



**UNIVERSIDADE ESTADUAL PAULISTA
“JÚLIO DE MESQUITA FILHO”**

Faculdade de Engenharia de Ilha Solteira (FEIS)

Departamento de Física e Química (DFQ)

**Programa de Pós-Graduação em Ciência dos Materiais
(PPGCM)**

**Interação entre impurezas enterradas em um
Semimetal de Weyl: Caso não magnético**

Renan Silva de Oliveira

Mestrado

17 de janeiro de 2019

Ilha Solteira, São Paulo, Brasil

UNIVERSIDADE ESTADUAL PAULISTA

Faculdade de Engenharia de Ilha Solteira

Departamento de Física e Química

Pós-Graduação em Ciência dos Materiais

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

RENAN SILVA DE OLIVEIRA

Orientador: Prof. Dr. Antonio Carlos Ferreira Seridonio

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

Mestrado

17 de janeiro de 2019

Ilha Solteira, São Paulo, Brasil

FICHA CATALOGRÁFICA
Desenvolvido pelo Serviço Técnico de Biblioteca e Documentação

Oliveira, Renan Silva de.
O482i Interação entre impurezas enterradas em um semimetal de Weyl: caso não magnético / Renan Silva de Oliveira. -- Ilha Solteira: [s.n.], 2019
124 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

1. Semimetal de Weyl. 2. Semimetal de Dirac. 3. Modelo de Anderson.
4. Estrutura eletrônica.

CERTIFICADO DE APROVAÇÃO

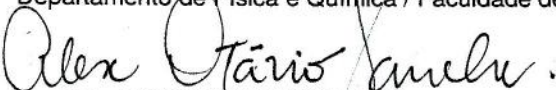
TÍTULO DA DISSERTAÇÃO: Interação entre impurezas enterradas em um Semimetal de Weyl: Caso não magnético


AUTOR: RENAN SILVA DE OLIVEIRA

ORIENTADOR: ANTONIO CARLOS FERREIRA SERIDONIO

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


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


Prof. Dr. ALEX OTÁVIO SANCHES
Departamento de Física e Química / Faculdade de Engenharia de Ilha Solteira


Prof. Dr. MAKOTO YOSHIDA
Departamento de Física / Instituto de Geociências e Ciências Exatas de Rio Claro

Ilha Solteira, 14 de janeiro de 2019

© 2018 Renan Silva de Oliveira

All rights reserved

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

DEDICATÓRIA

Este trabalho só foi possível graças à participação de três pessoas a quem escrevo esta dedicatória.

Meu orientador, professor Antonio Carlos Ferreira Seridonio, um exemplo de professor e pesquisador, orientando-me com extremama paciência, motivando-me a realizar esta pesquisa e apoiando-me a vencer os desafios.

O Doutorando Yuri Policei Marques, um exemplo de pesquisador, que me aconselhou no desenvolvimento dos cálculos e pacientemente me explicou muitos dos conceitos físicos escritos neste trabalho.

O mestrando e colega de grupo William Nobuhiro Mizobata , pela ajuda nos meus estudos.

AGRADECIMENTOS

Agradeço a todos que fizeram parte do processo de construção desta pesquisa, em especial:

- Ao meu orientador, professor Antonio Carlos Ferreira Seridonio, pela sabedoria, incentivo, motivação e paciência em me orientar, o que possibilitou a escrita deste trabalho.
- Aos meus colegas de pós graduação, Yuri Policei Marques, William Nobuhiro Mizobata e Luciano Henrique Siliano Ricco, membros do *Strongly Correlated System Group*, pela contribuição no meu aprendizado nesses dois anos de mestrado.
- À minha mãe, ao meu pai e à minha irmã que na maior das dificuldades, passadas por nossa família, sempre estiveram ao meu lado e sempre me apoiaram para construir a minha carreira profissional.
- Aos meus amigos e parceiros de faculdade por toda a ajuda que recebi nos meus estudos e no desenvolvimento de atividades acadêmicas, contribuindo para o meu sucesso.
- À CAPES (Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior), pelo suporte financeiro, sem o qual seria extremamente difícil a realização desta pesquisa.
- À todos os outros dos quais não citei, mas que tiveram grande participação no meu aprendizado e na minha formação.

Muitíssimo Obrigado!

Renan Silva de Oliveira

Se cheguei até aqui foi porque me apoiei no ombro dos gigantes.

[Isaac Newton]

Orientador

Antonio C. F. Seridonio

Autor

Renan S. de Oliveira

Interação entre impurezas enterradas em um Semimetal de Weyl: Caso não magnético

Resumo

Por meio da equação de Weyl que descreve o *bulk* de um semimetal de Weyl, inserimos duas impurezas no interior deste semimetal, com o intuito de medir a condutância desse sistema por meio de uma ponta de um microscópio de corrente de tunelamento (*STM: scanning tunneling microscope*), assim como exploramos teoricamente a influência que o semimetal de Dirac-Weyl causa na estrutura dos orbitais das impurezas. Verificamos que nessas condições apresentadas: (i) é possível resgatar e obter os mesmos resultados publicados por Phys. Rev. B 96, 041112(R) (2017) para um semimetal de Dirac em três dimensões; (ii) ao quebrarmos a simetria de inversão do sistema, ocorre um alargamento dos picos de ressonância, até o ponto que uma impureza deixa de sentir a presença da outra, o que caracteriza um sistema que segue o modelo de Anderson de uma impureza (*SIAM: single impurity Anderson model*), ao passo que, caso continuemos aumentando o valor deste parâmetro, a estrutura de bandas do material torna-se um metal; (iii) ao quebrarmos a simetria de reversão temporal nas direções dos eixos x e z , ocorre formação de um par de orbitais de ligações π para os estados ligantes e antiligantes, o que significa que os elétrons são excitados de ondas s para os ondas p .

Palavras-chaves: Semimetal de Weyl, Semimetal de Dirac, Modelo de Anderson, Estrutura eletrônica.

Advisor

Antonio C. F. Seridonio

Author

Renan S. de Oliveira

Interaction between impurities buried in a Weyl Semimetal: Nonmagnetic case

Abstract

Through the Weyl equation that describes the bulk of a Weyl semimetal, we inserted two impurities inside this semimetal, in order to measure the conductance of this system by means of a scanning tunneling microscope (STM), as well as we theoretically explore the influence that Dirac-Weyl semimetal causes on the structure of the impurities orbitals. We verified that under these conditions presented: (i) it is possible to retrieve and obtain the same results published by Phys. Rev. B 96, 041112 (R) (2017) for a three-dimensional Dirac Semimetal; (ii) when we break the inversion symmetry of the system, there is a widening of the resonance peaks, to the point that one impurity cannot feel the presence of the other one, which characterizes a single impurity Anderson model (SIAM) system, whereas, if we continue increasing the value of this parameter, the bands structure of the material becomes a metal; (iii) when we break the time reversal symmetry in the x and z-axis directions, a pair of π -bond orbitals forms for the bonding and antibonding states, which means that electrons are excited from *s*-waves to *p*-waves.

Keywords: Weyl semimetal, Dirac semimetal, Anderson model, Electronic structure.

Nomenclatura

3D-DSM	Three-dimensional Dirac Semimetal — Semimetals de Dirac tridimensionais
AIM	Anderson Impurity Model — Modelo da impureza de Anderson
ARPES	Angle-resolved photoemission spectroscopy — Espectroscopia de fotoemissão de ângulo resolvido
BIC	Bound state in the continuum — Estado ligado no contínuo
DOS	Density of states — Densidade de estados
DSM	Dirac semimetal — Semimetal de Dirac
EOM	Equation of Motion — Equação de Movimento
IS	Inversion symmetry — Simetria de inversão
LDOS	Local density of states — Densidade local de estados
SIAM	Single impurity Anderson model — Modelo de Anderson de uma impureza
STM	Scanning tunneling microscope — Microscópio de Varredura por Tunelamento de Elétrons
TB	Tight-binding — Ligação forte
TIAM	Two-Impurity Anderson Model — Modelo de Anderson de duas impurezas
TRS	Time-reversal symmetry — Simetria de reversão temporal
WSM	Weyl semimetal — semimetal de Weyl

Lista de Figuras

1.1	Esquematisação da estrutura de bandas dos materiais: (a) condutor, contendo uma sobreposição entre as bandas de condução e valência; (b) semiconductor, contendo um gap da ordem de 1.0 eV entre as bandas; (c) isolante, contendo um gap muito maior, se comparado com a estrutura de bandas do semiconductor; (d) semimetal, contendo um pequeno gap, chamado pseudogap, entre as bandas de condução e valência.	2
1.2	Esquematisação de poços de potencial e o momento da partícula (esfera azul/ondas vermelhas) movendo no poço para uma energia específica. No caso (a), temos a representação clássica de uma partícula com energia $E < V_1$ aprisionada no poço de potencial. No caso (b), também clássico, temos uma partícula com energia $E > V_2$ movendo-se livremente pelo poço. Já no caso (c), temos a representação quântica de uma partícula para três diferentes energias: $E \leq 0$, a qual permanece presa no poço; $0 < E \leq V_1$, que permanece presa no poço, porém com probabilidade de tunelar a barreira de potencial; e $E > V_2$, que está com energia acima da barreira de potencial, mas a partícula ainda sente a presença do poço de potencial, havendo a possibilidade de ser refletida.	3
1.3	(a) À esquerda, John von Neumann, físico, matemático e cientista computacional húngaro/americano. À direita, Eugene Paul Wigner, físico teórico, matemático e engenheiro húngaro/americano. (b) Representação de um estado ligado no contínuo (BIC), no qual a partícula está localizada longe do poço de potencial (no contínuo), mas ainda presa devido ao potencial do poço (o qual é chamado de estado ligado).	4
1.4	Paul Adrien Maurice Dirac, físico teórico inglês.	5
1.5	Estrutura de banda unidimensional (à esquerda) e bidimensional (à direita) mostrando os níveis de energia do Hamiltoniano de Dirac para diferentes valores de massas m . Observa-se que a inserção do termo de massa no sistema abre um gap de largura $\Delta = 2m$ no nível de fermi ($\varepsilon_F = 0$) [6].	6
2.1	Hermann Klaus Hugo Weyl, matemático, físico teórico e filósofo alemão.	7

2.2	Na extrema esquerda, um gráfico de probabilidade de ocupação dos elétrons na banda dos três semimetais a direita, os quais são: (a) 3D-DSM, com um pseudogap localizado no nível de Fermi ε_F ; (b) Weyl com quebra de IS, no qual ocorre formação de nós de Weyl com mesmo momento \mathbf{k} , porém com energias diferentes ($\pm Q_0$); (c) Weyl com quebra de TRS, contendo nós de Weyl com mesma energia (ε_F), porém com momentos \mathbf{k} diferentes.	8
2.3	Chien-Shiung Wu, física experimental chinesa/estadunidense.	9
2.4	(a) uma representação dos monopolos magnéticos no espaço \mathbf{k} e o arco de Fermi que conecta esses monopolos. (b) uma representação dos cones de Dirac separados por Q , no qual também há uma imagem de detector (em cima) sinalizando a existência de nós de Weyl e os arcos de Fermi conectando esses nós. (c) uma imagem do ARPES, no qual é mostrado a quiralidade dos monopolos magnéticos no espaço \mathbf{k} e o arco de Fermi. [20]	12
3.1	Philip Warren Anderson, físico teórico estadunidense.	13
3.2	Modelo proposto por Anderson, contendo um átomo magnético localizado sobre um hospedeiro metálico. A intensidade da hibridização que garante a interação impureza-hospedeiro é dado pelo parâmetro V . Com isso, Anderson esperava observar se o momento magnético da impureza (esfera laranja) prevalecia na presença de um hospedeiro metálico.	14
3.3	(a) Esquemática de um sistema interagente ($U \neq 0$) constituído por duas impurezas isoladas ($t = 0$) postas sobre um hospedeiro metálico. (b) Do lado esquerdo, tem-se a densidade de estados (DOS) do sistema, apresentando dois picos de Hubbard localizados em ε_d e $\varepsilon_d + U$ e com semi-largura Γ devido a presença do hospedeiro. Do lado direito a representação da banda quadrada do sistema, no qual observa-se um estado abaixo do nível de Fermi ε_F e um segundo estado acima do nível de Fermi, localizados em ε_d e $\varepsilon_d + U$, respectivamente.	15
3.4	(a) Esquemática de um sistema interagente ($U \neq 0$) constituído por duas impurezas não-isoladas ($t \neq 0$) postas sobre um hospedeiro metálico. (b) Do lado esquerdo, tem-se a densidade de estados (DOS) do sistema, apresentando quatro picos, efeito da interação impureza-impureza via termo de hopping t . Do lado direito a representação da banda quadrada do sistema, no qual observa-se dois estado abaixo do nível de Fermi ε_F e dois estados acima do nível de Fermi.	16
4.1	John Hubbard, físico teórico inglês.	23

