int_0^\infty \int_0^\pi p^2 \sin\theta dp d\theta \frac{p \sin\theta e^{-ip|\mathbf{R}_{mj}|\cos\theta}}{\varepsilon_\chi^2 - (v_F p)^2} \int_0^{2\pi} \sin\phi d\phi \\ &= e^{-i\chi\mathbf{Q}\cdot\mathbf{R}_{mj}} \frac{v_0^2 v_F \chi \Omega}{\mathcal{N} (2\pi)^3} \int_0^\infty \int_0^\pi p^2 \sin\theta dp d\theta \frac{p \sin\theta e^{-ip|\mathbf{R}_{mj}|\cos\theta}}{\varepsilon_\chi^2 - (v_F p)^2} [\sin\phi]_0^{2\pi} \\ &+ e^{-i\chi\mathbf{Q}\cdot\mathbf{R}_{mj}} \sigma i \frac{v_0^2 v_F \chi \Omega}{\mathcal{N} (2\pi)^3} \int_0^\infty \int_0^\pi p^2 \sin\theta dp d\theta \frac{p \sin\theta e^{-ip|\mathbf{R}_{mj}|\cos\theta}}{\varepsilon_\chi^2 - (v_F p)^2} [\cos\phi]_0^{2\pi} \\ &= 0 \end{aligned} \quad (4.75)$$

Este resultado é válido para $\Sigma_{a\sigma}^{\chi}$. Portanto, a Eq. (4.56) pode ser escrita como

$$\begin{aligned}
\rho_{LDOS}(\varepsilon) &= \sum_{\chi} \rho_0 \\
&+ \frac{1}{\pi v_0^2} \sum_{\chi\chi'} \sum_{jl} \left[\Sigma_{p\sigma z}^{\chi}(\mathbf{R}_{mj}) \tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\uparrow}d_{l\uparrow}}(\varepsilon) \Sigma_{a\sigma z}^{\chi'}(\mathbf{R}_{lm}) + \Sigma_{p\sigma z}^{\chi}(\mathbf{R}_{mj}) \tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\downarrow}d_{l\downarrow}}(\varepsilon) \Sigma_{a\sigma z}^{\chi'}(\mathbf{R}_{lm}) \right]
\end{aligned} \tag{4.76}$$

ou

$$\rho_{LDOS}(\varepsilon) = \rho_0 + \frac{1}{\pi v_0^2} \sum_{\chi\chi'} \sum_{jl} \sum_{\sigma} \left[\Sigma_{\sigma}^{\chi}(\mathbf{R}_{mj}) \tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\sigma}d_{l\sigma}}(\varepsilon) \Sigma_{\sigma}^{\chi'}(\mathbf{R}_{lm}) \right] \tag{4.77}$$

Agora, vamos calcular a auto energia Σ_{σ}^{χ}

$$\begin{aligned}
\Sigma_{\sigma}^{\chi} &= e^{-i\chi\mathbf{Q}\cdot\mathbf{R}_{mj}} \frac{v_0^2\Omega}{\mathcal{N}(2\pi)^3} \int_0^{\infty} \int_0^{\pi} \int_0^{2\pi} p^2 \sin\theta dp d\theta d\phi \frac{\varepsilon_{\chi} e^{-i\mathbf{p}\cdot\mathbf{R}_{mj}}}{\varepsilon_{\chi}^2 - (v_F p)^2} \\
&+ \sigma e^{-i\chi\mathbf{Q}\cdot\mathbf{R}_{mj}} \frac{v_0^2\Omega v_F \chi}{\mathcal{N}(2\pi)^3} \int_0^{\infty} \int_0^{\pi} \int_0^{2\pi} p^2 \sin\theta dp d\theta d\phi \frac{p_z e^{-i\mathbf{p}\cdot\mathbf{R}_{mj}}}{\tilde{\varepsilon}_{\chi}^2 - (v_F p)^2} \\
&= e^{\mp i\chi\mathbf{Q}\cdot\mathbf{R}_{mj}} \frac{v_0^2\Omega}{\mathcal{N}(2\pi)^3} \int_0^{\infty} \int_0^{\pi} \int_0^{2\pi} p^2 \sin\theta dp d\theta d\phi \frac{\varepsilon_{\chi} e^{\mp i p |\mathbf{R}_{mj}| \cos\theta}}{\varepsilon_{\chi}^2 - (v_F p)^2} \\
&+ \sigma e^{\mp i\chi\mathbf{Q}\cdot\mathbf{R}_{mj}} \frac{v_0^2\Omega v_F \chi}{\mathcal{N}(2\pi)^3} \int_0^{\infty} \int_0^{\pi} \int_0^{2\pi} p^3 \sin\theta \cos\theta dp d\theta d\phi \frac{e^{\mp i p |\mathbf{R}_{mj}| \cos\theta}}{\tilde{\varepsilon}_{\chi}^2 - (v_F p)^2}
\end{aligned} \tag{4.78}$$

em que $\mp$ representa o sinal para p e a , respectivamente. Calculando o primeiro termo da Eq. (4.78)

$$\begin{aligned}
I_1 &= e^{\mp i\chi\mathbf{Q}\cdot\mathbf{R}_{mj}} \frac{v_0^2\Omega}{\mathcal{N}(2\pi)^3} 2\pi \int_0^{\infty} \int_0^{\pi} p^2 \sin\theta dp d\theta \frac{\varepsilon_{\chi} e^{\mp i p |\mathbf{R}_{mj}| \cos\theta}}{\varepsilon_{\chi}^2 - (v_F p)^2} \\
&= e^{\mp i\chi\mathbf{Q}\cdot\mathbf{R}_{mj}} \frac{v_0^2\Omega}{\mathcal{N}(2\pi)^3} 2\pi \int_0^{\infty} p^2 dp \frac{\varepsilon_{\chi}}{\varepsilon_{\chi}^2 - (v_F p)^2} \int_0^{\pi} \sin\theta e^{\mp i p |\mathbf{R}_{mj}| \cos\theta} d\theta \\
&= e^{\mp i\chi\mathbf{Q}\cdot\mathbf{R}_{mj}} \frac{v_0^2\Omega}{\mathcal{N}(2\pi)^3} 2\pi \int_0^{\infty} p^2 dp \frac{\varepsilon_{\chi}}{\varepsilon_{\chi}^2 - (v_F p)^2} \int_0^{\pi} \sin\theta e^{\mp i p |\mathbf{R}_{mj}| \cos\theta} d\theta
\end{aligned} \tag{4.79}$$

pelo método de substituição de variável, vamos definir $u = \mp ip \mid \mathbf{R}_{mj} \mid \cos \theta$ e derivando com relação a θ , temos $du = \pm ip \mid \mathbf{R}_{mj} \mid \sin \theta d\theta$, a parte angular torna-se

$$\begin{aligned}
 \int_0^\pi d\theta \sin \theta e^{\mp ip \mid \mathbf{R}_{mj} \mid \cos \theta} &= \int \frac{1}{\pm ip \mid \mathbf{R}_{mj} \mid} e^a da \\
 &= \frac{1}{\pm ip \mid \mathbf{R}_{mj} \mid} \left[e^{\mp ip \mid \mathbf{R}_{mj} \mid \cos \theta} \right]_0^\pi \\
 &= \frac{1}{\pm ip \mid \mathbf{R}_{mj} \mid} (e^{\pm ip \mid \mathbf{R}_{mj} \mid} - e^{\mp ip \mid \mathbf{R}_{mj} \mid}) \quad (4.80)
 \end{aligned}$$

Sendo assim

$$\begin{aligned}
 I_1 &= e^{\mp i\chi \mathbf{Q} \cdot \mathbf{R}_{mj}} \frac{v_0^2 \Omega}{\mathcal{N} (2\pi)^2} \int_0^\infty p^2 dp \frac{\varepsilon_\chi}{\varepsilon_\chi^2 - (v_F p)^2} \left(\frac{1}{\pm ip \mid \mathbf{R}_{mj} \mid} e^{\pm ip \mid \mathbf{R}_{mj} \mid} - \frac{1}{\pm ip \mid \mathbf{R}_{mj} \mid} e^{\mp ip \mid \mathbf{R}_{mj} \mid} \right) \\
 &= \pm e^{\mp i\chi \mathbf{Q} \cdot \mathbf{R}_{mj}} \frac{v_0^2 \Omega}{\mathcal{N} i \mid \mathbf{R}_{mj} \mid (2\pi)^2} \int_0^\infty p dp \frac{\varepsilon_\chi}{\varepsilon_\chi^2 - (v_F p)^2} (e^{\pm ip \mid \mathbf{R}_{mj} \mid} - e^{\mp ip \mid \mathbf{R}_{mj} \mid}) \\
 &= \pm e^{\mp i\chi \mathbf{Q} \cdot \mathbf{R}_{mj}} \frac{v_0^2 \Omega}{(2\pi)^2 \mathcal{N} i \mid \mathbf{R}_{mj} \mid} \int_0^\infty p dp \frac{\varepsilon_\chi}{(v_F p)^2 - \varepsilon_\chi^2} (e^{\mp ip \mid \mathbf{R}_{mj} \mid} - e^{\pm ip \mid \mathbf{R}_{mj} \mid}) \\
 &= -e^{\mp i\chi \mathbf{Q} \cdot \mathbf{R}_{mj}} \frac{v_0^2 \Omega \varepsilon_\chi}{(2\pi)^2 \mathcal{N} i \mid \mathbf{R}_{mj} \mid} \int_{-\infty}^\infty dp \frac{p}{(v_F p)^2 - \varepsilon_\chi^2} (e^{ip \mid \mathbf{R}_{mj} \mid}), \quad (4.81)
 \end{aligned}$$

resultando em

$$I_1 = -e^{\mp i\chi \mathbf{Q} \cdot \mathbf{R}_{mj}} \frac{v_0^2 \Omega \varepsilon_\chi}{(2\pi)^2 \mathcal{N} i \mid \mathbf{R}_{mj} \mid v_F^2} \int_{-\infty}^\infty dp \frac{p}{p^2 - \frac{\varepsilon_\chi^2}{v_F^2}} (e^{ip \mid \mathbf{R}_{mj} \mid}). \quad (4.82)$$

Agora, vamos calcular o segundo termo

$$I_2 = \sigma e^{\mp i\chi \mathbf{Q} \cdot \mathbf{R}_{mj}} \frac{v_0^2 \Omega v_F \chi}{\mathcal{N} (2\pi)^3} \int_0^\infty \int_0^\pi \int_0^{2\pi} p^3 \sin \theta \cos \theta dp d\theta d\phi \frac{e^{\mp ip \mid \mathbf{R}_{mj} \mid \cos \theta}}{\varepsilon_\chi^2 - (v_F p)^2}. \quad (4.83)$$

Pelo método de substituição de variável, como utilizada na Eq. (4.79), temos

$$\begin{aligned}
\int_0^\pi \sin\theta \cos\theta e^{\mp ip|\mathbf{R}_{mj}|\cos\theta} d\theta &= \int_{\mp ip|\mathbf{R}_{mj}|}^{\pm ip|\mathbf{R}_{mj}|} \left(\pm \frac{da}{ip|\mathbf{R}_{mj}|} \right) \left(\mp \frac{a}{ip|\mathbf{R}_{mj}|} \right) e^a \\
&= \frac{1}{(p|\mathbf{R}_{mj}|)^2} \int_{\mp ip|\mathbf{R}_{mj}|}^{\pm ip|\mathbf{R}_{mj}|} a e^a da.
\end{aligned} \tag{4.84}$$

$$u = a \tag{4.85}$$

$$du = da \tag{4.86}$$

$$v = e^a \tag{4.87}$$

$$dv = e^a da, \tag{4.88}$$

Sendo assim

$$\begin{aligned}
\frac{1}{(p|\mathbf{R}_{mj}|)^2} \int a e^a da &= \frac{1}{(p|\mathbf{R}_{mj}|)^2} \left\{ [a e^a]_{\mp ip|\mathbf{R}_{mj}|}^{\pm ip|\mathbf{R}_{mj}|} - \int_{\mp ip|\mathbf{R}_{mj}|}^{\pm ip|\mathbf{R}_{mj}|} e^a da \right\} \\
&= \frac{1}{(p|\mathbf{R}_{mj}|)^2} \left\{ [a e^a]_{\mp ip|\mathbf{R}_{mj}|}^{\pm ip|\mathbf{R}_{mj}|} - [e^a]_{\mp ip|\mathbf{R}_{mj}|}^{\pm ip|\mathbf{R}_{mj}|} \right\} \\
&= \frac{1}{(p|\mathbf{R}_{mj}|)^2} \left\{ \pm ip|\mathbf{R}_{mj}| e^{\pm ip|\mathbf{R}_{mj}|} - (\mp ip|\mathbf{R}_{mj}| e^{\mp ip|\mathbf{R}_{mj}|}) \right\} \\
&\quad - \frac{1}{(p|\mathbf{R}_{mj}|)^2} \left\{ e^{\pm ip|\mathbf{R}_{mj}|} - e^{\mp ip|\mathbf{R}_{mj}|} \right\} \\
&= \frac{1}{(p|\mathbf{R}_{mj}|)^2} \left\{ \pm ip|\mathbf{R}_{mj}| e^{\pm ip|\mathbf{R}_{mj}|} \pm ip|\mathbf{R}_{mj}| e^{\mp ip|\mathbf{R}_{mj}|} \right\} \\
&\quad - \frac{1}{(p|\mathbf{R}_{mj}|)^2} \left\{ e^{\pm ip|\mathbf{R}_{mj}|} - e^{\mp ip|\mathbf{R}_{mj}|} \right\} \\
&= \mp \frac{[(e^{ip|\mathbf{R}_{mj}|} - e^{-ip|\mathbf{R}_{mj}|}) - ip|\mathbf{R}_{mj}|(e^{ip|\mathbf{R}_{mj}|} + e^{-ip|\mathbf{R}_{mj}|})]}{(p|\mathbf{R}_{mj}|)^2}
\end{aligned} \tag{4.89}$$

portanto, o termo angular torna-se

$$\int_0^\pi \sin\theta \cos\theta e^{\mp ip|\mathbf{R}_{mj}|\cos\theta} d\theta = \mp \frac{[(e^{ip|\mathbf{R}_{mj}|} - e^{-ip|\mathbf{R}_{mj}|}) - ip|\mathbf{R}_{mj}|(e^{ip|\mathbf{R}_{mj}|} + e^{-ip|\mathbf{R}_{mj}|})]}{(p|\mathbf{R}_{mj}|)^2} \quad (4.90)$$

então temos

$$\begin{aligned} I_2 &= \mp \sigma e^{\mp i\chi \mathbf{Q} \cdot \mathbf{R}_{mj}} \frac{v_0^2 \Omega v_F \chi}{\mathcal{N}(2\pi)^2 |\mathbf{R}_{mj}|^2} \int_0^\infty p dp \frac{(e^{ip|\mathbf{R}_{mj}|} - e^{-ip|\mathbf{R}_{mj}|} - ip|\mathbf{R}_{mj}|(e^{ip|\mathbf{R}_{mj}|} + e^{-ip|\mathbf{R}_{mj}|}))}{\varepsilon_\chi^2 - (v_F p)^2} \\ &= \mp \sigma e^{\mp i\chi \mathbf{Q} \cdot \mathbf{R}_{mj}} \frac{v_0^2 \Omega v_F \chi}{\mathcal{N}(2\pi)^2 |\mathbf{R}_{mj}|^2} \left(\int_0^\infty \frac{p e^{ip|\mathbf{R}_{mj}|}}{\varepsilon_\chi^2 - (v_F p)^2} dp - \int_0^\infty \frac{p e^{-ip|\mathbf{R}_{mj}|}}{\varepsilon_\chi^2 - (v_F p)^2} dp \right) \\ &\mp \sigma e^{\mp i\chi \mathbf{Q} \cdot \mathbf{R}_{mj}} (-i) \frac{v_0^2 \Omega v_F \chi |\mathbf{R}_{mj}|}{\mathcal{N}(2\pi)^2 |\mathbf{R}_{mj}|^2} \left(\int_0^\infty \frac{p^2 e^{ip|\mathbf{R}_{mj}|}}{\varepsilon_\chi^2 - (v_F p)^2} dp + \int_0^\infty \frac{p^2 e^{-ip|\mathbf{R}_{mj}|}}{\varepsilon_\chi^2 - (v_F p)^2} dp \right) \end{aligned} \quad (4.91)$$

Por método de substituição simples, onde $-p = a$ e $-dp = da$

$$\begin{aligned} INT2 &= \mp \sigma e^{\mp i\chi \mathbf{Q} \cdot \mathbf{R}_{mj}} \frac{v_0^2 \Omega v_F \chi}{\mathcal{N}(2\pi)^2 |\mathbf{R}_{mj}|^2} \left(\int_0^\infty \frac{p e^{ip|\mathbf{R}_{mj}|}}{(\varepsilon + i\eta)^2 - (v_F p)^2} dp - \int_0^{-\infty} \frac{a e^{ia|\mathbf{R}_{mj}|}}{(\varepsilon + i\eta)^2 - (v_F a)^2} da \right) \\ &\mp \sigma e^{\mp i\chi \mathbf{Q} \cdot \mathbf{R}_{mj}} (-i) \frac{v_0^2 \Omega v_F \chi |\mathbf{R}_{mj}|}{\mathcal{N}(2\pi)^2 |\mathbf{R}_{mj}|^2} \left(\int_0^\infty \frac{p^2 e^{ip|\mathbf{R}_{mj}|}}{(\varepsilon + i\eta)^2 - (v_F p)^2} dp - \int_0^{-\infty} \frac{a^2 e^{ia|\mathbf{R}_{mj}|}}{(\varepsilon + i\eta)^2 - (v_F a)^2} da \right) \\ &= \mp \sigma e^{\mp i\chi \mathbf{Q} \cdot \mathbf{R}_{mj}} \frac{v_0^2 \Omega v_F \chi}{\mathcal{N}(2\pi)^2 |\mathbf{R}_{mj}|^2} \left(\int_0^\infty \frac{p e^{ip|\mathbf{R}_{mj}|}}{(\varepsilon + i\eta)^2 - (v_F p)^2} dp + \int_{-\infty}^0 \frac{a e^{ia|\mathbf{R}_{mj}|}}{(\varepsilon + i\eta)^2 - (v_F a)^2} da \right) \\ &\mp \sigma e^{\mp i\chi \mathbf{Q} \cdot \mathbf{R}_{mj}} (-i) \frac{v_0^2 \Omega v_F \chi |\mathbf{R}_{mj}|}{\mathcal{N}(2\pi)^2 |\mathbf{R}_{mj}|^2} \left(\int_0^\infty \frac{p^2 e^{ip|\mathbf{R}_{mj}|}}{(\varepsilon + i\eta)^2 - (v_F p)^2} dp + \int_{-\infty}^0 \frac{a^2 e^{ia|\mathbf{R}_{mj}|}}{(\varepsilon + i\eta)^2 - (v_F a)^2} da \right) \\ &= \mp \sigma e^{\mp i\chi \mathbf{Q} \cdot \mathbf{R}_{mj}} \frac{v_0^2 \Omega v_F \chi}{\mathcal{N}(2\pi)^2 |\mathbf{R}_{mj}|^2} \left(\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{p e^{ip|\mathbf{R}_{mj}|}}{\varepsilon_\chi^2 - (v_F p)^2} dp + (-i) |\mathbf{R}_{mj}| \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{p^2 e^{ip|\mathbf{R}_{mj}|}}{\varepsilon_\chi^2 - (v_F p)^2} dp \right) \end{aligned} \quad (4.92)$$