5.1	(a) Esquema (no espaço real) do modelo teórico, constituído por um duas impurezas no interior do <i>bulk</i> do WSM e uma ponta de STM. Na base, há a representação dos orbitais das duas impurezas medido pelo STM. (b) Esquema (no espaço dos momentos) dos cones de Dirac e Weyl com quebra de TRS, contendo o nível ε_d advindo das impurezas.	24
5.2	Vetores esquematizando a direção do momento \mathbf{k} (ou \mathbf{q}) e as posições de cada elemento do sistema, no qual \mathbf{R}_j e $\mathbf{R}_{\bar{j}}$ são a posição dos sítios onde as impurezas estão localizadas, \mathbf{R}_m representa a posição da ponta do STM, $\mathbf{R}_m - \mathbf{R}_j = \mathbf{R}_{mj}$ ($j = 1$ ou 2) é a posição da ponta do STM referente aos sítios, e $\mathbf{R}_l - \mathbf{R}_m = \mathbf{R}_{lm}$ ($l = 1$ ou 2) é a posição inversa a posição \mathbf{R}_{mj}	30
5.3	Vetores esquematizando a direção do momento \mathbf{k} (ou \mathbf{q}) e suas componentes no eixo x , y e z	31
5.4	Sumarização dos cálculos desenvolvidos desde a GF $\tilde{G}_{d_j\sigma d_{l\sigma}}$ até o fechamento do cálculo em $\tilde{G}_{n_j\bar{\sigma} d_j\sigma d_{l\sigma'}}$. O sinal “ \approx ” representa a utilização da aproximação de campo médio, como explicado na seção 4.3.	38
6.1	Gráficos da DOS e LDOS para o SIAM e TIAM.	39
6.2	Gráficos da <i>DOS</i> (painéis ad), Δ <i>LDOS</i> (painéis be), <i>LDOS</i> (painéis cf), orbitais 2D (painéis gh) e orbitais 3D (painéis ij) das impurezas localizadas em $\mathbf{R}_j = (0, \mp 1, 0)$ no <i>bulk</i> de um 3D-DSM. As colunas (abc) e (def) são para as respectivas posições $\mathbf{R}_m = (0, 0, 1)$ nm e $\mathbf{R}_m = (1, 1, 1)$ nm da ponta de STM, onde também são mostrados o efeito do BIC e seu decaimento, assim como apontado por ref. [2]. Nos painéis (g-j) são mostradas as ligações químicas entre as impurezas do 3D-DSM.	40
6.3	Gráficos da estrutura de bandas de um WSM para diferentes valores de Q_0 , mostrando a quebra de IS cria estados no nível de Fermi ($\varepsilon_F = 0$). Os pontos vermelhos representam os nós de Weyl, no qual para o caso em que a IS é quebrada, eles possuem mesmo momento k , porém energias diferentes.	41
6.4	Gráficos da <i>DOS</i> (painéis ad), Δ <i>LDOS</i> (painéis be) e <i>LDOS</i> (painéis cf) de um WSM com quebra de IS. As colunas (abc) e (def) são, respectivamente, para $Q_0 = 0.1D$ e $Q_0 = 0.3D$. Pode-se verificar que quanto mais se aumenta o valor de Q_0 , ocorre um alargamento dos picos de Hubbard, até o ponto que os dois picos tornam-se um só (abaixo e acima de ε_F), o que caracteriza o sistema como um SIAM. Continuando a aumentar o valor de Q_0 , começa a aparecer estados no nível de Fermi, caracterizando-o como um metal.	42

6.5 Gráfico da DOS (painéis ad), $\Delta LDOS$ (painéis be), $LDOS$ (painéis cf), orbitais bidimensionais (painéis g-j) e orbitais tridimensionais (painéis kl) das impurezas localizadas em $\mathbf{R}_j = (0, \mp 1, 0)$ no *bulk* de um WSM com quebra de TRS. Os painéis (abcgh) e (defijkl) são para $\mathbf{Q} = Q_x = (10^{-2}, 0, 0)$ e $\mathbf{Q} = Q_z = (0, 0, 10^{-2})$, respectivamente. 43

6.6 Gráficos dos orbitais ligantes para a ligação π de um WSM com quebra de TRS, no qual o painel (a) é para o caso $\mathbf{Q} = Q_x$ e (b) para $\mathbf{Q} = Q_z$. Em cada gráfico, na parte superior há a representação tridimensional do orbital e na parte inferior (na “sombra” do orbital) a representação bidimensional do que a ponta de STM observa. 44

Sumário

1	INTRODUÇÃO	1
1.1	Estados Ligados no Contínuo (BICs)	3
1.2	Semimetal de Dirac (DSM)	5
2	SEMIMETAL DE WEYL (WSM)	7
2.1	Simetria de Reversão Temporal (TRS)	9
2.2	Pesquisas Experimentais	11
3	MODELO DE ANDERSON	13
3.1	Modelo de Anderson de duas Impurezas (TIAM)	14
3.2	Modelo <i>tight-binding</i> para duas impurezas	16
4	FORMALISMO MATEMÁTICO	18
4.1	Funções de Green (GF)	18
4.2	Equação de Movimento (EOM)	20
4.3	Aproximação Hubbard I	23
5	MODELO TEÓRICO	24
5.1	Hamiltoniano do sistema WSM-impurezas-STM	25
5.2	Densidade Local de Estados (LDOS)	27
5.3	Auto-energias	29
5.3.1	Auto-energia $\Sigma_{z\sigma}(\varepsilon, \mathbf{R})$ para $\mathbf{R} \neq 0$	32
5.3.2	Auto-energia $\Sigma_{z\sigma}(\varepsilon, \mathbf{R})$ para $\mathbf{R} = 0$	35
5.4	Função de Green das impurezas	35
6	RESULTADOS E DISCUSSÃO	39
7	CONCLUSÕES	45
A	Weyl Full Project 2018	49
A.1	Effective Hamiltonian	49
A.2	Local Density of State (LDOS)	52

A.2.1	DOS $\rho_0(\varepsilon)$ evaluation	58
A.3	Conclusions for $U_j = 0$	59
A.4	Green's Functions for $U_j \neq 0$	60
A.4.1	Calculation of $\tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\sigma}d_{l\sigma'}}(\varepsilon)$	60
A.4.2	Calculating of $\tilde{\mathcal{G}}_{n_{j\bar{\sigma}}d_{j\sigma}d_{l\sigma}}(\varepsilon)$	66
A.4.3	Calculation of $\tilde{\mathcal{G}}_{n_{j\bar{\sigma}}c_{k\chi\sigma}d_{l\sigma'}}(\varepsilon)$	77
A.4.3.1	Calculation of $\tilde{\mathcal{G}}_{n_{j\sigma}c_{k\chi\sigma}d_{l\sigma'}}(\varepsilon)$	88
A.4.3.2	Grouping the $\tilde{\mathcal{G}}_{n_{j\bar{\sigma}}c_{k\chi\sigma}d_{l\sigma'}}(\varepsilon)$	99
A.4.4	Grouping Terms of $\tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\sigma}d_{l\sigma'}}(\varepsilon)$ for $U_j \neq 0$	102

Capítulo 1

INTRODUÇÃO

Na física da matéria condensada, as energias possíveis dos elétrons em um sólido, estão agrupadas em bandas. Dentre essas bandas, podemos destacar aquelas mais profundas, completamente ocupadas por elétrons, chamadas de banda de valência. Já as bandas vazias ou parcialmente preenchidas são chamadas de banda de condução. Ao explicitarmos a relação entre energia e momento desses elétrons no material, é possível obtermos estruturas características para cada tipo de material.

Na Fig. 1.1, podemos observar a representação das estruturas de bandas respectivas para os materiais metal, semicondutor, isolante e semimetal. Para os metais, observa-se uma sobreposição entre as bandas de condução e valência, o que facilita a presença de elétrons livres nesse material. Já para os semicondutores, observa-se, entre as bandas de condução e valência, a presença de um gap na ordem de 3.2 eV , caracterizando uma zona proibida, a qual não é possível encontrar elétrons com aquele determinado nível de energia no material. Neste caso, para excitarmos elétrons da banda de valência para a banda de condução, é necessário fornecer uma quantidade de energia igual ou superior a do gap entre as bandas. Para os isolantes, observa-se um gap entre as bandas valência e condução muito maior, se comparado com os semicondutores, dificultando ainda mais a excitação de elétrons de uma banda para a outra. Para os semimetais, observa-se a presença de um pseudogap entre as bandas de condução e valência, resultando em propriedades características que são o foco desta dissertação.

O progresso na preparação de materiais e técnicas experimentais despertou o interesse em materiais de Dirac bidimensionais (2D) tais como grafeno e estados de superfície de isolantes topológicos. Recentemente, esta concepção é estendida para sistemas 3D, conhecidos como semimetais de Dirac (do inglês, *DSM: Dirac semimetal*), os quais possuem *bulk* (recheio) análogo ao grafeno como um novo estado topológico da matéria [1].

Semimetais de Dirac tridimensionais (do inglês, *3D-DSM: Three-dimensional Dirac Semimetal*) representam uma nova classe de materiais funcionais. A estrutura de bandas de um semimetal 3D contém o conjunto dos chamados pontos de Dirac, no qual a massa efetiva e o ponto onde as bandas de valência e condução se tocam é zero. Ao redor destes pontos a dispersão das quasipartículas correspondem àquelas partículas de Dirac no qual resultam em uma

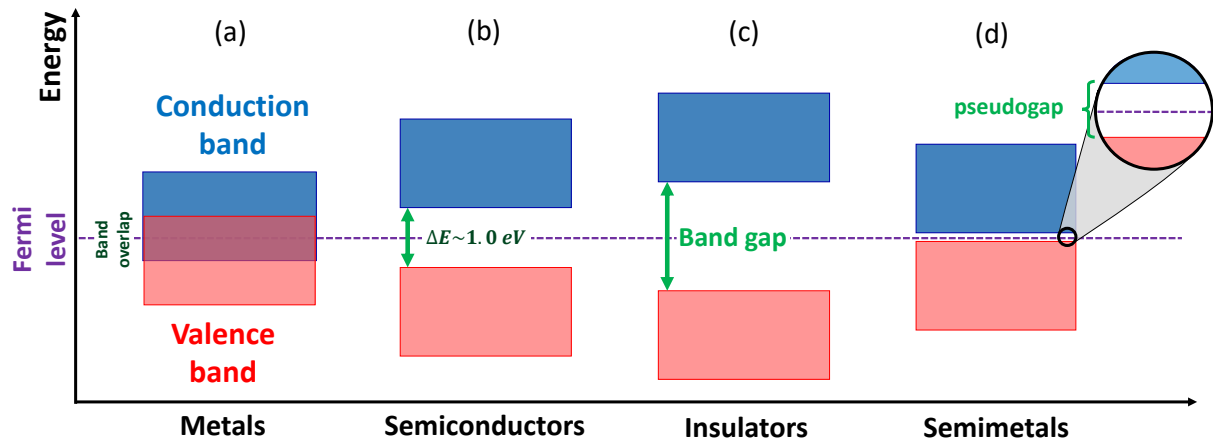


Figura 1.1: Esquematização da estrutura de bandas dos materiais: (a) condutor, contendo uma sobreposição entre as bandas de condução e valência; (b) semicondutor, contendo um gap da ordem de 1.0 eV entre as bandas; (c) isolante, contendo um gap muito maior, se comparado com a estrutura de bandas do semicondutor; (d) semimetal, contendo um pequeno gap, chamado pseudogap, entre as bandas de condução e valência.

série de propriedades não usuais destes materiais [2].

Experimentos recentes tem identificado uma classe de materiais como arseneto de cádmio (Cd_3As_2), Na_3Bi e $(\text{Bi}_{1-x}\text{In}_x)_2\text{Se}_3$ como sendo DSMs. Nestes novos materiais de Dirac, férmions de Dirac são excitados ao redor dos cones de Dirac duplamente degenerados, no qual são protegidos por simetria de reversão temporal (do inglês, *TRS: time-reversal symmetry*) e simetria de inversão (do inglês, *IS: inversion symmetry*) [1].

Quebrando a TRS ou a IS irá levar os DSMs a uma fase do semimetal de Weyl (do inglês, *WSM: Weyl semimetal*), que se manifesta como uma divisão de um par de nós de Weyl degenerados com quiralidade oposta no espaço dos momentos. Como uma nova fase topológica não trivial, esses férmions sem massa do WSM estão atraindo grande interesse por sua importância científica e tecnológica. Os estados dos férmions do WSM foram previstos teoricamente e observados experimentalmente em uma família dos metais de transição monossídeos não-centrossimétricos com a preservação da TRS, como por exemplo o TaAs (arsenieto de tântalo), NbAs (arsenieto de nióbio), NbP (fosfeto de nióbio) e TaP (fosfeto de tântalo).

Neste contexto, o microscópio de varredura por tunelamento (do inglês, *STM: scanning tunneling microscope*) é reconhecido como a ferramenta mais eficiente para medidas de densidade local de estados (do inglês, *LDOS: local density of states*) de sistemas bidimensionais [3]. Curiosamente, a LDOS é governada pelo efeito de interferência Fano [4] entre o tunelamento direto da ponta de STM para o hospedeiro e o tunelamento via impureza, ou seja, tunelamento hospedeiro-impureza-STM.

Para tanto, organizamos esta monografia da seguinte forma:

- No Capítulo 2 faremos uma introdução ao semimetal de Weyl e falaremos sobre a quebra de simetria de reversão temporal.

- No Capítulo 3 faremos uma introdução ao modelo de Anderson e seu regime, que é a base da teórica desta dissertação.
- No Capítulo 4 abordaremos os conceitos matemáticos necessários para compreender o desenvolvimento dos cálculos usados nesta tese.
- No Capítulo 5 apresentamos a descrição do Hamiltoniano em segunda quantização do sistema WSM-impurezas-STM, os cálculos da LDOS e os cálculos da auto-energias.
- No Capítulo 6 apresentamos os resultados e discutimos os dados obtidos.
- No Capítulo 7 é feita a conclusão dos resultados e os efeitos que ocorreram.

Mas primeiro, faremos uma breve introdução de outros conceitos utilizados nesta tese.

1.1 Estados Ligados no Contínuo (BICs)

Na física clássica, considerando energias conservativas em um poço de potencial com barreiras de potencial V_1 e V_2 , assim como representado na Fig. 1.2, uma partícula localizada dentro do poço, com energia menor do que a barreira de potencial ($E < V_1$), fica presa dentro do poço de potencial em um movimento oscilatório, como representado na Fig. 1.2(a). Já no caso em que a energia da partícula é maior do que os poços ($E > V_2$), Fig. 1.2(b), temos a representação de uma partícula livre que se move de $\pm\infty$ para o $\mp\infty$, passando pelo poço sem ficar presa entre as barreiras de potencial.