resultando em

$$\begin{aligned}
\Sigma_{p_z}^\chi &= -e^{\mp i\chi \mathbf{Q} \cdot \mathbf{R}_{mj}} \frac{v_0^2 \Omega \varepsilon_\chi}{(2\pi)^2 \mathcal{N} i |\mathbf{R}_{mj}| v_F^2} \int_{-\infty}^{\infty} dp \frac{p}{p^2 - \frac{\varepsilon_\chi^2}{v_F^2}} (e^{ip|\mathbf{R}_{mj}|}) \\
&+ \sigma e^{\mp i\chi \mathbf{Q} \cdot \mathbf{R}_{mj}} \frac{v_0^2 \Omega v_F \chi}{\mathcal{N} (2\pi)^2 v_F^2 |\mathbf{R}_{mj}|^2} \left(\mp \int \frac{p e^{ip|\mathbf{R}_{mj}|}}{p^2 - \frac{\varepsilon_\chi^2}{v_F^2}} dp \mp (-i) |\mathbf{R}_{mj}| \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{p^2 e^{ip|\mathbf{R}_{mj}|}}{p^2 - \frac{\varepsilon_\chi^2}{v_F^2}} dp \right).
\end{aligned} \tag{4.93}$$

Para resolver a integral do primeiro termo, vamos utilizar o teorema dos resíduos [23], no qual é definido por

$$\oint_C f(z) dz = \int_{-R}^R f(x) dx + \oint f(z) dz, \tag{4.94}$$

em que $z = pe^{i\theta}$ ou $z = pe^{-i\theta}$. Por simplicidade devemos escolher o contorno que resulta em zero quando $\mathbf{p} \rightarrow \infty$

$$\begin{aligned}
\oint_C f(z) dz &= \lim_{R \rightarrow \infty} \left\{ \int_{-R}^R f(p) dp + \oint f(z) dz \right\} = 2\pi i \text{Res} f(p) \\
&= \int_{-\infty}^{\infty} f(p) dp = 2\pi i \text{Res} f(p),
\end{aligned} \tag{4.95}$$

em outras palavras

$$\int_{-\infty}^{\infty} dp \frac{p}{p^2 - \frac{\varepsilon_\chi^2}{v_F^2}} e^{ip|\mathbf{R}_{mj}|} = 2\pi i \text{Res} f(p). \tag{4.96}$$

Primeiro, temos que calcular os polos do integrando, que são

$$\begin{cases} p_1 &= +\frac{\varepsilon_\chi}{v_F} \\ p_2 &= -\frac{\varepsilon_\chi}{v_F} \end{cases} \tag{4.97}$$

Apenas o primeiro pólo está dentro do contorno, portanto, o resíduo pode ser calculado

como

$$\begin{aligned}
\text{Res}f(p) &= \lim_{p \rightarrow \frac{\varepsilon_\chi}{v_F}} \left(p - \frac{\varepsilon_\chi}{v_F} \right) \frac{p}{p^2 - \frac{\varepsilon_\chi^2}{v_F^2}} e^{ip|\mathbf{R}_{mj}|} \\
&= \lim_{p \rightarrow \frac{\varepsilon_\chi}{v_F}} \left(p - \frac{\varepsilon_\chi}{v_F} \right) \frac{p}{\left(p - \frac{\varepsilon_\chi}{v_F} \right) \left(p + \frac{\varepsilon_\chi}{v_F} \right)} e^{ip|\mathbf{R}_{mj}|} \\
&= \lim_{p \rightarrow \frac{\varepsilon_\chi}{v_F}} \frac{p}{\left(p + \frac{\varepsilon_\chi}{v_F} \right)} e^{ip|\mathbf{R}_{mj}|} \\
&= \frac{\frac{\varepsilon_\chi}{v_F}}{\left(\frac{\varepsilon_\chi}{v_F} + \frac{\varepsilon_\chi}{v_F} \right)} \exp \left[i |\mathbf{R}_{mj}| \left(\frac{\varepsilon_\chi}{v_F} \right) \right] \\
&= \frac{\frac{\varepsilon_\chi}{v_F}}{2 \frac{\varepsilon_\chi}{v_F}} \exp \left[i |\mathbf{R}_{mj}| \left(\frac{\varepsilon_\chi}{v_F} \right) \right] \\
&= \frac{1}{2} \exp \left[i |\mathbf{R}_{mj}| \left(\frac{\varepsilon_\chi}{v_F} \right) \right]
\end{aligned} \tag{4.98}$$

retomando a Eq. (4.96), temos

$$\int_{-\infty}^{\infty} dp \frac{p}{p^2 - \frac{\varepsilon_\chi^2}{v_F^2}} e^{ip|\mathbf{R}_{mj}|} = \pi i \exp \left[i |\mathbf{R}_{mj}| \left(\frac{\varepsilon_\chi}{v_F} \right) \right]. \tag{4.99}$$

Agora, vamos resolver a segunda integral

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{p^2 e^{ip|\mathbf{R}_{mj}|}}{p^2 - \frac{\varepsilon_\chi^2}{v_F^2}} dp = 2\pi i \text{Res}f(p) \tag{4.100}$$

com os pólos

$$\begin{cases} p_1 &= +\frac{\varepsilon_\chi}{v_F} \\ p_2 &= -\frac{\varepsilon_\chi}{v_F} \end{cases}, \tag{4.101}$$

sendo assim

$$\begin{aligned}
\text{Res}f(p) &= \lim_{p \rightarrow \frac{\varepsilon_\chi}{v_F}} \left(p - \frac{\varepsilon_\chi}{v_F} \right) \frac{p^2}{p^2 - \frac{\varepsilon_\chi^2}{v_F^2}} e^{ip|\mathbf{R}_{mj}|} \\
&= \lim_{p \rightarrow \frac{\varepsilon_\chi}{v_F}} \left(p - \frac{\varepsilon_\chi}{v_F} \right) \frac{p^2}{\left(p - \frac{\varepsilon_\chi}{v_F} \right) \left(p + \frac{\varepsilon_\chi}{v_F} \right)} e^{ip|\mathbf{R}_{mj}|} \\
&= \lim_{p \rightarrow \frac{\varepsilon_\chi}{v_F}} \frac{p^2}{\left(p + \frac{\varepsilon_\chi}{v_F} \right)} e^{ip|\mathbf{R}_{mj}|} \\
&= \frac{\left(\frac{\varepsilon_\chi}{v_F} \right)^2}{\left(\frac{\varepsilon_\chi}{v_F} + \frac{\varepsilon_\chi}{v_F} \right)} \exp \left[i |\mathbf{R}_{mj}| \left(\frac{\varepsilon_\chi}{v_F} \right) \right] \\
&= \frac{\left(\frac{\varepsilon_\chi}{v_F} \right)^2}{2 \frac{\varepsilon_\chi}{v_F}} \exp \left[i |\mathbf{R}_{mj}| \left(\frac{\varepsilon_\chi}{v_F} \right) \right] \\
&= \frac{\varepsilon_\chi}{2v_F} \exp \left[i |\mathbf{R}_{mj}| \left(\frac{\varepsilon_\chi}{v_F} \right) \right]
\end{aligned} \tag{4.102}$$

retomando para Eq. (4.100), temos

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{p^2 e^{ip|\mathbf{R}_{mj}|}}{p^2 - \frac{(\varepsilon + i\eta)^2}{v_F^2}} dp = \pi i \frac{\varepsilon_\chi}{v_F} \exp \left[i |\mathbf{R}_{mj}| \left(\frac{\varepsilon_\chi}{v_F} \right) \right] \tag{4.103}$$

resultando a auto-energia em

$$\begin{aligned}
\Sigma_\sigma^\chi &= -\frac{v_0^2 \Omega}{4\pi \frac{\Omega}{2\pi^2 v_F^3} \frac{D^3}{3} |\mathbf{R}_{mj}| v_F^2} \exp \left[i |\mathbf{R}_{mj}| \left(\frac{\varepsilon_\chi}{v_F} \right) \mp i \chi \mathbf{Q} \cdot \mathbf{R}_{mj} \right] \left\{ \varepsilon_\chi \pm \sigma \varepsilon_\chi \chi \pm i \sigma \frac{v_F \chi}{|\mathbf{R}_{mj}|} \right\} \\
&= -\frac{3v_F \pi v_0^2}{2D^3 |\mathbf{R}_{mj}|} \exp \left[i |\mathbf{R}_{mj}| \left(\frac{\varepsilon_\chi}{v_F} \right) \mp i \chi \mathbf{Q} \cdot \mathbf{R}_{mj} \right] \left\{ \varepsilon_\chi \pm \sigma \varepsilon_\chi \chi \pm i \sigma \frac{v_F \chi}{|\mathbf{R}_{mj}|} \right\}
\end{aligned} \tag{4.104}$$