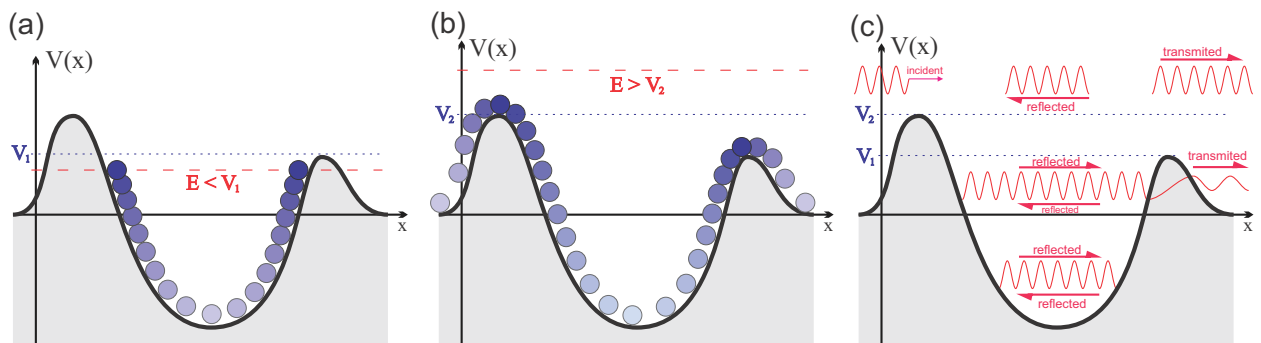


Figura 1.2: Esquemática de poços de potencial e o momento da partícula (esfera azul/ondas vermelhas) movendo no poço para uma energia específica. No caso (a), temos a representação clássica de uma partícula com energia $E < V_1$ aprisionada no poço de potencial. No caso (b), também clássico, temos uma partícula com energia $E > V_2$ movendo-se livremente pelo poço. Já no caso (c), temos a representação quântica de uma partícula para três diferentes energias: $E \leq 0$, a qual permanece presa no poço; $0 < E \leq V_1$, que permanece presa no poço, porém com probabilidade de tunelar a barreira de potencial; e $E > V_2$, que está com energia acima da barreira de potencial, mas a partícula ainda sente a presença do poço de potencial, havendo a possibilidade de ser refletida.

No caso quântico, representado na Fig. 1.2(c), em que descrevemos as partículas como ondas, temos um análogo ao caso clássico para uma partícula que possui energia $E \leq 0$, no qual aqui a partícula também fica presa dentro do poço de potencial, sendo refletida eternamente nas barreiras de potencial. A situação muda para o caso da partícula com energia $0 < E \leq V_1$, onde a partícula também é refletida pela barreira de potencial, porém há a probabilidade da partícula tunelar a barreira de potencial continuando o seu trajeto para $\pm\infty$. Outra situação que também difere do caso clássico é o de uma partícula com energia $E > V_2$, no qual a partícula mesmo tendo energia acima das barreiras do poço, ainda sofre influência do potencial do poço, tendo a probabilidade de ser refletida ou de tunelar o potencial do poço e continuar o seu trajeto para $\pm\infty$. A única forma de tornar essa partícula livre, é levando esta partícula para uma posição longe do potencial, ou seja, em $x \rightarrow \infty$.

Vale frisar que no caso em $0 < E \leq V_1$, no qual a partícula tunela o poço, ela perde energia nesse caminho e é transmitida com energia abaixo da energia inicial em que se encontrava presa no poço. Já no caso $E > V_2$, ao tunelar o potencial do poço ela não perde energia nesse processo e é transmitida com energia igual a energia na sua emissão.

Entretanto em 1929 von Neumann e Wigner [8, 9] resolveram a equação de Schrödinger para encontrar uma classe de potenciais e levaram uma partícula para longe desse potencial ($x \rightarrow \infty$). Neste caso, era esperado que a função de onda dessa partícula fosse não quadrado integrável, ou seja, o que descreveria uma função de onda de uma partícula livre. Porém, mesmo para essa classe de potenciais eles ainda conseguiam uma solução quadrado integrável para a função de onda, o que descreve o caso de uma partícula ligada ao potencial. Ou seja, mesmo no contínuo em $x \rightarrow \infty$ a partícula ainda encontra-se presa no potencial. Sendo assim, esse fenômeno ficou conhecido como estado ligado no contínuo (do inglês, *BIC: Bound states in the continuum*).

Este fenômeno que aparece na física quântica fundamental, também aparece na física da matéria condensada, que será mostrado nos resultados desta monografia.

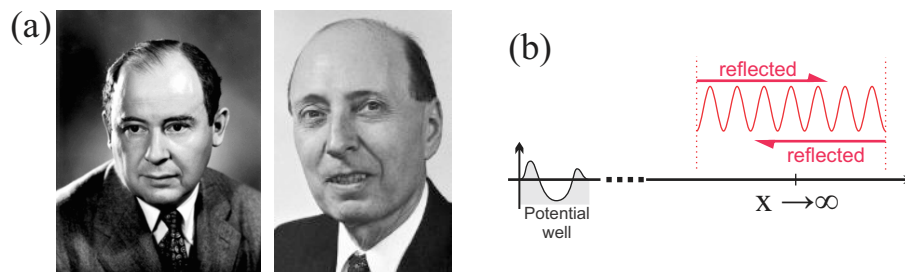


Figura 1.3: (a) À esquerda, John von Neumann, físico, matemático e cientista computacional húngaro/americano. À direita, Eugene Paul Wigner, físico teórico, matemático e engenheiro húngaro/americano. (b) Representação de um estado ligado no contínuo (BIC), no qual a partícula está localizada longe do poço de potencial (no contínuo), mas ainda presa devido ao potencial do poço (o qual é chamado de estado ligado).

1.2 Semimetal de Dirac (DSM)

Em 1928, Paul Dirac (Fig. 1.4) na tentativa de linearizar a equação de Schrödinger, que descreve a mecânica quântica não-relativística, propôs um método para descrever partículas relativísticas, publicando a sua famosa equação [10], que na sua forma original é dada pela expressão [11]

$$\left[\beta mc^2 + c \left(\sum_{n=1}^3 \alpha_n p_n \right) \right] \psi(x, t) = i\hbar \frac{\partial \psi(x, t)}{\partial t}, \quad (1.1)$$

no qual, c é a velocidade da luz e m , p_n e $\psi(x, t)$ representam a massa, o momento e a função de onda da partícula relativística, respectivamente. Os termos α_n e β são matrizes 4×4 que obedecem a operação de anticomutação fermiônica [6]

$$\begin{cases} [\alpha_n, \alpha_m]_+ = \delta_{nm} & \text{p/ } n, m = 1, 2, 3 \\ [\alpha_n, \beta]_+ = 0 & \text{p/ } n = 1, 2, 3 \end{cases}, \quad (1.2)$$

além do fato de serem Hermitianos, obedecendo a relação $\alpha_n^2 = \beta^2 = \mathbb{I}$, no qual \mathbb{I} é a matriz identidade [11]. Tais expressões são importantes para resolver a equação de Dirac e encontrar as matrizes α_n e β .

A equação de Dirac possui várias soluções, e foi dessas soluções que outros físicos previram outras partículas relativísticas como por exemplo os férmions relativísticos usuais, a partícula de Majorana (previstos por Ettore Majorana a partir de uma solução real da equação de Dirac), a partícula de Weyl (previstos por Hermann Weyl), além do grafeno, que é descrito pela solução bidimensional da Equação de Dirac. Em casos específicos de materiais com dispersão relativística, é possível observar essas partículas resultantes da equação de Dirac. Um desses materiais é o semimetal de Dirac, o qual encontram-se os férmions de Dirac, que são descritos pelo Hamiltoniano [6]

$$\mathcal{H} = \mathbf{p} \cdot \boldsymbol{\alpha} + m\beta. \quad (1.3)$$

no qual, $\mathbf{p} = (p_x, p_y, p_z)$ é vetor momento, m representa a massa dos férmions de Dirac.

Aplicando $E\Psi = \mathcal{H}\Psi$, que relaciona energia e o Hamiltoniano do sistema, pode-se encontrar uma expressão para a energia dos férmions de Dirac, dada por [6]

$$E = \pm \sqrt{\mathbf{p}^2 + m^2}. \quad (1.4)$$

Plotando um gráfico de energia por momento, assim como em Fig. 1.5, é possível observar que para $m = 0$ a estrutura de bandas apresentada é a de um semimetal, o qual as bandas de valência ($E < \varepsilon_F$) e condução ($E > \varepsilon_F$) interceptam-se em um único ponto no nível de Fermi

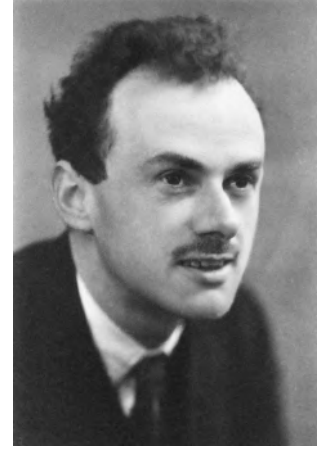


Figura 1.4: Paul Adrien Maurice Dirac, físico teórico inglês.

FONTE: [Nobelprize.org](https://www.nobelprize.org)

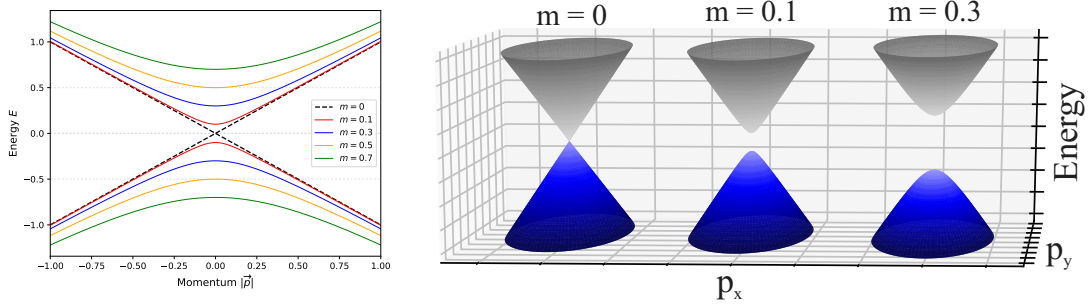


Figura 1.5: Estrutura de banda unidimensional (à esquerda) e bidimensional (à direita) mostrando os níveis de energia do Hamiltoniano de Dirac para diferentes valores de massas m . Observa-se que a inserção do termo de massa no sistema abre um gap de largura $\Delta = 2m$ no nível de Fermi ($\varepsilon_F = 0$) [6].

($E = \varepsilon_F = 0$). Além disso, é possível observar que para $m \neq 0$, surge um gap de largura $\Delta = 2m$ entre as bandas de valência e condução. É importante ressaltar que tal comportamento já foi observado experimentalmente em materiais como o grafeno [12].

Esse momento memorável da física teórica, levou a uma nova compreensão do conceito de spin, previu a existência da antimatéria e foi a invenção da própria teoria quântica de campos. Além disso, nos anos posteriores, vários cientistas publicaram outras variações da equação de Dirac, sendo uma dessas variações proposta por Hermann Weyl para descrever férmions sem massa com quiralidade específica, o que em sua fase 3D da matéria da física de baixa energia é convencionalmente chamados de semimetal de Weyl.

Capítulo 2

SEMIMETAL DE WEYL (WSM)

Introduzido em 1929, um ano depois da publicação da equação de Dirac [10] envolvendo matrizes complexas 4×4 , Hermann Weyl (Fig. 2.1) simplificou a equação Dirac utilizando apenas matrizes complexas 2×2 , chamadas de matrizes de Pauli (σ_n). Com tal simplificação, Weyl propôs descrever o comportamento quiral e sem massa de uma partícula, hoje conhecida como férmion de Weyl, para provar esse mesmo comportamento nos neutrinos. Por muito tempo se acreditou que neutrinos poderiam ser férmions de Weyl. Porém, de acordo com ref. [13], com a recente descoberta dos *nonvanishing neutrino mass*, atualmente, não há uma partícula fundamental que apresente o comportamento classificado por Weyl, em outras palavras, não há um análogo aos férmions de Weyl na física de partículas, mas essas quasipartículas são encontradas na física de materiais.



Figura 2.1: Hermann Klaus Hugo Weyl, matemático, físico teórico e filósofo alemão.

FONTE: [Stanford.edu](https://www.stanford.edu)

De forma geral, um semimetal de Weyl pode ser considerado uma forma tridimensional do grafeno. É essa terceira dimensão que dá ao WSM propriedades específicas, como os pontos (ou nós) de Weyl que são *pseudogaps* no espectro da estrutura de bandas que podem ser separados dando origem a nós de quiralidade oposta. Esses nós de Weyl são considerados protegidos contra pequenas perturbações e desordens.

Uma das formas de separar os cones de Weyl é pela adição de termos ao Hamiltoniano de Weyl, que diferente do grafeno não abrem um gap na estrutura de banda dos cones, mas sim movem/separam os cones em diferentes direções.

Nesta dissertação, adicionaremos um termo de energia (Q_0) e um termo de campo magnético (Q) no Hamiltoniano de um único cone de Weyl isotrópico. A adição desses termos está diretamente ligada com a quebra da simetria de inversão (IS) e a simetria de reversão temporal (TRS), o que por sua vez também está ligada com a separação dos nós de Weyl. Esta separação dos nós de Weyl pode ser observada na estrutura de bandas dos cones, como representado na Fig. 2.2.