4.4.2 Auto-Energia para $R = 0$

Para $R = 0$, a auto-energia é definida como

$$\Sigma^x(0) = \frac{v_0^2}{\mathcal{N}} \sum_{\vec{p}} \frac{\tilde{\varepsilon}_\chi}{\tilde{\varepsilon}_\chi^2 + (v_F p)^2} + \sigma \frac{v_0^2}{\mathcal{N}} \sum_{\vec{p}} \frac{v_F \chi p_z}{\tilde{\varepsilon}_\chi^2 - (v_F p)^2} \quad (4.105)$$

Calculando o primeiro termo, temos

$$\begin{aligned} I_1 &= \frac{v_0^2}{\mathcal{N}} \sum_{\mathbf{p}} \frac{(\varepsilon_\chi + i\eta)}{(\varepsilon_\chi + i\eta)^2 - (v_F p)^2} \\ &= \frac{v_0^2}{\mathcal{N}} \sum_{\mathbf{p}} \frac{\varepsilon_\chi}{\varepsilon_\chi^2 + i\eta \operatorname{sgn}(\varepsilon_\chi) - \eta^2 - (v_F p)^2} \\ &= \frac{v_0^2}{\mathcal{N}} \sum_{\mathbf{p}} \frac{\varepsilon_\chi}{(\varepsilon_\chi^2 - v_F^2 p^2) + i\eta \operatorname{sgn}(\varepsilon_\chi)} \left[\frac{(\varepsilon_\chi^2 - v_F^2 p^2) - i\eta \operatorname{sgn}(\varepsilon_\chi)}{(\varepsilon_\chi^2 - v_F^2 p^2) - i\eta \operatorname{sgn}(\varepsilon_\chi)} \right] \\ &= \frac{v_0^2}{\mathcal{N}} \sum_{\mathbf{p}} \frac{\varepsilon_\chi (\varepsilon_\chi^2 - v_F^2 p^2 - i\eta \operatorname{sgn}(\varepsilon_\chi))}{(\varepsilon_\chi^2 - v_F^2 p^2)^2 + \eta^2} \\ &= \frac{v_0^2}{\mathcal{N}} \sum_{\mathbf{p}} \left[\frac{\varepsilon_\chi (\varepsilon_\chi^2 - v_F^2 p^2)}{(\varepsilon_\chi^2 - v_F^2 p^2)^2 + \eta^2} - i \frac{\varepsilon_\chi \eta \operatorname{sgn}(\varepsilon_\chi)}{(\varepsilon_\chi^2 - v_F^2 p^2)^2 + \eta^2} \right] \\ &= \frac{v_0^2}{\mathcal{N}} \sum_{\mathbf{p}} \left[\frac{\varepsilon_\chi}{(\varepsilon_\chi^2 - v_F^2 p^2)} - i \frac{\varepsilon_\chi \eta \operatorname{sgn}(\varepsilon_\chi)}{(\varepsilon_\chi^2 - v_F^2 p^2)^2 + \eta^2} \right] \\ &= \mathcal{R}_{R=0}^{WSM} + i\Gamma_{R=0}^{WSM}. \end{aligned} \quad (4.106)$$

Calculando a parte real com $\sum_{\mathbf{p}} \rightarrow \frac{4\pi\Omega}{(2\pi)^3} \int_0^{p_F} p^2 dp$ e $\varepsilon_{\chi p} = v_F p$, temos

$$\begin{aligned}
\mathcal{R}_{R=0}^{WSM} &= \frac{v_0^2}{\mathcal{N}} \sum_{\mathbf{p}} \frac{\varepsilon_{\chi} (\varepsilon_{\chi}^2 - v_F^2 p^2)}{(\varepsilon_{\chi}^2 - v_F^2 p^2)^2 + \eta^2} \\
&= \frac{v_0^2}{\mathcal{N}} \frac{\Omega}{2\pi^2} \int_0^{p_F} p^2 dp \frac{\varepsilon_{\chi}}{(\varepsilon_{\chi}^2 - v_F^2 p^2)} \\
&= \frac{v_0^2}{\mathcal{N}} \frac{\Omega}{2\pi^2} \int_0^{p_F} p^2 dp \frac{\varepsilon_{\chi}}{(\varepsilon_{\chi}^2 - v_F^2 p^2)} [1 + 2\pi \rho q v_F p + (\pi \rho q v_F p)^2] \\
&= \frac{v_0^2 \varepsilon_{\chi}}{\mathcal{N}} \frac{\Omega}{2\pi^2} \int_0^{p_F} dp \frac{p^2}{(\varepsilon_{\chi}^2 - v_F^2 p^2)} \\
&= \frac{v_0^2 \varepsilon_{\chi}}{\mathcal{N}} \frac{\Omega}{2\pi^2} \int_0^{p_F} dp \frac{p^2}{v_F^2 \left(\frac{\varepsilon_{\chi}^2}{v_F^2} - p^2 \right)} \\
&= \frac{v_0^2 \varepsilon_{\chi}}{\mathcal{N} v_F^2} \frac{\Omega}{2\pi^2} \int_0^{p_F} dp \frac{p^2}{\left(\frac{\varepsilon_{\chi}^2}{v_F^2} - p^2 \right)}. \tag{4.107}
\end{aligned}$$

A integral resulta em

$$\begin{aligned}
\int_0^{p_F} dp \frac{p^2}{\left(\frac{\varepsilon_{\chi}^2}{v_F^2} - p^2 \right)} &= \left[\frac{1}{2} \frac{\varepsilon_{\chi}}{v_F} \ln \left(\frac{\left| p + \frac{\varepsilon_{\chi}}{v_F} \right|}{\left| p - \frac{\varepsilon_{\chi}}{v_F} \right|} \right) - p \right]_0^{p_F} \\
&= \left(\frac{1}{2} \frac{\varepsilon_{\chi}}{v_F} \ln \left(\frac{\left| p_F + \frac{\varepsilon_{\chi}}{v_F} \right|}{\left| p_F - \frac{\varepsilon_{\chi}}{v_F} \right|} \right) - p_F \right) - \left(\frac{1}{2} \frac{\varepsilon_{\chi}}{v_F} \ln \left(\frac{\left| 0 + \frac{\varepsilon_{\chi}}{v_F} \right|}{\left| 0 - \frac{\varepsilon_{\chi}}{v_F} \right|} \right) - 0 \right) \\
&= \left(\frac{1}{2} \frac{\varepsilon_{\chi}}{v_F} \ln \left(\frac{\left| p_F + \frac{\varepsilon_{\chi}}{v_F} \right|}{\left| p_F - \frac{\varepsilon_{\chi}}{v_F} \right|} \right) - p_F \right) - \left(\frac{1}{2} \frac{\varepsilon_{\chi}}{v_F} \ln(1) \right) \\
&= \left(\frac{1}{2} \frac{\varepsilon_{\chi}}{v_F} \ln \left(\frac{\left| p_F + \frac{\varepsilon_{\chi}}{v_F} \right| v_F}{\left| p_F - \frac{\varepsilon_{\chi}}{v_F} \right| v_F} \right) - \frac{v_F p_F}{v_F} \right) \\
&= \left(\frac{1}{2} \frac{\varepsilon_{\chi}}{v_F} \ln \left(\frac{|D + \varepsilon_{\chi}|}{|D - \varepsilon_{\chi}|} \right) - \frac{D}{v_F} \right), \tag{4.108}
\end{aligned}$$

portanto

$$\begin{aligned}
\mathcal{R}_{R=0}^{WSM} &= \frac{v_0^2 \varepsilon_\chi}{v_F^2 \frac{\Omega D^3}{6\pi^2 v_F^3} v_F^3} \frac{\Omega}{2\pi^2} \left[\frac{1}{2} \frac{\varepsilon_\chi}{v_F} \ln \left(\frac{|D + \varepsilon_\chi|}{|D - \varepsilon_\chi|} \right) - \frac{D}{v_F} \right] \\
&= \frac{3v_0^2 \varepsilon_\chi}{D^3} \left[\frac{1}{2} \varepsilon_\chi \ln \left(\frac{|D + \varepsilon_\chi|}{|D - \varepsilon_\chi|} \right) - D \right].
\end{aligned} \tag{4.109}$$