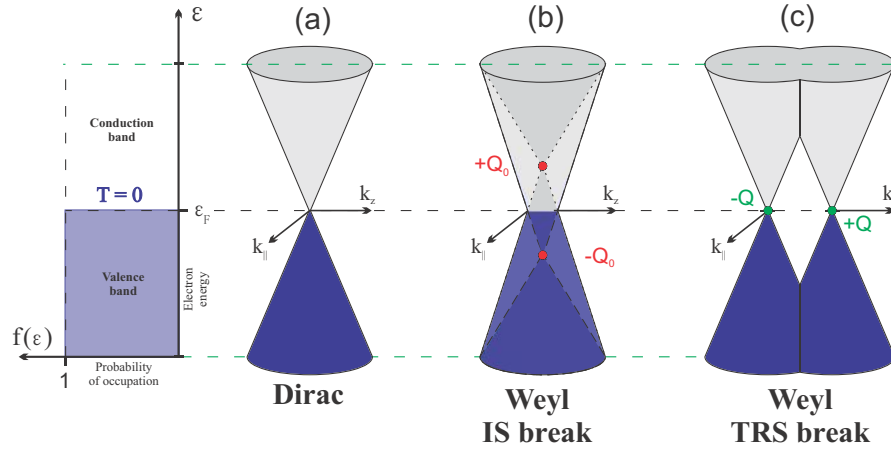


Figura 2.2: Na extrema esquerda, um gráfico de probabilidade de ocupação dos elétrons na banda dos três semimetais a direita, os quais são: (a) 3D-DSM, com um pseudogap localizado no nível de Fermi ε_F ; (b) Weyl com quebra de IS, no qual ocorre formação de nós de Weyl com mesmo momento \mathbf{k} , porém com energias diferentes ($\pm Q_0$); (c) Weyl com quebra de TRS, contendo nós de Weyl com mesma energia (ε_F), porém com momentos \mathbf{k} diferentes.

De acordo com Ref. [2, 15], o Hamiltoniano de um único cone de Weyl não degenerado pode ser descrito como

$$\mathcal{H} = \hbar\nu_F\chi\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{k}, \quad (2.1)$$

no qual, $\hbar \equiv 1$ é a constante de Plank, ν_F representa a velocidade de Fermi, $\chi = \pm$ é a quiralidade, $\boldsymbol{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$ representa as Matrizes de Pauli e \mathbf{k} o momento do férmion. Ao observar o espectro na estrutura de bandas no espaço k gerado pelo Hamiltoniano de Weyl da eq. 2.1, o resultado são dois cones idênticos a um cone de Dirac no grafeno e no semimetal de Dirac 3D.

É importante enfatizar que a quiralidade está diretamente ligada com a helicidade, quantidade esta que caracteriza uma quantidade partículas sem massa. A helicidade é determinada como a projeção do spin vetor \mathbf{s} na direção do momento da partícula [6]

$$\chi = \frac{\mathbf{p}\cdot\mathbf{s}}{|\mathbf{p}||\mathbf{s}|}. \quad (2.2)$$

Tal expressão é o que garante o valor ± 1 para a quiralidade, no qual $+1$ representa um férmion com spin vetor alinhado ao longo do momento, e -1 representa esse mesmo férmion entretanto com vetor de spin oposto.

Adicionando um termo de energia Q_0 na eq. 2.1, o Hamiltoniano de Weyl pode ser escrito como [1, 5]

$$\mathcal{H} = \chi(\hbar\nu_F\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{k} + \sigma_0Q_0), \quad (2.3)$$

o que quebra a IS e faz com que os nós de Weyl separem-se e posicionem em $\pm Q_0$, assim como representado na Fig. 2.2 para o caso *Weyl IS break*.

Adicionando um termo magnético na eq. 2.1, o Hamiltoniano de Weyl pode ser escrito como [1, 5]

$$\mathcal{H} = \chi \hbar \nu_F \boldsymbol{\sigma} \cdot (\mathbf{k} - \chi \mathbf{Q}) \quad (2.4)$$

no qual, \mathbf{Q} quantifica a separação dos nós de Weyl no espaço dos momentos e pode ser escritos em termos da carga $q > 0$ e do potencial vetor \mathbf{A} , sendo $\mathbf{Q} = q\mathbf{A}$ [15]. A adição deste termo no Hamiltoniano de Weyl quebra a TRS e resulta na separação dos cones na direção \mathbf{k} , assim como representado na Fig. 2.2 para o caso *Weyl TRS break*.

2.1 Simetria de Reversão Temporal (TRS)

Na década de 1950, pensava-se que todas as partículas fundamentais obedeciam as três grandes simetrias da física de partículas chamadas: simetria de carga, simetria de paridade e simetria temporal, conhecidas também pelas respectivas siglas \mathcal{C} , \mathcal{P} e \mathcal{T} . Até que, em 1956, T. D. Lee e C. N. Yang [16] publicaram um artigo apontando que forças nucleares fracas poderiam quebrar a simetria de paridade e que tal simetria nunca havia sido testada experimentalmente para esse tipo de sistema.

Em 1957, C. S. Wu (Fig. 2.3) e uma equipe de cientistas [17], realizaram um experimento que consistia em esfriar átomos radioativos de cobalto-60 a baixas temperaturas e aplicar um campo magnético forte para alinhar a rotação dos núcleos na mesma direção e analisar o decaimento via força nuclear fraca, emitindo uma partícula beta (elétron), produzindo Níquel-60. O experimento então verificou que emissão de elétrons do cobalto-60 era paralela ao eixo de rotação do núcleo, tendo uma direção de emissão preferencial. Tal propriedade quebrava a simetria de paridade do sistema, assim como previsto por Lee e Yang, rendendo a eles o prêmio Nobel em 1957. Após esse episódio, outros experimentos foram feitos, provando que além da simetria de paridade, também é possível quebrar as outras simetrias. Entretanto, até o momento nenhum experimento feito conseguiu quebrar as três simetrias juntas.

Basicamente, a simetria de reversão temporal é um análogo a conservação da entropia [18]. Assim como a segunda lei da termodinâmica não permite que a entropia seja conservada no geral, afirmando que o universo observável não mostra simetria ao se reverter o tempo. Em outras palavras, o tempo é não simétrico, ou assimétrico, exceto em casos especiais de equilíbrio de estados, quando a segunda lei da termodinâmica prevê a simetria de tempo. Entretanto, é previsto que na quântica, mesmo em medições não invasivas, ocorra violação da simetria temporal mesmo em equilíbrio, ao contrário de sua contraparte clássica.

De acordo com [19], se um sistema preserva a simetria de reversão temporal, ele precisa de



Figura 2.3: Chien-Shiung Wu, física experimental chinesa/estadunidense.

FONTE: [Stanford.edu](https://www.stanford.edu)

satisfazer a seguinte relação,

$$h_\chi(-\mathbf{k}) = \sigma_y h_\chi^*(\mathbf{k}) \sigma_y \quad (2.5)$$

no qual, o sinal * representa o complexo conjugado da matriz $h_\chi(\mathbf{k})$, que representa o Hamiltoniano do *bulk* de um WSM, o qual pode ser expresso como (eq. A.9)

$$h_\chi(\mathbf{k}) = \chi \begin{pmatrix} k_{z+}^\chi & k_-^\chi \\ k_+^\chi & -k_{z-}^\chi \end{pmatrix} \quad (2.6)$$

no qual,

$$\begin{cases} \mathbf{k}^\chi = \mathbf{k} - \chi \mathbf{Q} \\ k_\pm^\chi = \hbar v_F (k_x^\chi \pm i k_y^\chi) \\ k_{z\pm}^\chi = \hbar v_F k_z^\chi \pm Q_0 \end{cases} \quad (2.7)$$

Começando por $h_\chi(-\mathbf{k})$, usando eq. 2.6 e eq. 2.7

$$\begin{aligned} h_\chi(\mathbf{k}) &= \chi \begin{pmatrix} k_{z+}^\chi & k_-^\chi \\ k_+^\chi & -k_{z-}^\chi \end{pmatrix} \\ &= \chi \begin{pmatrix} k_z^\chi + Q_0 & (k_x^\chi - i k_y^\chi) \\ (k_x^\chi + i k_y^\chi) & -(k_z^\chi - Q_0) \end{pmatrix} \\ &= \chi \begin{pmatrix} (k_z - \chi Q_z) + Q_0 & (k_x - \chi Q_x) - i(k_y - \chi Q_y) \\ (k_x - \chi Q_x) + i(k_y - \chi Q_y) & -(k_z - \chi Q_z) + Q_0 \end{pmatrix} \\ h_\chi(-\mathbf{k}) &= \chi \begin{pmatrix} (-k_z - \chi Q_z) + Q_0 & (-k_x - \chi Q_x) - i(-k_y - \chi Q_y) \\ (-k_x - \chi Q_x) + i(-k_y - \chi Q_y) & -(-k_z - \chi Q_z) + Q_0 \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (2.8)$$

Portanto,

$$\boxed{h_\chi(-\mathbf{k}) = \chi \begin{pmatrix} -(k_z - Q_0) - \chi Q_z & -(k_x + i k_y) - \chi(Q_x - i Q_y) \\ -(k_x + i k_y) - \chi(Q_x + i Q_y) & (k_z + Q_0) + \chi Q_z \end{pmatrix}} \quad (2.9)$$

Agora, calculando $\sigma_y h_\chi^*(\mathbf{k}) \sigma_y$, precisamos primeiro determinar o conjugado transposto da matriz $h_\chi(\mathbf{k})$. Assim,

$$\bar{h}_\chi = \chi \begin{pmatrix} k_{z+}^\chi & k_+^\chi \\ k_-^\chi & -k_{z-}^\chi \end{pmatrix} \quad (2.10)$$

$$\bar{h}_\chi^T = h_\chi^* = \chi \begin{pmatrix} k_{z+}^\chi & k_-^\chi \\ k_+^\chi & -k_{z-}^\chi \end{pmatrix}. \quad (2.11)$$

Observe que para o nosso caso, $h_\chi^* = h_\chi$. Agora, aplicando a matriz de Pauli,

$$\begin{aligned}
\sigma_y h_\chi^*(\mathbf{k}) \sigma_y &= \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \cdot \chi \begin{pmatrix} k_{z+}^\chi & k_-^\chi \\ k_+^\chi & -k_{z-}^\chi \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \\
&= \chi \begin{pmatrix} -ik_+^\chi & ik_{z-}^\chi \\ ik_{z+}^\chi & ik_-^\chi \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \\
&= \chi \begin{pmatrix} -k_{z-}^\chi & -k_+^\chi \\ -k_-^\chi & k_{z+}^\chi \end{pmatrix}, \tag{2.12}
\end{aligned}$$

no qual assumindo $\hbar\nu_F = 1$ e usando os parâmetros em eq. 2.7,

$$\sigma_y h_\chi^*(\mathbf{k}) \sigma_y = \chi \begin{pmatrix} -(k_z - Q_0) + \chi Q_z & -(k_x + ik_y) - \chi(Q_x - iQ_y) \\ -(k_x + ik_y) + \chi(Q_x - iQ_y) & (k_z + Q_0) - \chi Q_z \end{pmatrix} \tag{2.13}$$

Comparando cada termo da eq. 2.13 com os termos da eq. 2.9, temos

$$\begin{aligned}
&-(k_z - Q_0) + \chi Q_z \neq -(k_z - Q_0) - \chi Q_z \\
&-(k_x + ik_y) - \chi(Q_x - iQ_y) = -(k_x + ik_y) - \chi(Q_x - iQ_y) \\
&-(k_x + ik_y) + \chi(Q_x - iQ_y) \neq -(k_x + ik_y) - \chi(Q_x + iQ_y) \\
&(k_z + Q_0) - \chi Q_z \neq (k_z + Q_0) + \chi Q_z
\end{aligned} \tag{2.14}$$

Observe que se $\mathbf{Q} = 0$ as matrizes possuem simetria, o que preservaria a TRS do sistema. Entretanto, como $h_\chi(-\mathbf{k}) \neq \sigma_y h_\chi(\mathbf{k})^* \sigma_y$ nós dizemos que houve quebra na simetria de reversão temporal.

2.2 Pesquisas Experimentais

Até o momento, falamos sobre os estudos, no que diz respeito ao âmbito teórico, dos WSMs, no qual iniciou-se com Harmann Weyl em 1929, e posteriormente houve um grande impulso ao observar a presença dos férmions de Weyl em semimetais, iniciando também uma tentativa de sintetizar esse semimetal para pesquisas experimentais.

Assim, após tentativas de diversos grupos de pesquisa em obter um WSM em laboratório, um grupo de pesquisa do *Laboratory for Topological Quantum Matter and Spectroscopy* da universidade de Princeton, comandados por Su-Yang Xu e M. Zahid Hasan, com participação de outros cientistas, conseguiu pela primeira vez em 2015, sintetizar um WSM, o arseneto de tântalo (TaAs), obtendo observações experimentais dos nós de Weyl e dos arcos de Fermi, como mostrado em Fig. 2.4, que são a marca do WSM. Estas observações por meio de um espectroscópio ARPES (do inglês, *Angle-resolved photoemission spectroscopy*). Esta descoberta garantiu ao grupo a publicação na revista científica *Science*, que está disponível em *Science*

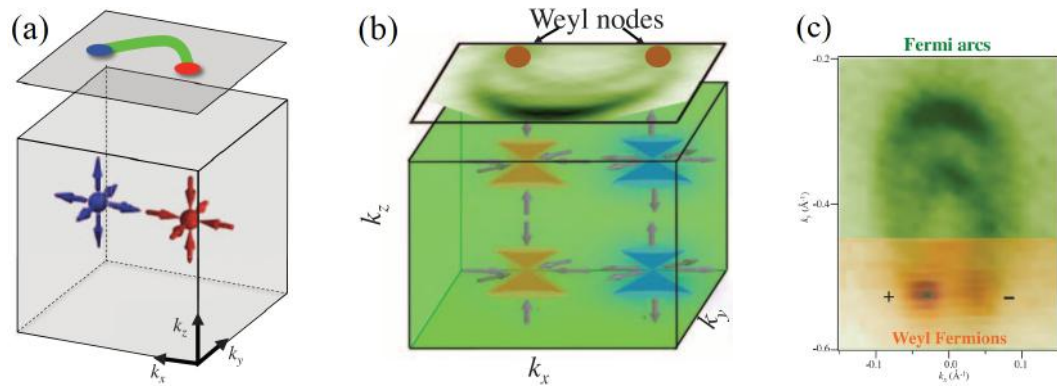


Figura 2.4: (a) uma representação dos monopolos magnéticos no espaço \mathbf{k} e o arco de Fermi que conecta esses monopolos. (b) uma representação dos cones de Dirac separados por Q , no qual também há uma imagem de detector (em cima) sinalizando a existência de nós de Weyl e os arcos de Fermi conectando esses nós. (c) uma imagem do ARPES, no qual é mostrado a quiralidade dos monopolos magnéticos no espaço \mathbf{k} e o arco de Fermi. [20]

349 (6248): 613–617 (2015) [20].