Calculando a parte imaginária

$$\begin{aligned}
\Gamma_{R=0}^{WSM} &= -\frac{v_0^2}{\mathcal{N}} \sum_{\mathbf{p}} \frac{\varepsilon_\chi \eta \operatorname{sgn}(\varepsilon_\chi)}{(\varepsilon_\chi^2 - v_F^2 p^2)^2 + \eta^2} \\
&= -\frac{|\varepsilon_\chi| v_0^2}{\mathcal{N}} \sum_{\mathbf{p}} \frac{\eta}{(\varepsilon_\chi^2 - v_F^2 p^2)^2 + \eta^2} \\
&= -\frac{|\varepsilon_\chi| v_0^2}{\mathcal{N}} \frac{\Omega}{2\pi^2} \int_0^{p_F} p^2 dp \frac{\eta}{(\varepsilon_\chi^2 - v_F^2 p^2)^2 + \eta^2} \\
&= -\frac{|\varepsilon_\chi| v_0^2}{\mathcal{N}} \frac{\Omega}{2\pi^2} \int_0^D \left(\frac{\varepsilon_{\chi p}^2}{v_F^2} \right) \left(\frac{d\varepsilon_{\chi p}}{v_F} \right) \frac{\eta}{(\varepsilon_\chi^2 - \varepsilon_{\chi p}^2)^2 + \eta^2} \\
&= -\frac{|\varepsilon_\chi| v_0^2}{\mathcal{N}} \frac{\Omega}{2\pi^2 v_F^3} \int_0^D \varepsilon_{\chi p}^2 d\varepsilon_{\chi p} \frac{\eta}{(\varepsilon_\chi^2 - \varepsilon_{\chi p}^2)^2 + \eta^2} \\
&= -\frac{2|\varepsilon_\chi| v_0^2}{\mathcal{N}} \frac{\Omega}{2\pi^2 v_F^3} \int_0^D \varepsilon_{\chi p}^2 d\varepsilon_{\chi p} [\pi \delta(\varepsilon_\chi^2 - \varepsilon_{\chi p}^2)] (1 + \pi \rho q \varepsilon_{\chi p})^2 \\
&= -\pi \frac{|\varepsilon_\chi| v_0^2}{\mathcal{N}} \frac{\Omega}{2\pi^2 v_F^3} \int_0^D \varepsilon_{\chi p}^2 d\varepsilon_{\chi p} \frac{1}{2|\varepsilon_\chi|} [\delta(\varepsilon_\chi - \varepsilon_{\chi p}) + \delta(\varepsilon_\chi + \varepsilon_{\chi p})] \\
&= -\frac{\pi}{\mathcal{N}} \frac{\Omega v_0^2}{4\pi^2 v_F^3} \int_0^D \varepsilon_{\chi p}^2 d\varepsilon_{\chi p} [\delta(\varepsilon_\chi - \varepsilon_{\chi p}) + \delta(\varepsilon_\chi + \varepsilon_{\chi p})] \\
&= -\frac{3\pi v_0^2}{2D^3} \varepsilon_\chi^2,
\end{aligned} \tag{4.110}$$

onde utilizamos propriedades como $\delta(\varepsilon_\chi^2 - \varepsilon_{\chi p}^2) = \frac{\eta}{(\varepsilon_\chi^2 - \varepsilon_{\chi p}^2)^2 + \eta^2}$ e

$$\delta(\varepsilon_\chi^2 - \varepsilon_{\chi p}^2) = \frac{1}{2|\varepsilon_\chi|} [\delta(\varepsilon_\chi - \varepsilon_{\chi p}) + \delta(\varepsilon_\chi + \varepsilon_{\chi p})].$$

No segundo termo, nos deparamos com integrais do tipo $\int_0^\pi d\theta \sin\theta \cos\theta = 0$, portanto, resulta em 0.

Sendo assim, a auto-energia para $R = 0$ é

$$\Sigma^x(0) = \frac{3v_0^2\varepsilon_\chi}{D^3} \left[\frac{1}{2}\varepsilon_\chi \ln \left(\frac{|D + \varepsilon_\chi|}{|D - \varepsilon_\chi|} \right) - D \right] - i \frac{3\pi v_0^2}{2D^3} \varepsilon_\chi^2. \quad (4.111)$$

Capítulo 5

RESULTADOS E DISCUSSÕES

Neste sistema, consideramos um caso de duas impurezas idênticas enterradas em um semimetal de Weyl localizados em $\mathbf{R}_{1,2} = (0, \mp 1, 0)\text{nm}$ com níveis de energia $\varepsilon_{j\sigma} = -0.07D$. Simulamos uma ponta de STM localizada em dois pontos $\mathbf{R}_m = (0, 0, 1)$ e $\mathbf{R}_m = (1, 1, 1)$ para obter a Ldos, que experimentalmente é o proporcional a condutância. As impurezas são hibridizadas com os elétrons livres do semimetal de Weyl com uma intensidade de $v_0 = 0.14D$. A repulsão de Coulomb é $U_j = 0.14D$ e o conjunto de parâmetros utilizados corresponde para o regime de simetria de Anderson ($2\varepsilon_{j\sigma} + U_j = 0$). Para este caso, utilizamos $\hbar v_F \approx 3eV\text{\AA}$ e $D \approx 0.2eV$ [6].

No caso do semimetal de Dirac-3D, em que $\mathbf{Q} = 0$ e $Q_0 = 0$, temos quatro picos na densidade de estados (Dos), painéis Fig. 5.1(a) e Fig. 5.1(b), que emergem devido a repulsão de Coulomb U_j e a interação das impurezas provida das auto-energias na Eq.(4.68) e Eq.(4.69). Essa interação duplica os picos localizados em $\varepsilon_{j\sigma}$ em $\varepsilon_{j\sigma} + U_j$, formando um estado molecular, que tem como propriedade um estado antiligante no estado fundamental [6].

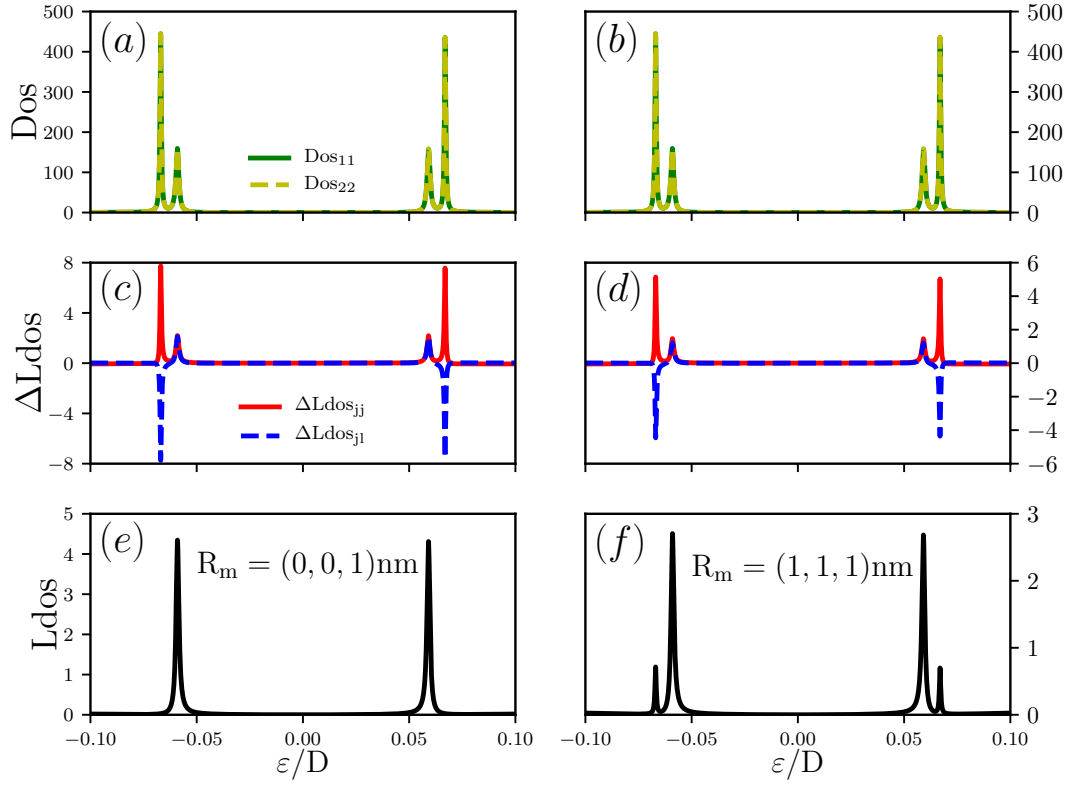


Figura 5.1: Ponta de STM posicionada em $\mathbf{R}_m = (0,0,1)$ na primeira coluna e $\mathbf{R}_m = (1,1,1)$ na segunda coluna. Os painéis (a) e (b) são as densidades de estados das impurezas Dos_{11} (curva sólida verde) e a Dos_{22} (curva tracejada amarela). Nos painéis (c) e (d) temos densidade de estados local induzido pelas impurezas para $j = l$ (curva sólida vermelha) e $j \neq l$ (curva tracejada azul). No painel (c), temos ressonâncias cancelada totalmente pela antirressonância em torno de $\varepsilon \approx \pm 6.7 \times 10^{-2}D$ e no painel (d), cancelamento parcial em que pode ser melhor visualizada na LDOS total. No painel (e), temos a LDOS total que apresenta um estado ligado no contínuo no nível $\varepsilon \approx \pm 6.7 \times 10^{-2}D$ devido a ausência de estados. Entretanto, no painel (f), temos um decaimento do estado ligado no contínuo no nível $\varepsilon \approx \pm 6.7 \times 10^{-2}D$ devido o cancelamento parcial da antirressonância.