É importante frisar que os semimetais de Weyl ainda estão sendo amplamente estudados por diversos grupos experimentais e teóricos, com o objetivo de compreender seus efeitos que são exóticos se comparado com outros materiais. Por isso, as pesquisas sobre tais fenômenos em WSM vem rendendo várias publicações ano após ano.

Capítulo 3

MODELO DE ANDERSON

Uma impureza magnética é um átomo que apresenta os orbitais d ou f incompletos. Estas impurezas magnéticas diluídas (em concentrações menores que um por cento) em metais não magnéticos podem originar momentos magnéticos locais. Tal efeito acontece porque, em certo regime, o orbital da impureza é ocupado por apenas um elétron, produzindo um desemparelhamento de momento magnético devido a orientação de spin. Até o início da década de 1960 experimentos já haviam mostrado o aparecimento destes momentos magnéticos locais (por exemplo, átomos de Cobalto adsorvidos por uma superfície de Cobre).

A teoria de bandas usual é incapaz de descrever adequadamente os sistemas metálicos com impurezas magnéticas diluídas. Em geral, as energias dos estados localizados estão no interior da banda de condução do metal hospedeiro e a teoria de um elétron não é capaz de descrever a localização do estado da impureza. Para resolver essa dificuldade teórica, P. W. Anderson (Fig. 3.1) [21] supôs que a existência de momentos localizados em metais, se originava da correlação Coulombiana U entre elétrons das camadas internas da impureza magnética. Com esta hipótese central, propôs um modelo, chamado de modelo da impureza de Anderson (do inglês, *AIM: Anderson Impurity Model*) que incluía, desde o início, a correlação entre elétrons no mesmo sítio.

Entretanto, foi apenas em 1961 que Anderson apresentou o primeiro modelo que descrevia momentos magnéticos localizados em metais. No seu modelo [21], como esquematizado na Fig. 3.2, Anderson descreveu a impureza magnética como apenas um estado localizado, inferindo que apenas os orbitais mais externos participam de processos de transporte de carga. Ademais, o modelo considera a repulsão de Coulomb entre os elétrons de spins opostos que podem ocupar o nível da impureza. E é exatamente esta interação que torna este modelo especial.

É importante também ressaltar que a grande contribuição dada por Anderson ao propor o



Figura 3.1: Philip Warren Anderson, físico teórico estadunidense.

FONTE: [Encyclopædia Britannica](#)

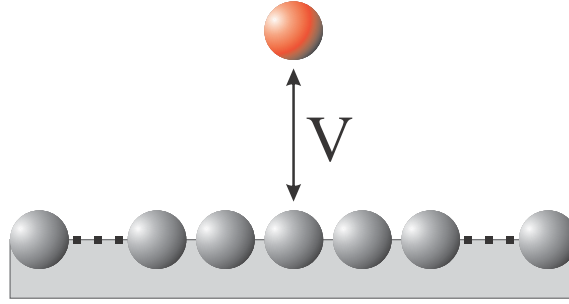


Figura 3.2: Modelo proposto por Anderson, contendo um átomo magnético localizado sobre um hospedeiro metálico. A intensidade da hibridização que garante a interação impureza-hospedeiro é dado pelo parâmetro V . Com isso, Anderson esperava observar se o momento magnético da impureza (esfera laranja) prevalecia na presença de um hospedeiro metálico.

seu modelo está relacionada com a descrição do Hamiltoniano do sistema como uma soma de Hamiltonianos, cujo cada termo vem dos elementos contidos no seu sistema e a interação entre esses elementos. Sendo assim, este capítulo é destinado a explicação do Hamiltoniano de Anderson para o caso específico contendo duas impurezas.

3.1 Modelo de Anderson de duas Impurezas (TIAM)

Na Fig. 3.3(a) temos um sistema interagente, ou seja, com potencial de Coulomb U finito, com dois átomos isolados, significando que não há *hopping* t (este termo será melhor discutido na Seção 3.2) entre os átomos, localizados sobre um hospedeiro metálico. De acordo com o modelo de Anderson e a ref. [27], o modelo de Anderson de duas impurezas (*TIAM: Two-Impurity Anderson Model*) pode ser expresso pelo Hamiltoniano

$$\mathcal{H}_{TIAM} = \mathcal{H}_{hosp} + \mathcal{H}_{imp} + \mathcal{H}_{hib}. \quad (3.1)$$

O Hamiltoniano do hospedeiro \mathcal{H}_{hosp} representa o energia não perturbada do sistema de elétrons livres. Em segunda quantização, \mathcal{H}_{hosp} é como Hamiltoniano de um gás de elétrons não interagentes, descrito como [23]

$$\mathcal{H}_{hosp} = \sum_{\mathbf{k}\sigma} \varepsilon_{\mathbf{k}\sigma} c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma}, \quad (3.2)$$

no qual $\varepsilon_{\mathbf{k}\sigma}$ é a energia dos elétrons livres com momento \mathbf{k} , $c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger$ e $c_{\mathbf{k}\sigma}$ são operadores, cuja função é criar e aniquilar um elétron com spin σ e número de onda \mathbf{k} na banda de condução, respectivamente.

O Hamiltoniano da impureza \mathcal{H}_{imp} é descrito como [23]

$$\mathcal{H}_{imp} = \sum_{j\sigma} \varepsilon_{j\sigma} n_{j\sigma} + \sum_j U_j n_{j\uparrow} n_{j\downarrow}, \quad (3.3)$$

no qual $n_{j\sigma} = d_{j\sigma}^\dagger d_{j\sigma}$ é o operador número da impureza no sítio j e spin σ , $\varepsilon_{j\sigma}$ é a relação de dispersão ou energia que corresponde ao orbital d (ou f), e U_j é a repulsão de Coulomb existente devido a presença da impureza no sítio \bar{j} (nesta notação \bar{j} é o sítio contrário ao sítio j). A correlação de Coulomb U_j pode ser obtida pela expressão [23]

$$U_j = \int |\phi_d(\mathbf{r}_1)|^2 \frac{e^2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} |\phi_d(\mathbf{r}_2)|^2 d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2, \quad (3.4)$$

no qual, e é a carga do elétron e ϕ_d é a função de onda associada ao autoestado de um elétron na impureza em uma dada posição \mathbf{r} . No caso $U_j = 0$, o Hamiltoniano apresenta apenas operadores fermiônicos de segunda ordem e portanto é exatamente solúvel. Porém, para o caso $U_j \neq 0$, o termo de quatro operadores na eq. (3.3) impossibilita uma solução exata do problema, sendo necessária a realização de um método de aproximação para tornar possível a solução do problema.

O Hamiltoniano de hibridização \mathcal{H}_{hib} é descrito como [23]

$$\mathcal{H}_{hib} = \sum_{j\mathbf{k}\sigma} (V_{j\mathbf{k}} d_{j\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma} + \text{H.c.}), \quad (3.5)$$

no qual

$$V_{j\mathbf{k}} = \frac{V_0}{\sqrt{\mathcal{N}}} e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_j}, \quad (3.6)$$

é a dispersão da onda plana que descreve uma dispersão translacional das impurezas ao longo do eixo x e y e negligencia o decaimento exponencial para a ponta de STM na direção z . Sendo \mathcal{N} o número total de partículas dado pelo volume da esfera de Fermi $V_F = \frac{4}{3}\pi k_F^3$, dividido pelo volume elementar $\Delta\Omega_k = \frac{8\pi^3}{\Omega}$ [24], ou seja,

$$\mathcal{N} = \frac{V_F}{\Delta\Omega_k} = \frac{\frac{4}{3}\pi k_F^3}{\frac{8\pi^3}{\Omega}} = \frac{4\pi k_F^3}{3} \cdot \frac{\Omega}{8\pi^3} = \frac{k_F^3 \Omega}{6\pi^2} \Rightarrow \mathcal{N} = \frac{\Omega D^3}{6\pi^2 v_F^3}. \quad (3.7)$$

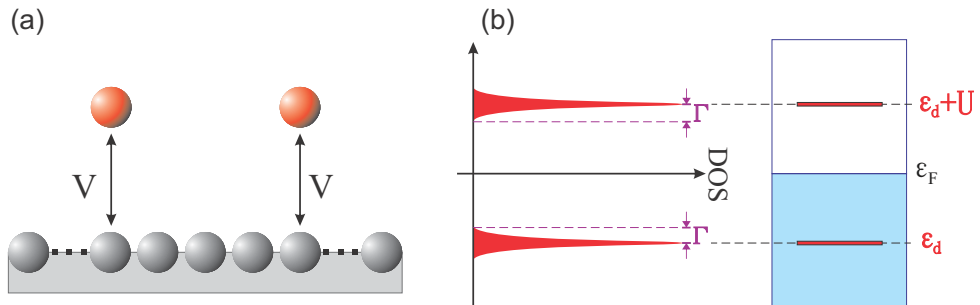


Figura 3.3: (a) Esquemática de um sistema interagente ($U \neq 0$) constituído por duas impurezas isoladas ($t = 0$) postas sobre um hospedeiro metálico. (b) Do lado esquerdo, tem-se a densidade de estados (DOS) do sistema, apresentando dois picos de Hubbard localizados em ε_d e $\varepsilon_d + U$ e com semi-largura Γ devido a presença do hospedeiro. Do lado direito a representação da banda quadrada do sistema, no qual observa-se um estado abaixo do nível de Fermi ε_F e um segundo estado acima do nível de Fermi, localizados em ε_d e $\varepsilon_d + U$, respectivamente.

Plotando a densidade de estados (do inglês, *DOS: density of states*) do nosso sistema, observa-se uma curva como a representada na Fig. 3.3(b), na qual, devido a presença do termo de repulsão de Coulomb, há dois picos, chamados picos de Hubbard, estando um abaixo do nível de Fermi localizado em ε_d , e outro acima do nível de Fermi localizado em $\varepsilon_d + U$. Esses picos estão relacionados com os níveis discretos induzidos pelas impurezas no sistema, como mostrado no lado direito da Fig. 3.3(b), representando o esquema da banda do sistema impurezas-hospedeiro. Vale também ressaltar, o efeito que o hospedeiro causa na DOS, alargando os picos de Hubbard em um parâmetro Γ , que está diretamente relacionado com a troca de elétrons pela interação entre o orbital s da rede e o orbital d das impurezas. Na física quântica, a taxa de troca destes elétrons é dada pela regra de ouro de Fermi [23]

$$\frac{1}{\tau} = \frac{2}{\hbar} \pi \rho_0 |V|^2 \equiv \frac{2\Gamma}{\hbar}, \quad (3.8)$$

em que τ é o tempo de vida do elétron num dado nível energético, ρ_0 é a DOS do hospedeiro, e $\Gamma \equiv \pi \rho_0 |V|^2$ é o parâmetro de Anderson, responsável pela semi-largura dos picos de Hubbard. Portanto, quanto maior for Γ , mais largos serão os picos de Hubbard ε_d e $\varepsilon_d + U$, e menor será o tempo de vida dos elétrons nestes estados.

3.2 Modelo *tight-binding* para duas impurezas

Diferente do caso anterior, considerando a interação entre dois átomos localizados em um hospedeiro metálico, como representado na Fig. 3.4(a), o Hamiltoniano TIAM que descreve esse novo sistema pode ser expresso por

$$\mathcal{H}_{TIAM} = \mathcal{H}_{hosp} + \mathcal{H}_{imp} + \mathcal{H}_{hib} + \mathcal{H}_{TB},$$

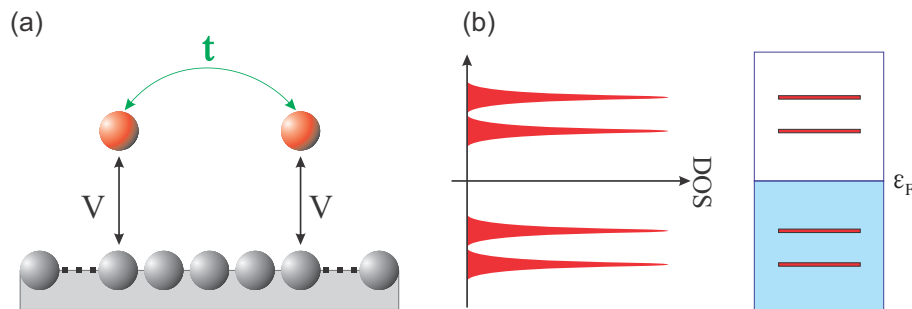


Figura 3.4: (a) Esquemática de um sistema interagente ($U \neq 0$) constituído por duas impurezas não-isoladas ($t \neq 0$) postas sobre um hospedeiro metálico. (b) Do lado esquerdo, tem-se a densidade de estados (DOS) do sistema, apresentando quatro picos, efeito da interação impureza-impureza via termo de hopping t . Do lado direito a representação da banda quadrada do sistema, no qual observa-se dois estado abaixo do nível de Fermi ε_F e dois estados acima do nível de Fermi.

sendo \mathcal{H}_{hosp} , \mathcal{H}_{imp} , \mathcal{H}_{hib} os mesmos termos presentes em eq. 3.1 e \mathcal{H}_{TB} o Hamiltoniano de ligação forte (do inglês, *tight-binding*) entre duas impurezas no sistema. Tal Hamiltoniano pode ser escrito como [22]

$$\mathcal{H}_{TB} = -t \sum_j a_{j\sigma}^\dagger a_{\bar{j}\sigma} \quad (3.9)$$

no qual o operador $a_{j\sigma}^\dagger$ cria um elétron no sítio j na posição \mathbf{R}_j e o operador $a_{\bar{j}\sigma}$ destrói um elétron no sítio \bar{j} na posição $\mathbf{R}_{\bar{j}}$, e t é o termo de *hopping* entre as duas impurezas.