Podemos observar que no painel Fig. 5.1(a), temos quatro estados em $\varepsilon \approx \pm 6.7 \times 10^{-2}D$ e $\varepsilon \approx \pm 5.9 \times 10^{-2}D$ com a ponta de STM posicionada em $\mathbf{R}_m = (0,0,1)$. Entretanto, quando observamos a Ldos total, painel (Fig. 5.1(e)), apenas dois picos estão presentes, ou seja, quando a ponta do STM está na energia $\varepsilon \approx \pm 6.7 \times 10^{-2}D$ não há corrente elétrica. Portanto, temos a presença do que é conhecido como estado ligado no contínuo (BIC) neste nível de energia devido ao cancelamento total das ressonâncias por antirressonância apresentado no painel Fig. 5.1(c). Os estados ligados no contínuo (BICs), são estados que prendem o elétron por um tempo infinito. Entretanto, o cancelamento total dos picos ocorre apenas para certos valores de $\mathbf{R}_m$, como apresentado nos painéis

[Fig. 5.1(e) e (f)]. Neste caso, a interferência destrutiva não é perfeita e, portanto, os BICs decaem no contínuo do hospedeiro.

Ao quebrar apenas a TRS , preservando a IS , temos a separação dos cones no espaço $\mathbf{k}$ e com energias iguais. Alterando o valor de $\mathbf{Q} = Q_x \hat{i}, Q_y \hat{j}, Q_z \hat{k}$, responsável pela separação dos cones no espaço $\mathbf{k}$, temos a TRS quebrada. Uma particularidade na quebra desta simetria foi a magnetização das impurezas ao alterar o valor de $Q = 0.01\hat{j}$, [Fig. 5.3(a) e (b)], em que há uma quebra na degenerescência dos estados nas impurezas separando-os por *spin*. Podemos ver como o numero de onda Q_y altera na magnetização das impurezas pela (Fig. 5.2). Esta particularidade pode ser visualizada na Eq. (4.104), em que $\exp \left[i \left| \mathbf{R}_{mj} \right| \left(\frac{\varepsilon_\chi}{v_F} \right) \mp i\chi \mathbf{Q} \cdot \mathbf{R}_{mj} \right]$ não é anulada para valores de $\mathbf{Q}$ na mesma direção de $\mathbf{R}_{jl}$, ou seja, em $\hat{j}$.

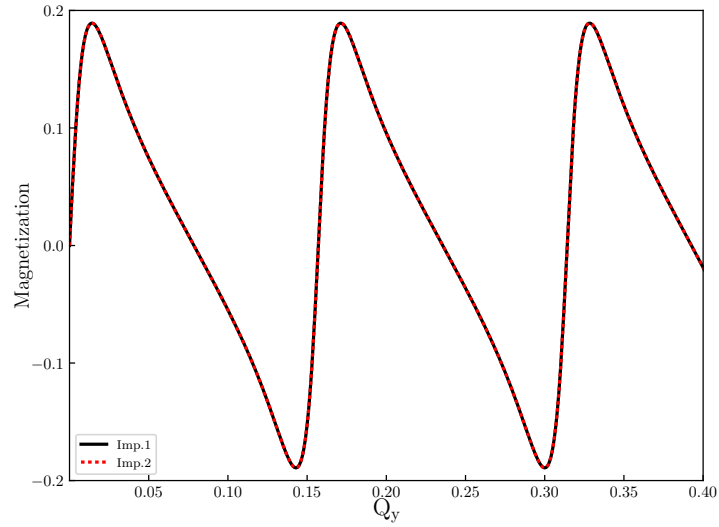


Figura 5.2: Magnetização das impurezas com a variação de Q_y .

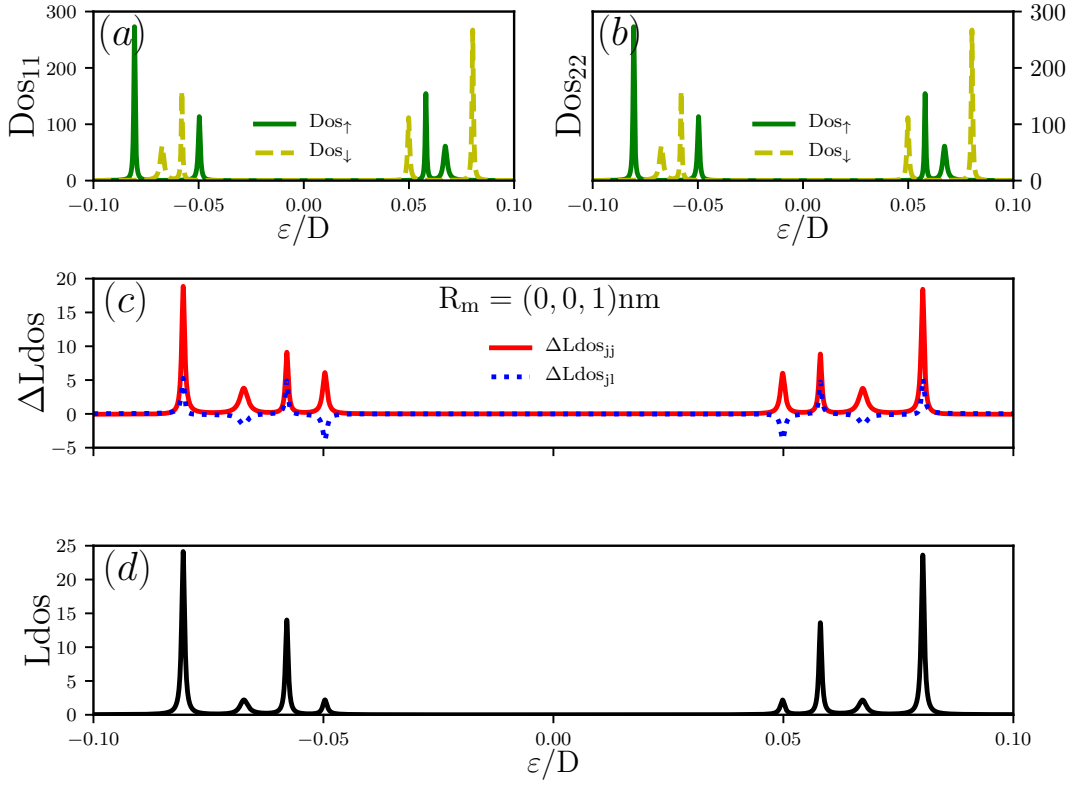


Figura 5.3: Ponta de STM posicionada em $\mathbf{R}_m = (0,0,1)$ para $\mathbf{Q} = 0.01\hat{j}$. Painéis (a) e (b) apresentam a Dos_{11} e Dos_{22} , respectivamente, para *spin up* (curva sólida verde) e *spin down* (curva tracejada amarela). Paine (c), densidade local de estados $j = l$ (curva sólida vermelha) e $j \neq l$ (curva pontilhada azul). Paine (d), Ldos total apresentando quatro picos na banda de valência e de condução.

Em comparação com a Ldos do semimetal de Dirac apresentado na (Fig. 5.1), a Ldos total no semimetal de Weyl apresenta quatro picos na banda de valência e de condução. Podemos observar nos painéis (Fig. 5.3(a) e (b)), picos *spin*-polarizados que emergem com o aumento de $\mathbf{Q}$ na direção $\hat{j}$. Devido a esta polarização e o cancelamento parcial das ressonâncias, apresentados na (Fig. 5.3(c)), a Ldos total resulta em quatro picos em ambas as bandas de valência e de condução.

Tais picos *spin*-polarizados, surgem devido ao campo aplicado na mesma direção que a interação das impurezas. Podemos observar no painel (Fig. 5.4(b)), em que temos as curvas da parte real da auto-energia de interação das impurezas, uma *spin*-polarização das energias quando o campo é aplicado na direção $\hat{j}$. Entretanto, ao aplicarmos o campo na direção $\hat{i}$, as energias apresentadas no mesmo painel estão degeneradas e, o mesmo ocorre na direção $\hat{k}$.

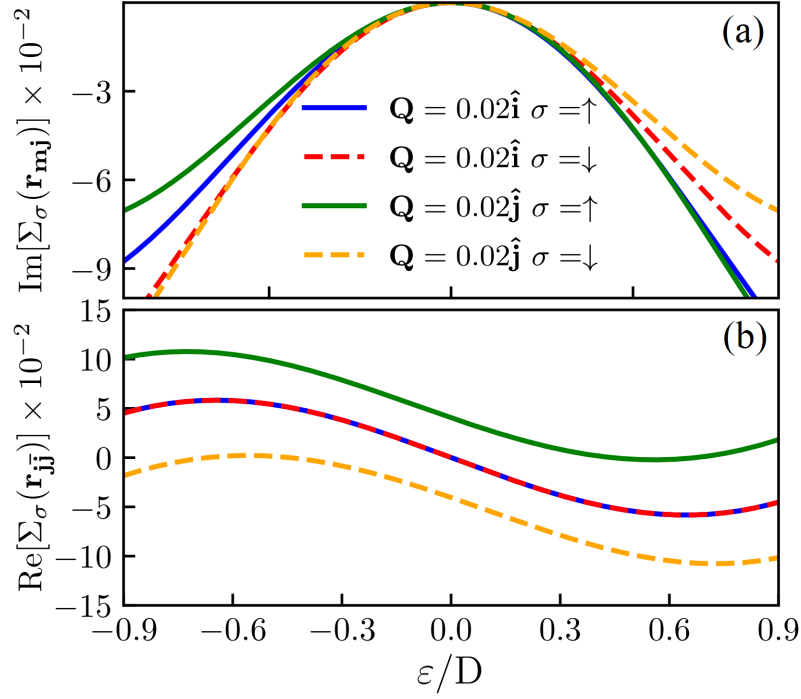


Figura 5.4: Auto-energia com os parâmetros $\mathbf{Q} = 0.02\hat{i}$ e $\mathbf{Q} = 0.02\hat{j}$ separados por *spin*, sendo que para os painéis: (a) Parte imaginária da auto-energia da correlação entre a impureza-hospedeiro; (b) Parte real da auto-energia da correlação entre impureza-impureza.

Na comunidade científica, é conhecido que o semimetal de Weyl é um material que contém uma magnetização líquida quando há quebra TRS [24]. Entretanto, apenas com a aplicação do campo na direção $\hat{j}$ as impurezas são magnetizadas. No painel Fig. 5.4(a), as curvas apresentam a parte imaginária da auto-energia da interação entre a impureza e o hospedeiro. Nota-se que na região do nível de Fermi, as energias estão degeneradas por *spin*. Por outro lado, na região das bordas da banda de energia, há uma *spin* polarização da auto-energia, que ocorre, também, para as direções perpendiculares a ligação das impurezas. Como os cálculos foram realizados para baixa energia e temperatura igual a zero, com o intuito de estudar o espalhamento eletrônico na região da energia de Fermi, ou seja, nos cones de Dirac, a magnetização não interfere nos resultados.

Determinamos uma topografia espacial da Ldos da superfície de um WSM 8-por-8nm para quatro valores de energias Fig. 5.5. As energias utilizadas para a determinação da topografia, são os valores em que estão localizados os quatro primeiros picos da Ldos, Fig. 5.3(d).

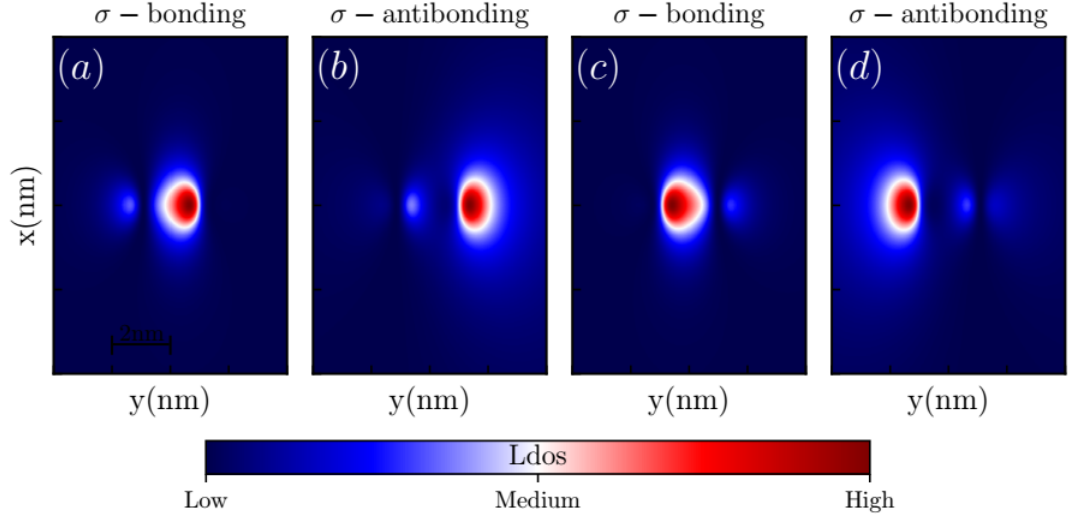


Figura 5.5: Topografia espacial da LDOS na superfície de um WSM 8-por-8nm para quatro energias. Nos painéis (a) e (c) com $\varepsilon \approx -8 \times 10^{-2}D$ e $\varepsilon \approx -5.8 \times 10^{-2}D$, apresentando orbitais moleculares do tipo σ ligantes devido a interferência construtiva da $\Delta Ldos$. Nos painéis (b) e (d) com $\varepsilon \approx -6.7 \times 10^{-2}D$ e $\varepsilon \approx -4.9 \times 10^{-2}D$, apresentando orbitais moleculares do tipo σ anti-ligantes devido a interferências destrutivas.

Na natureza, uma molécula é do tipo ligante no estado fundamental (ground state), na maioria dos casos, diferente do DSM que é anti-ligante[6]. As interferências construtivas e destrutivas entre as funções de onda dos orbitais s , forma uma ligação covalente com estados ligante-antiligante no DSM. Ao separar os nós de Weyl com a quebra de TRS, o campo pseudo magnético aplicado em paralelo ao vetor $\mathbf{R}_{j\bar{j}}$, distância entre as impurezas, altera os orbitais das impurezas de s para p . Sendo assim, a formação da molécula apresenta uma nova configuração em seus orbitais, que neste caso, como podemos observar na Fig. 5.5. Esta ligação é do tipo σ devido a interferência frontal dos orbitais do tipo p das impurezas. Isto implica que os elétrons de condução são excitados de onda s para p devido a emergência de uma propagação de onda eletrônica extra com número de onda $\mathbf{Q}$ descrita por uma onda plana $e^{i\chi\mathbf{Q}\cdot\mathbf{R}_{mj}}$ na auto-energia.

Como a $Ldos$ é resultado de estados *spin*-polarizado das impurezas, para cada estado ligante-antiligante há um grau de liberdade para *spin up* e *spin down*. Na [Fig. 5.3 (a) e (b)], é possível visualizar os estados para *up* e *down* para determinadas energias. Na (Fig. 5.3 (c)), as ressonâncias e antirressonâncias representam estados ligantes e anti-ligantes, respectivamente. Portanto, na Fig. 5.5, temos os estados ligante e anti-ligante para: (a) e (d) *spin up* e, (b) e (c) *spin down*. Podemos observar na Fig. 5.2 que existem

valores de Q_y que não implicam ordenamento magnético nas impurezas, sendo assim, os estados voltam a ser *spin* degenerados, como no DSM, Fig. 5.6. Entretanto, mesmos os estados estando degenerados o material não deixa de ser um WSM. Portanto, realizando uma topografia no material para $Q_y = 0.157$, nota-se que a ligação σ dos orbitais do tipo p prevalece Fig. 5.7.

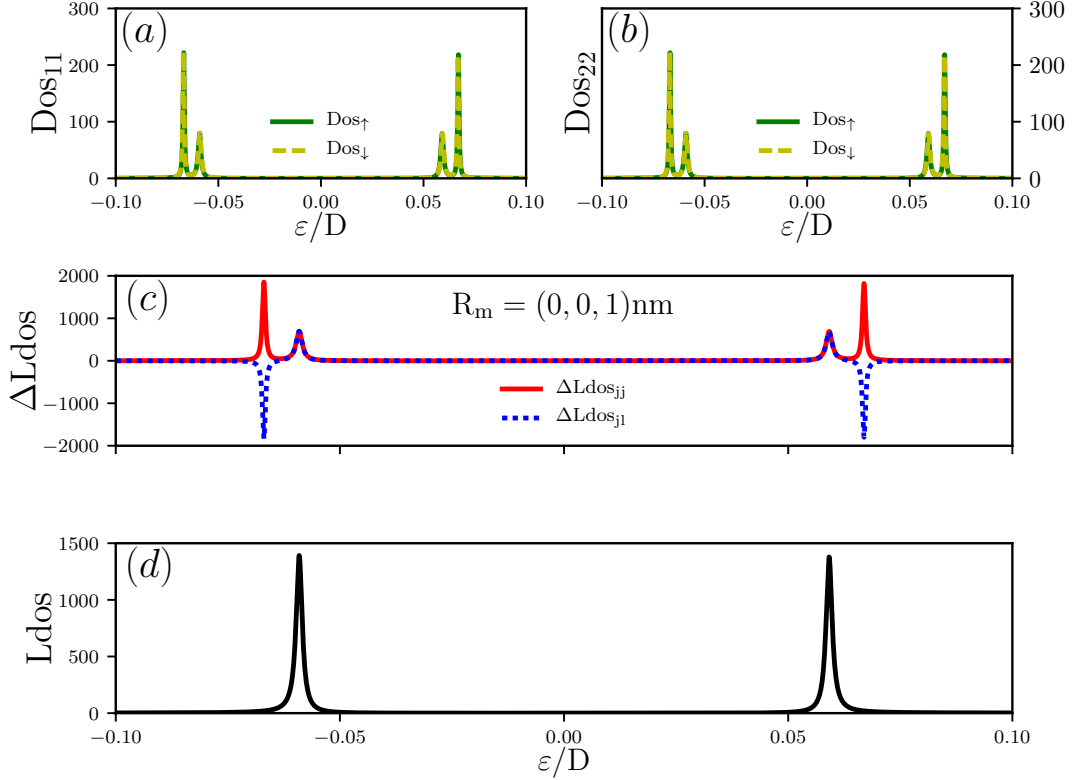


Figura 5.6: Ponta de STM posicionada em $\mathbf{R}_m = (0,0,1)$ para $Q_y = 0.157$. Painéis (a) e (b) apresentam a Dos_{11} e Dos_{22} , respectivamente, para *spin up* (curva sólida verde) e *spin down* (curva tracejada amarela). Paine (c), densidade local de estados $j = l$ (curva sólida vermelha) e $j \neq l$ (curva pontilhada azul). Paine (d), $Ldos$ total apresentando quatro picos na banda de valência e de condução.