A adição de um Hamiltoniano de interação impureza-impureza produz um efeito característico na DOS do sistema, separando os picos de Hubbard, como representado em Fig. 3.4(b), facilitando a identificação de um TIAM pelos gráficos.

Posteriormente, veremos que para o modelo idealizado nesta monografia, mesmo não havendo um *hopping* direto entre as impurezas, ainda sim é possível observar a separação dos picos na DOS. Isto ocorre devido ao meio relativístico que é uma propriedade característica dos semimetais, no qual as impurezas interagem uma com a outra via hospedeiro (Dirac/Weyl), formando ligações químicas.

Entretanto, antes de entrarmos nas especificidades do modelo desta dissertação, no capítulo seguintes abordaremos alguns dos conceitos matemáticos necessários para desenvolver os cálculos e compreender a física do sistema.

Capítulo 4

FORMALISMO MATEMÁTICO

Os capítulos anteriores foram destinados à explicação e compreensão do Hamiltoniano que descreve a rede do modelo de Anderson, nos apontando a direção pela qual o nosso sistema estudado é descrito. Neste sentido, utilizaremos esta seção para compreender o segundo passo do formalismo matemático usado para descrever a física do sistema estudado. O propósito é olhar para os orbitais de um sistema formado por duas impurezas, o semimetal de Weyl e uma ponta de STM, responsável pela medida experimental das quantidades físicas. Entretanto, não é desejável que a ponta de STM interfira de forma determinante na física originada pelo sistema Weyl-impurezas. Portanto, utilizaremos a teoria de resposta linear, onde a ponta de STM pode ser tratada de forma perturbativa.

Para se ter uma compreensão do perfil dos orbitais, é preciso determinar a LDOS do sistema, tal expressão é definida pela parte imaginária da função de Green retardada que é descrita como

$$\rho_{LDOS}(\varepsilon, \mathbf{R}) = -\frac{1}{\pi} \text{Im} \left[\sum_{\sigma} \tilde{\mathcal{G}}_{\sigma}^{\mathcal{R}}(\varepsilon^+, \mathbf{R}) \right]. \quad (4.1)$$

A função de Green que descreve o tunelamento dos elétrons do sistema é escrita em termos dos operadores de campo de tunelamento. De modo a calcular esta quantidade, se faz necessária uma análise das principais características das funções de Green de uma partícula.

4.1 Funções de Green (GF)

Em problemas mecânica quântica de muitos corpos de uma maneira geral, a filosofia das funções de Green é adotada para tornar solúvel a solução de alguns problemas. A GF possui apenas parte da informação completa carregada pela função de onda do sistema, mas incluem relevante informação para problemas específicos. Quando definimos GFs para muitos corpos, não fica claro que elas são soluções para equações diferenciais como para as GFs da equação de Schrödinger [25]. Mas, assim como será visto posteriormente, elas também são necessárias para o desenvolvimento da Equação de Movimento (seção 4.2).

Há vários tipos de GFs para sistemas de uma partícula, nesta dissertação, para medirmos a correlação eletrônica entre os átomos e descrever a propagação dos elétrons no sistema, utilizaremos a função Green temporal retardada [23, 25]

$$\mathcal{G}_\sigma^{\mathcal{R}}(\mathbf{r}, \tau; \mathbf{r}', \tau') = -\frac{i}{\hbar} \theta(\tau - \tau') \left\langle [\psi_\sigma(\mathbf{r}, \tau), \psi_\sigma^\dagger(\mathbf{r}', \tau')]_+ \right\rangle, \quad (4.2)$$

e função de Green temporal avançada

$$\mathcal{G}_\sigma^{\mathcal{A}}(\mathbf{r}, \tau; \mathbf{r}', \tau') = \frac{i}{\hbar} \theta(\tau' - \tau) \left\langle [\psi_\sigma(\mathbf{r}, \tau), \psi_\sigma^\dagger(\mathbf{r}', \tau')]_+ \right\rangle, \quad (4.3)$$

no qual $\theta(\tau - \tau')$ é uma função degrau (algumas vezes também chamado de função de Heaviside), $[\dots, \dots]_+$ (ora representada como $\{\dots, \dots\}$) denota relação de anticomutação e $\langle \dots \rangle$ representa a média térmica.

A média térmica do comutador das funções de onda ψ_σ e ψ_σ^\dagger pode ser expressa por

$$\left\langle [\psi_\sigma(\mathbf{r}, \tau), \psi_\sigma^\dagger(\mathbf{r}', \tau')]_+ \right\rangle = Z^{-1} Tr \left\{ e^{-\beta \mathcal{H}} [\psi_\sigma(\mathbf{r}, \tau), \psi_\sigma^\dagger(\mathbf{r}', \tau')]_+ \right\} \quad (4.4)$$

no qual $Z = Tr \{ e^{-\beta \mathcal{H}} \}$ é a função de partição, Tr é o traço, \mathcal{H} é o Hamiltoniano do sistema e $\beta = \frac{1}{k_B T}$.

Definindo um autoket $|n\rangle$ que é autoestado (autovetor) do Hamiltoniano \mathcal{H} com níveis discretos de energia ε_n , matematicamente expresso por [24]

$$\mathcal{H} |n\rangle = E_n |n\rangle, \quad (4.5)$$

podemos representar as funções de Green retardada e avançada por

$$\mathcal{G}_\sigma^{\mathcal{R}}(\mathbf{r}, \tau; \mathbf{r}', \tau') = -\frac{i}{\hbar} \theta(\tau - \tau') \sum_n Z^{-1} e^{-\beta E_n} \langle n | [\psi_\sigma(\mathbf{r}, \tau), \psi_\sigma^\dagger(\mathbf{r}', \tau')]_+ | n \rangle, \quad (4.6)$$

$$\mathcal{G}_\sigma^{\mathcal{A}}(\mathbf{r}, \tau; \mathbf{r}', \tau') = \frac{i}{\hbar} \theta(\tau' - \tau) \sum_n Z^{-1} e^{-\beta E_n} \langle n | [\psi_\sigma(\mathbf{r}, \tau), \psi_\sigma^\dagger(\mathbf{r}', \tau')]_+ | n \rangle, \quad (4.7)$$

satisfazendo a relação

$$\mathcal{G}_\sigma^{\mathcal{R}}(\mathbf{r}, \tau; \mathbf{r}', \tau') = [\mathcal{G}_\sigma^{\mathcal{A}}(\mathbf{r}, \tau; \mathbf{r}', \tau')]^\dagger.$$

Como vimos, a função de Green é definida no domínio do tempo, mas de acordo com a eq. 4.1, a LDOS é dependente do imaginário de uma função de Green retardada no domínio das energias. Desta forma, se faz necessária a utilização de uma transformada de Fourier para converter a função de Green no domínio do tempo para uma no domínio da energia. Essa transformação pode ser feita por meio do método da equação do movimento.

4.2 Equação de Movimento (EOM)

Nos capítulos anteriores, nós vimos algumas observáveis físicas que podem ser expressas em termos de funções de Green retardadas. Em vários casos em que essas funções são dependentes do tempo, é necessário a utilização de uma técnica para torná-las solúveis. Esta técnica é a equação de Movimento (do inglês, *EOM: Equation of Motion*). A base deste método consiste em gerar uma série de equações diferenciais acopladas, diferenciando a função de correlação. Se essas equações fecharem o problema (a princípio) é solúvel, se as equações não fecharem o problema, é necessário a utilização de um raciocínio físico para truncar as equações (por exemplo, pode-se negligenciar algumas correlações que não são parte do efeito ou fenômeno a ser observado) [25]. Nesta tese, como será visto posteriormente, apenas em EOMs que geram GFs de quatro operadores necessitam de um método para truncar funções. O método utilizado será a aproximação Hubbard I, o qual exclui efeitos como efeito Kondo, que não é a observável foco desta tese, e não influencia em nada nos orbitais dos átomos (que é a observável desta monografia).

Para uma explicação do método da equação do movimento, vamos utilizar uma definição mais simples de uma GF retardada envolvendo dois operadores fermiônicos $\hat{\mathcal{A}}$ e $\hat{\mathcal{B}}$ na representação de Heisenberg

$$\mathcal{G}_{AB}(\tau, 0) = -\frac{i}{\hbar}\theta(\tau - 0) \langle n | \left[\hat{\mathcal{A}}(\tau), \hat{\mathcal{B}}^\dagger(0) \right]_+ | n \rangle, \quad (4.8)$$

onde a dependência espacial foi omitida e $\tau' = 0$. De acordo com ref. [26], a derivada da função degrau $\theta(\tau - 0)$ resulta em uma delta de Dirac $\delta(\tau - 0)$. Assim, aplicando a derivada em eq. 4.8,

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial \tau} \mathcal{G}_{AB}(\tau, 0) &= -\frac{i}{\hbar} \delta(\tau - 0) \langle n | \left[\hat{\mathcal{A}}(\tau), \hat{\mathcal{B}}^\dagger(0) \right]_+ | n \rangle \\ &+ \left(-\frac{i}{\hbar} \right) \theta(\tau - 0) \langle n | \left[\frac{\partial}{\partial \tau} \hat{\mathcal{A}}(\tau), \hat{\mathcal{B}}^\dagger(0) \right]_+ | n \rangle. \end{aligned} \quad (4.9)$$

Aplicando a Equação de Heisenberg para resolver $\frac{\partial}{\partial \tau} \hat{\mathcal{A}}(\tau)$,

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial \tau} \hat{\mathcal{A}}(\tau) &= \left[\hat{\mathcal{A}}, \mathcal{H} \right] \\ \frac{\partial}{\partial \tau} \hat{\mathcal{A}}(\tau) &= -\frac{i}{\hbar} \left[\hat{\mathcal{A}}, \mathcal{H} \right]. \end{aligned} \quad (4.10)$$

Substituindo eq. 4.10 em eq. 4.9,

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial}{\partial \tau} \mathcal{G}_{AB}(\tau, 0) &= -\frac{i}{\hbar} \delta(\tau - 0) \langle n | [\hat{\mathcal{A}}(\tau), \hat{\mathcal{B}}^\dagger(0)]_+ | n \rangle \\
 &+ \left(-\frac{i}{\hbar} \right) \theta(\tau - 0) \langle n | \left[-\frac{i}{\hbar} [\hat{\mathcal{A}}(\tau), \mathcal{H}], \hat{\mathcal{B}}^\dagger(0) \right]_+ | n \rangle \\
 &= -\frac{i}{\hbar} \delta(\tau - 0) \langle n | [\hat{\mathcal{A}}(\tau), \hat{\mathcal{B}}^\dagger(0)]_+ | n \rangle \\
 &+ \left(-\frac{i}{\hbar} \right) \left\{ -\frac{i}{\hbar} \theta(\tau - 0) \langle n | \left[[\hat{\mathcal{A}}(\tau), \mathcal{H}], \hat{\mathcal{B}}^\dagger(0) \right]_+ | n \rangle \right\}.
 \end{aligned}$$

Por fim, reconhecendo o segundo termo como função de Green semelhante a eq. 4.8, a derivada da função de Green \mathcal{G}_{AB}^R pode ser reescrita como

$$\frac{\partial}{\partial \tau} \mathcal{G}_{AB}(\tau, 0) = -\frac{i}{\hbar} \delta(\tau - 0) \langle n | [\hat{\mathcal{A}}(\tau), \hat{\mathcal{B}}^\dagger(0)]_+ | n \rangle - \frac{i}{\hbar} \mathcal{G}_{[\mathcal{A}, \mathcal{H}]\mathcal{B}}(\tau, 0). \quad (4.11)$$

De acordo com ref. [27], realizando a transformada de Fourier, uma função de Green retardada, em coordenadas de energia, é descrita por

$$\boxed{\tilde{\mathcal{G}}_{\Psi_R \Psi_R}(\varepsilon^+) = \int_{-\infty}^{+\infty} d\tau \mathcal{G}_{\Psi_R \Psi_R}(\tau) \cdot e^{\frac{i}{\hbar} \varepsilon^+ \tau}}, \quad (4.12)$$

no qual, $\varepsilon^+ = \varepsilon + i\eta$, sendo que o infinitesimal $\eta \rightarrow 0^+$ é necessário para que a expressão convirja nos limites.