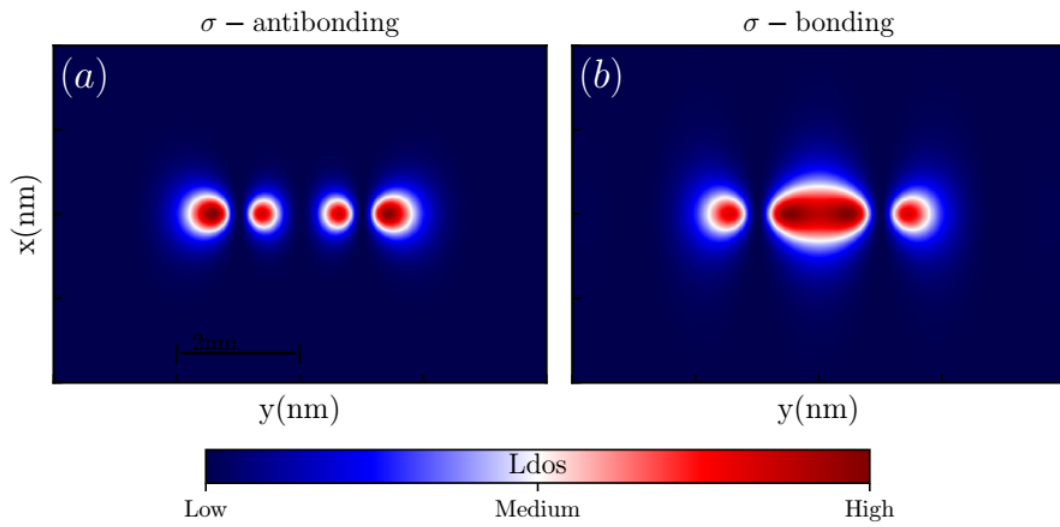


Figura 5.7: Topografia espacial com número de onda $Q_y = 0.157$ e energia (a) estado antiligante no nível $\varepsilon \approx -6.7 \times 10^{-2}D$ e (b) estado ligante no nível $\varepsilon \approx -5.9 \times 10^{-2}D$ de ligação molecular do tipo σ .

Capítulo 6

CONCLUSÃO

Revisitamos os resultados publicados no Phys. Rev. B **96**, 041112 (2017), considerando $\mathbf{Q} = Q_0 = 0$, em que as impurezas enterradas em um semimetal de Dirac com orbitais de onda s formam uma molécula de ligação covalente e, ao realizar uma topografia espacial da densidade de estados, identificamos estados ligante e antiligante. No semimetal de Dirac, no estado fundamental a ligação covalente apresenta um estado antiligante, sendo que na natureza, em sua maioria, é ligante. Ao quebrar a simetria de reversão temporal do semimetal de Dirac e preservando a simetria de inversão, $\mathbf{Q} \neq 0$ e $Q_0 = 0$, obtemos o semimetal de Weyl, em que as impurezas apresentam uma densidade de estados *spin*-polarizada, ou seja, há um ordenamento magnético separando os estados por *spin*. Esta magnetização ocorre devido à interferência realizada entre o campo pseudo-magnético ao ser aplicado na mesma direção que a ligação das impurezas, por se tratar de uma onda de propagação extra, ela interfere na trajetória dos elétrons entre as impurezas. Além disso, o campo pseudo-magnético $\mathbf{Q}$, provoca uma excitação nos elétrons de condução de onda s tornando-os em p , alterando a ligação molecular para sigma (σ) devido, também, a orientação que se encontra os orbitais, que neste caso é frontal ou colinear. Realizando uma topografia espacial da densidade de estados, identificamos a formação da molécula de ligação σ orientada por *spin* para os estados ligante e antiligante. Investigamos o comportamento da magnetização das impurezas com o aumento do valor de Q_y e observamos um comportamento oscilatório devido ao termo apresentado na auto-energia $e^{i\chi\mathbf{Q}\cdot\mathbf{R}_{jl}}$. Estudamos um caso em que a magnetização na impureza é nula para um determinado valor,

em particular, de $Q_y = 0.157$ onde as densidades de estados estão degeneradas por *spin*. Realizando uma topografia espacial da densidade de estados, observamos novamente a presença molécula de ligação σ , porém, degenerados por *spin*, apresentando um estado antiligante no estado fundamental e ligante no primeiro estado excitado.

Referências Bibliográficas

- [1] P. A. M. Dirac, Proc. R. Soc. A **117**, 610 (1928).
- [2] K. S. Novoselov, Rev. Mod. Phys. **83**, 837 (2011).
- [3] N. M. R. Peres, Rev. Mod. Phys. **82**, 2673 (2010).
- [4] A.H. Castro Neto, F. Guinea, N.M.R. Peres, K.S. Novoselov, and A. K. Geim, Rev. Mod. Phys. **81**, 109. (2009)
- [5] L. Pauling, The Nature of the Chemical Bond (Cornell University Press, Ithaca, NY), 1972.
- [6] Y. Marques, A. E. Obispo, L. S. Ricco, M. de Souza, I. A. Shelykh, and A. C. Seridonio, Phys. Rev. B **96**, 041112 (2017).
- [7] Z. K. Liu, B. Zhou, Y. Zhang, Z. J. Wang, H. M. Weng, D. Prabhakaran, S.-K. Mo, Z. X. Shen, Z. Fang, X. Dai, Z. Hussain, and Y. L. Chen, Science **343**, 864 (2014).
- [8] Z. K. Liu, J. Jiang, B. Zhou, Z. J. Wang, Y. Zhang, H. M. Weng, D. Prabhakaran, S.-K. Mo, H. Peng, P. Dudin, T. Kim, M. Hoesch, Z. Fang, X. Dai, Z. X. Shen, D. L. Feng, Z. Hussain, and Y. L. Chen, Nat. Mater. **13**, 677 (2014).
- [9] J. Feng, Y. Pang, D. Wu, Z. Wang, H. Weng, J. Li, X. Dai, Z. Fang, Y. Shi, and L. Lu, Phys. Rev. B **92**, 081306(R) (2015).
- [10] P. J. W. Moll, N. L. Nair, T. Helm, A. C. Potter, I. Kimchi, A. Vishwanath, and J. G. Analytis, Nature (London) **535**, 266 (2016).

- [11] T. Liang, Q. Gibson, M. N. Ali, M. Liu, R. J. Cava, and N. P. Ong, *Nat. Mater.* **14**, 280 (2014).
- [12] X. Wan, A. M. Turner, A. Vishwanath, and S. Y. Savrasov, *Phys. Rev. B* **83**, 205101 (2011).
- [13] S. M. Young, S. Zaheer, J. C. Y. Teo, C. L. Kane, E. J. Mele, and A. M. Rappe, *Phys. Rev. Lett.* **108**, 140405 (2012).
- [14] S. Murakami, *New J. Phys.* **9**, 356 (2007)
- [15] M. M. Vazifeh and M. Franz, *Phys. Rev. Letter*, **111**, 027201 (2013).
- [16] A. A. Zyuzin, Si Wu, A. A. Burkov, *Phys. Rev B*, **85**, 165110 (2012).
- [17] H.-R. Chang, J. Zhou, S.-X. Wang, W.-Y. Shan, and D. Xiao, *Phys. Rev. B* **92**, 241103(R) (2015).
- [18] D. Xiao, M.-C. Chang, and Q. Niu, *Rev. Mod. Phys.* **82**, 1959 (2010).
- [19] P. W. Anderson, *Phys. Rev.* **124**, 41 (1961).
- [20] A. F. Otte, M. Ternes, K. V. Bergmann, S. Loth, H. Brune, C. P. Lutz, C. F. Hirjibehedin, and A. J. Heinrich, *Nature Physics* **4**, 847 (2008).
- [21] P. Phillips, *Advanced Solid State Physics*, 2nd Edition (Cambridge University Press, 2012).
- [22] J. Hubbard, *Proc. R. Soc. London A* **276**, 238 (1963).
- [23] H. J. Weber and G. B. Arfken, *Essential Mathematical Methods for Physicists*, 1nd Edition (Academic Press, 2003).
- [24] Su-Yang Xu, et al. *Science*, Vol. 349, Issue 6248, pp. 613-617 (2015)