Sendo assim, multiplicaremos ambos os lados da eq. 4.11 por $e^{\frac{i}{\hbar} \varepsilon^+ \tau}$ e integraremos de menos à mais infinito, para que seja possível usar a relação anterior apresentada em eq. 4.12.

$$\begin{aligned}
 \int_{-\infty}^{+\infty} d\tau \frac{\partial}{\partial \tau} \mathcal{G}_{AB}(\tau, 0) \cdot e^{\frac{i}{\hbar} \varepsilon^+ \tau} &= -\frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} d\tau \left\{ \delta(\tau - 0) \langle n | [\hat{\mathcal{A}}(\tau), \hat{\mathcal{B}}^\dagger(0)]_+ | n \rangle \right\} \cdot e^{\frac{i}{\hbar} \varepsilon^+ \tau} \\
 &+ \left(-\frac{i}{\hbar} \right) \int_{-\infty}^{+\infty} d\tau \left\{ \mathcal{G}_{[\mathcal{A}, \mathcal{H}]\mathcal{B}}(\tau, 0) \right\} \cdot e^{\frac{i}{\hbar} \varepsilon^+ \tau}. \quad (4.13)
 \end{aligned}$$

Resolvendo o termo da esquerda pelo método de integração por partes,

$$\begin{cases} u = e^{\frac{i}{\hbar} \varepsilon^+ \tau} \\ v = \mathcal{G}_{AB}(\tau, 0) \end{cases} \quad \begin{cases} du = \frac{i}{\hbar} \varepsilon^+ e^{\frac{i}{\hbar} \varepsilon^+ \tau} d\tau \\ dv = \frac{\partial}{\partial \tau} \mathcal{G}_{AB}(\tau, 0) d\tau \end{cases}$$

O método de integração por partes afirma que $\int_{\alpha}^{\beta} u dv = [uv]_{\alpha}^{\beta} - \int_{\alpha}^{\beta} v du$. Assim,

$$\begin{aligned}
\int_{-\infty}^{+\infty} d\tau \frac{\partial}{\partial \tau} \mathcal{G}_{AB}(\tau, 0) \cdot e^{\frac{i}{\hbar} \varepsilon^+ \tau} &= \left[e^{\frac{i}{\hbar} (\varepsilon + i\eta) \tau} \cdot \mathcal{G}_{AB}(\tau, 0) \right]_{-\infty}^{+\infty} - \int_{-\infty}^{+\infty} \mathcal{G}_{AB}(\tau, 0) \cdot \frac{i}{\hbar} \varepsilon^+ e^{\frac{i}{\hbar} \varepsilon^+ \tau} d\tau \\
&= \left[e^{\frac{i}{\hbar} \varepsilon t} e^{-\frac{\eta}{\hbar} \tau} \cdot \mathcal{G}_{AB}(\tau, 0) \right]_{-\infty}^{+\infty} - \frac{i}{\hbar} \varepsilon^+ \int_{-\infty}^{+\infty} d\tau \mathcal{G}_{AB}(\tau, 0) \cdot e^{\frac{i}{\hbar} \varepsilon^+ \tau} \\
&= \left[e^{\frac{i}{\hbar} \varepsilon (+\infty)} e^{-\frac{\eta}{\hbar} (+\infty)} \mathcal{G}_{AB}(+\infty) - e^{\frac{i}{\hbar} \varepsilon (-\infty)} e^{-\frac{\eta}{\hbar} (-\infty)} \mathcal{G}_{AB}(-\infty) \right] \\
&\quad + \left(-\frac{i}{\hbar} \right) \varepsilon^+ \int_{-\infty}^{+\infty} d\tau \mathcal{G}_{AB}(\tau, 0) \cdot e^{\frac{i}{\hbar} (\varepsilon + i\eta) t} \\
&= \left[e^{\frac{i}{\hbar} \varepsilon (+\infty)} \cdot 0 \cdot \mathcal{G}_{AB}(+\infty) - 0 \cdot e^{\frac{\eta}{\hbar} (-\infty)} \mathcal{G}_{AB}(-\infty) \right] \\
&\quad + \left(-\frac{i}{\hbar} \right) \varepsilon^+ \int_{-\infty}^{+\infty} d\tau \mathcal{G}_{AB}(\tau, 0) \cdot e^{\frac{i}{\hbar} \varepsilon^+ \tau} \\
&= -\frac{i}{\hbar} \varepsilon^+ \int_{-\infty}^{+\infty} d\tau \mathcal{G}_{AB}(\tau, 0) \cdot e^{\frac{i}{\hbar} \varepsilon^+ \tau}.
\end{aligned}$$

Usando eq. 4.12, o resultado para o termo da esquerda em eq. 4.13 é

$$\int_{-\infty}^{+\infty} d\tau \frac{\partial}{\partial \tau} \mathcal{G}_{AB}(\tau, 0) \cdot e^{\frac{i}{\hbar} \varepsilon^+ \tau} = -\frac{i}{\hbar} \varepsilon^+ \tilde{\mathcal{G}}_{AB}(\varepsilon^+) \quad (4.14)$$

Para o primeiro termo da direita na eq. 4.13, aplicando a propriedade da Delta de Dirac, a qual pode ser escrita como $\int_{-\infty}^{+\infty} \delta(x - x_0) f(x) dx = f(x_0)$, obtemos

$$\begin{cases} \delta(x - x_0) = \delta(\tau - 0) \\ f(x) = f(\tau) = \langle n | [\hat{\mathcal{A}}(\tau), \hat{\mathcal{B}}^\dagger(0)]_+ | n \rangle \cdot e^{\frac{i}{\hbar} \varepsilon^+ \tau} \end{cases}$$

Assim,

$$\begin{aligned}
\int_{-\infty}^{+\infty} \delta(\tau - 0) \left\{ \langle n | [\hat{\mathcal{A}}(\tau), \hat{\mathcal{B}}^\dagger(0)]_+ | n \rangle \cdot e^{\frac{i}{\hbar} \varepsilon^+ \tau} \right\} d\tau &= \int_{-\infty}^{+\infty} \delta(\tau - 0) f(\tau) d\tau \\
&= f(0) \\
&= \langle n | [\hat{\mathcal{A}}(0), \hat{\mathcal{B}}^\dagger(0)]_+ | n \rangle \cdot e^{\frac{i}{\hbar} \varepsilon^+ \cdot 0} \\
&= \langle n | [\hat{\mathcal{A}}(0), \hat{\mathcal{B}}^\dagger(0)]_+ | n \rangle \cdot 1 \\
&= [\hat{\mathcal{A}}(0), \hat{\mathcal{B}}^\dagger(0)]_+ \langle n | 1 | n \rangle
\end{aligned}$$

Portanto, o resultado para o primeiro termo da direita na eq. 4.13 é

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \delta(\tau - 0) \langle n | [\hat{\mathcal{A}}(\tau), \hat{\mathcal{B}}^\dagger(0)]_+ | n \rangle \cdot e^{\frac{i}{\hbar} \varepsilon^+ \tau} d\tau = [\hat{\mathcal{A}}(0), \hat{\mathcal{B}}^\dagger(0)]_+. \quad (4.15)$$

Por fim, usando as eq. [4.12, 4.14 e 4.15] e substituindo em eq. 4.11,

$$-\frac{i}{\hbar}\varepsilon^+\tilde{\mathcal{G}}_{AB}(\varepsilon^+) = -\frac{i}{\hbar}\left[\hat{\mathcal{A}}(0), \hat{\mathcal{B}}^\dagger(0)\right]_+ - \frac{i}{\hbar}\tilde{\mathcal{G}}_{[A,\mathcal{H}]B}(\varepsilon^+), \quad (4.16)$$

resultando em

$$\boxed{(\varepsilon + i\eta)\tilde{\mathcal{G}}_{AB}(\varepsilon) = \left[\hat{\mathcal{A}}(0), \hat{\mathcal{B}}^\dagger(0)\right]_+ + \tilde{\mathcal{G}}_{[A,\mathcal{H}]B}(\varepsilon)} \quad (4.17)$$

Em resumo, a EOM desenvolve uma hierarquia entre funções de Green, uma vez que o cálculo de $\tilde{\mathcal{G}}_{AB}(\varepsilon)$ dá a origem a uma nova função de Green $\tilde{\mathcal{G}}_{[A,\mathcal{H}]B}(\varepsilon)$. Assim, o cálculo desta última geraria o aparecimento de uma nova função de Green, e assim por diante. O cálculo só termina quando um conjunto de n equações e n funções de Green é obtido. Entretanto, em alguns casos esta hierarquia é infinita, se fazendo necessária o uso de aproximações. Mais especificamente, esta condição ocorre quando o Hamiltoniano apresenta termos não quadráticos.

4.3 Aproximação Hubbard I

Proposto em 1963 por John Hubbard (Fig. 4.1), o modelo de Hubbard foi publicado com o intuito de descrever elétrons em metais de transição de camada $3d$. Nesses elementos, a função de onda radial dos elétrons da camada $3d$ tinham uma pequena extensão espacial.

Para quebrar a sequência interminável dos cálculos das GFs, é necessário o uso de um método de aproximação que exclui os efeitos e fenômenos físicos não desejados. O método de aproximação Hubbard I utilizado nesta dissertação consiste em evoluir a EOM até o ponto em que podemos utilizar a aproximação de campo médio para truncar GFs contendo quatro operadores, resultando em uma média dos dois primeiros operadores, multiplicado por uma GF contendo os outros dois operadores. Assim, de acordo com ref. [28], a aproximação de campo médio pode ser escrita como

$$\tilde{\mathcal{G}}_{\alpha\beta\gamma\theta}(\varepsilon) \simeq \langle\alpha\beta\rangle \tilde{\mathcal{G}}_{\gamma\theta}(\varepsilon), \quad (4.18)$$

sendo α, β, γ e θ operadores genéricos.

Se por um lado a aproximação Hubbard I permite tornar solúvel um problema de GFs que seria interminável, por outro lado o método trunca as GFs da correlação de *spin-flip* entre a impureza e a banda do sistema, que são essenciais para obter dados de efeitos como o efeito Kondo.

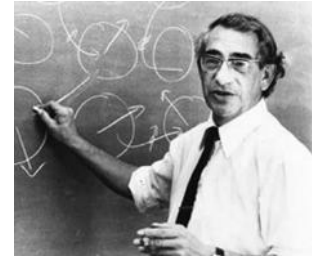


Figura 4.1: John Hubbard, físico teórico inglês.

FONTE: Bogoliubov Laboratory of Theoretical Physics

Capítulo 5

MODELO TEÓRICO

Considerando o sistema esquematizado em Fig. 5.1, o qual é composto por:

- um semimetal de Weyl, desempenhando o papel do hospedeiro;
- duas impurezas colineares entre si e enterradas no interior do semimetal;
- uma ponta de STM, que é tratada de forma perturbativa, uma vez que o objetivo é observar os orbitais do sistema impureza-hospedeiro.

Para a formulação do Hamiltoniano, utilizamos as mesmas premissas consideradas no modelo de Anderson (Seção 3).

Vale ressaltar que o desenvolvimento dos cálculos desenvolvidos nesse capítulo, está demonstrado na íntegra no APÊNDICE A.

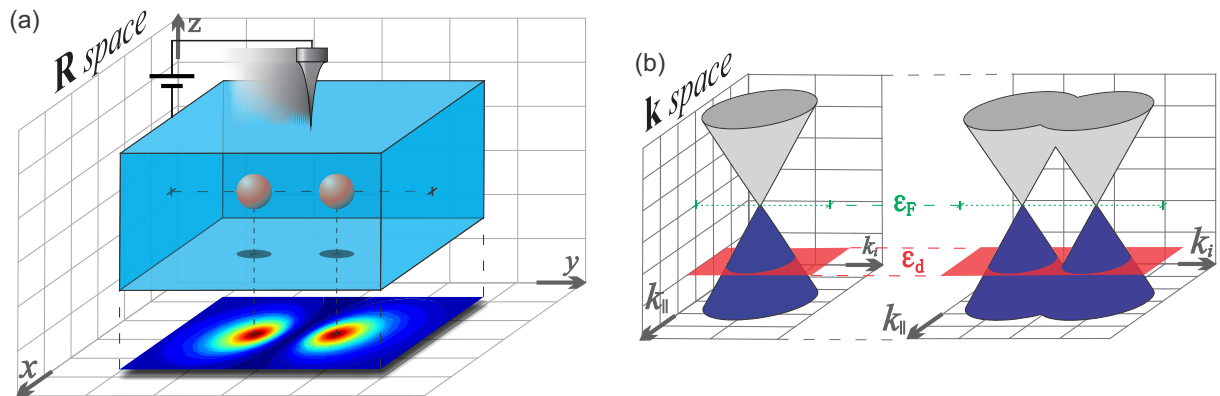


Figura 5.1: (a) Esquema (no espaço real) do modelo teórico, constituído por um duas impurezas no interior do *bulk* do WSM e uma ponta de STM. Na base, há a representação dos orbitais das duas impurezas medido pelo STM. (b) Esquema (no espaço dos momentos) dos cones de Dirac e Weyl com quebra de TRS, contendo o nível ε_d advindo das impurezas.

5.1 Hamiltoniano do sistema WSM-impurezas-STM

O Hamiltoniano que descreve o sistema composto pelas três partes é descrito como

$$\mathcal{H}_T = \mathcal{H}_{Weyl} + \mathcal{H}_{tun} + \mathcal{H}_{imp} + \mathcal{H}_{hib} + \mathcal{H}_U \quad (5.1)$$

O Hamiltoniano total \mathcal{H}_T descreve o sistema WSM e impurezas.

O Hamiltoniano do WSM \mathcal{H}_{Weyl} , chamado de \mathcal{H}_{hosp} em eq. 3.1 descreve o sistema do hospedeiro de forma isolada, sem considerar as outras componentes. De acordo com ref. [1, 2, 5], o Hamiltoniano que descreve o movimento dos elétrons relativísticos é escrito como

$$\mathcal{H}_{Weyl} = \sum_{\mathbf{k}, \chi} \psi_{\chi}^{\dagger}(\mathbf{k}) h_{\chi}(\mathbf{k}) \psi_{\chi}(\mathbf{k}), \quad (5.2)$$

em que $h_{\chi}(\mathbf{k})$ é o Hamiltoniano do *bulk* de um WSM que pode ser escrito como

$$h_{\chi} = \chi [\hbar v_F \boldsymbol{\sigma} \cdot (\mathbf{k} - \chi \mathbf{Q}) + \sigma_0 Q_0], \quad (5.3)$$

no qual χ representa a quiralidade do spinor ($\chi = \pm$), $\mathbf{k} = k_x \hat{i} + k_y \hat{j} + k_z \hat{k}$ é o momento, v_F é a velocidade de Fermi, $\mathbf{Q} = Q_x \hat{i} + Q_y \hat{j} + Q_z \hat{k}$ representa o potencial vetor do campo magnético aplicado no sistema, σ_0 é a matriz identidade, Q_0 a posição dos nós de Weyl no eixo das energias, e $\boldsymbol{\sigma} = \sigma_x \hat{i} + \sigma_y \hat{j} + \sigma_z \hat{k}$ as matrizes de Pauli definidas como [10]

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (5.4)$$

Os operadores de campo $\psi_{\chi}(\mathbf{k})$ e $\psi_{\chi}^{\dagger}(\mathbf{k})$ (ora chamados de spinores) podem ser representados como

$$\psi_{\chi}(\mathbf{k}) = \begin{pmatrix} c_{\mathbf{k}\chi\uparrow} \\ c_{\mathbf{k}\chi\downarrow} \end{pmatrix}, \quad \psi_{\chi}^{\dagger}(\mathbf{k}) = \begin{pmatrix} c_{\mathbf{k}\chi\uparrow}^{\dagger} & c_{\mathbf{k}\chi\downarrow}^{\dagger} \end{pmatrix}, \quad (5.5)$$

no qual $c_{\mathbf{k}\chi\sigma}^{\dagger}$ e $c_{\mathbf{k}\chi\sigma}$ são os operadores fermiônicos de criação e destruição, respectivamente.

Em eq. 5.3, as constantes \mathbf{Q} e Q_0 estão diretamente ligadas com a quebra ou não da TRS e da IS. Para $\mathbf{Q} = Q_0 = 0$, a eq. 5.3 torna-se $h_{\chi} = \chi \hbar v_F \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{k}$, gerando o Hamiltoniano de um 3D-DSM [2], preservando tanto TRS quanto IS. Para valores finitos de \mathbf{Q} e Q_0 , nos casos onde ocorre quebra na TRS ($\mathbf{Q} \neq 0$) ou quebra na IS ($Q_0 \neq 0$), o DSM transforma-se em um WSM separando o ponto de Dirac em dois nós de Weyl (como mostrado em Fig. 2.2), ou seja, com dois valores diferentes de momento \mathbf{k} (para $\mathbf{Q} \neq 0$) ou de energia ε (para $Q_0 \neq 0$), que, segundo ref. [1], podem ser descrito como $\mathbf{k}_{node} = \pm \mathbf{Q}/v_F$ e $\varepsilon_{node} = \pm Q_0$, respectivamente.

Chamando $\mathbf{k} - \chi \mathbf{Q} = \mathbf{k}^x$ em eq. 5.3, o h_{χ} terá uma expressão semelhante a de um Weyl com quebra de IS apenas, no qual $Q_0 \neq 0$ e $\mathbf{Q} = 0$ (que é chamado de Weyl não-centrossimétrico pela ref. [1]). Esta substituição facilita os cálculos durante a determinação das auto-energias.

Assim, substituindo eq. [5.3-5.5] em eq. 5.2, obtermos (eq. A.11)

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{Weyl} = & \sum_{\mathbf{k}\chi} \chi k_{z+}^{\chi} c_{\mathbf{k}\chi\uparrow}^{\dagger} c_{\mathbf{k}\chi\uparrow} + \sum_{\mathbf{k}^{\chi}\chi} \chi k_{-}^{\chi} c_{\mathbf{k}\chi\uparrow}^{\dagger} c_{\mathbf{k}\chi\downarrow} \\ & + \sum_{\mathbf{k}\chi} \chi k_{+}^{\chi} c_{\mathbf{k}\chi\downarrow}^{\dagger} c_{\mathbf{k}\chi\uparrow} - \sum_{\mathbf{k}\chi} \chi k_{z-}^{\chi} c_{\mathbf{k}\chi\downarrow}^{\dagger} c_{\mathbf{k}\chi\downarrow}, \end{aligned} \quad (5.6)$$

no qual $k_{\pm}^{\chi} = \hbar\nu_F (k_x^{\chi} \pm ik_y^{\chi})$ e $k_{z\pm}^{\chi} = \hbar\nu_F k_z^{\chi} \pm Q_0$.

O Hamiltoniano de tunelamento \mathcal{H}_{tun} (mesmo Hamiltoniano do modelo *tight-binding* na Seção 3.2) descreve a interação impureza-impureza, o qual ocorre tunelamento de elétrons diretamente sem necessidade interação com o hospedeiro. Na eq. 3.1 o efeito de tunelamento não foi incluso, pois foi considerado impurezas não interagentes entre si, ou seja, a interação ocorre apenas via impureza-hospedeiro. Assim, podemos escrever \mathcal{H}_{tun} pela como

$$\mathcal{H}_{tun} = - \sum_{j\sigma} t d_{j\sigma}^{\dagger} d_{\bar{j}\sigma}, \quad (5.7)$$

no qual o operador $d_{j\sigma}^{\dagger}$ cria um elétron no sítio j na posição \mathbf{R}_j e o operador $d_{\bar{j}\sigma}$ destrói um elétron no sítio \bar{j} na posição $\mathbf{R}_{\bar{j}}$ (em outras palavras, \bar{j} é o sítio oposto a j), e t_j é o termo de *hopping* entre as duas impurezas.

Em eq. 3.3, \mathcal{H}_{imp} foi escrito com o termo de repulsão de Coulomb U_j . Aqui, nós optaremos por separá-los em dois Hamiltonianos, sendo um \mathcal{H}_{imp} e o outro \mathcal{H}_U representando o Hamiltoniano do potencial de Coulomb. Sendo assim, \mathcal{H}_{imp} , \mathcal{H}_U , bem como o Hamiltoniano de hibridização \mathcal{H}_{hib} são representados como

$$\mathcal{H}_{imp} = \sum_{j\sigma} \varepsilon_{j\sigma} n_{j\sigma}, \quad (5.8)$$

$$\mathcal{H}_U = \sum_j U_j n_{j\uparrow} n_{j\downarrow}, \quad (5.9)$$

$$\mathcal{H}_{hib} = \sum_{j\mathbf{k}\sigma} (V_{jk} d_{j\sigma}^{\dagger} c_{\mathbf{k}\sigma} + \text{H.c.}), \quad (5.10)$$

no qual cada um dos termos contidos nos três Hamiltonianos está explicado na seção 3.1.

Para observar os orbitais dos elétrons do sistema, é preciso calcular a LDOS. Como foi discutido e descrito na eq. 4.1, esta LDOS é obtida pela parte imaginária da GF dos operadores de campo. Neste sentido, o primeiro estágio é calcular a GF.

5.2 Densidade Local de Estados (LDOS)

De acordo com ref. [2], a função de Green retardada no espaço das energias é dependente dos operadores fermiônicos de criação e destruição $c_{\mathbf{k}\chi\sigma}^\dagger$ e $c_{\mathbf{k}\chi\sigma}$, sendo expressa por

$$\tilde{\mathcal{G}}_\sigma(\varepsilon, \mathbf{R}_m) = \frac{1}{\mathcal{N}} \sum_{\mathbf{k}q\chi\chi'} e^{-i(\mathbf{k}^\chi + \chi\mathbf{Q}) \cdot \mathbf{R}_m} e^{i(\mathbf{q}^\chi + \chi'\mathbf{Q}) \cdot \mathbf{R}_m} \tilde{\mathcal{G}}_{c_{\mathbf{k}\chi\sigma} c_{\mathbf{q}\chi'\sigma}}(\varepsilon), \quad (5.11)$$

A GF retardada temporal possui o escopo da GF apresentada em eq. 4.11. Calculando a EOM para $\mathcal{G}_{c_{\mathbf{k}\chi\sigma} c_{\mathbf{q}\chi'\sigma}}(\tau)$, obtemos

$$\begin{aligned} \tilde{\mathcal{G}}_{c_{\mathbf{k}\chi\sigma} c_{\mathbf{q}\chi'\sigma}}(\varepsilon) &= \frac{\varepsilon + i\eta + \sigma\chi k_{z\bar{\sigma}}^\chi}{\tilde{\varepsilon}_\chi^2 - (\hbar\nu_F k^\chi)^2} \delta_{\mathbf{k}\mathbf{q}} \delta_{\chi\chi'} \\ &+ \frac{(\varepsilon + i\eta + \chi k_{z\bar{\sigma}}^\chi) \sum_j V_{j\mathbf{k}}^* \tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\sigma} c_{\mathbf{q}\chi'\sigma}}(\varepsilon)}{\tilde{\varepsilon}_\chi^2 - (\hbar\nu_F k^\chi)^2} \\ &+ \frac{\chi k_{z\bar{\sigma}}^\chi \sum_j V_{j\mathbf{k}} \tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\bar{\sigma}} c_{\mathbf{q}\chi'\sigma}}(\varepsilon)}{\tilde{\varepsilon}_\chi^2 - (\hbar\nu_F k^\chi)^2}, \end{aligned} \quad (5.12)$$

no qual $\tilde{\varepsilon}_\chi = \varepsilon + i\eta - \chi Q_0$, $\bar{\sigma}$ é um spin oposto ao spin σ e

$$\sigma = \begin{cases} \uparrow, + \\ \downarrow, - \end{cases}. \quad (5.13)$$

Observe que $\tilde{\mathcal{G}}_{c_{\mathbf{k}\chi\sigma} c_{\mathbf{q}\chi'\sigma}}(\varepsilon)$, resulta em uma dependência de uma GF do tipo $\tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\sigma} c_{\mathbf{q}\chi'\sigma}}(\varepsilon)$. Sendo assim, calculando a EOM para $\mathcal{G}_{d_{j\sigma} c_{\mathbf{q}\chi'\sigma}}(\tau)$, obtemos

$$\begin{aligned} \tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\sigma} c_{\mathbf{q}\chi'\sigma'}}(\varepsilon) &= \frac{\varepsilon + i\eta + \sigma'\chi' q_{z\bar{\sigma}'}^\chi}{\tilde{\varepsilon}_{\chi'}^2 - (\hbar\nu_F q^\chi)^2} \sum_l V_{l\mathbf{q}} \tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\sigma} d_{l\sigma'}}(\varepsilon) \\ &+ \frac{\chi' q_{z\bar{\sigma}'}^\chi}{\tilde{\varepsilon}_{\chi'}^2 - (\hbar\nu_F q^\chi)^2} \sum_l V_{l\mathbf{q}} \tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\sigma} d_{l\bar{\sigma}'}}(\varepsilon), \end{aligned} \quad (5.14)$$

no qual, $\bar{\sigma}'$ é um spin oposto ao spin σ' e, assim como em eq. 5.13,

$$\sigma_{\sigma'} = \begin{cases} \uparrow, + \\ \downarrow, - \end{cases}. \quad (5.15)$$

Novamente, $\tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\sigma} c_{\mathbf{q}\chi'\sigma'}}(\varepsilon)$ resultou em uma dependência de uma nova GF do tipo $\tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\sigma} d_{l\sigma'}}(\varepsilon)$. Entretanto, por enquanto, nós não calcularemos esta nova GF. Primeiramente, vamos determinar a LDOS do nosso sistema em termos de $\tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\sigma} d_{l\sigma'}}(\varepsilon)$ de forma que esta terá similaridades com a equação de Dyson [29].

Portanto, substituindo a equação resultante em eq. 4.1, obteremos a seguinte expressão para

a LDOS do sistema

$$\begin{aligned}
\rho_{LDOS}^{\chi}(\varepsilon) &= \rho_0^{\chi}(\varepsilon) \\
&- \frac{1}{\pi\nu_0^2} \sum_{\chi\chi'jl\sigma} \text{Im} \left\{ \Sigma_{z\bar{\sigma}}(\varepsilon, \mathbf{R}_{mj}) \cdot \tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\sigma}d_{l\sigma}}(\varepsilon) \cdot \Sigma'_{z\bar{\sigma}}(\varepsilon, \mathbf{R}_{lm}) \right\} \\
&- \frac{1}{\pi\nu_0^2} \sum_{\chi\chi'jl\sigma} \text{Im} \left\{ \Sigma_{\sigma}(\varepsilon, \mathbf{R}_{mj}) \cdot \tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\sigma}d_{l\sigma}}(\varepsilon) \cdot \Sigma'_{\bar{\sigma}}(\varepsilon, \mathbf{R}_{lm}) \right\} \\
&- \frac{1}{\pi\nu_0^2} \sum_{\chi\chi'jl\sigma} \text{Im} \left\{ \Sigma_{z\bar{\sigma}}(\varepsilon, \mathbf{R}_{mj}) \cdot \tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\sigma}d_{l\bar{\sigma}}}(\varepsilon) \cdot \Sigma'_{\sigma}(\varepsilon, \mathbf{R}_{lm}) \right\} \\
&- \frac{1}{\pi\nu_0^2} \sum_{\chi\chi'jl\sigma} \text{Im} \left\{ \Sigma_{\sigma}(\varepsilon, \mathbf{R}_{mj}) \cdot \tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\sigma}d_{l\bar{\sigma}}}(\varepsilon) \cdot \Sigma'_{z\sigma}(\varepsilon, \mathbf{R}_{lm}) \right\} \quad (5.16)
\end{aligned}$$

no qual $\rho_0^{\chi}(\varepsilon)$ é responsável pela DOS do hospedeiro sem a presença das impurezas e é descrito como (eq. A.36)

$$\rho_0^{\chi}(\varepsilon) = -\frac{2}{\pi} \text{Im} \left[\frac{1}{\mathcal{N}} \sum_{\mathbf{k}\chi} \frac{\varepsilon + i\eta - \chi Q_0}{\tilde{\varepsilon}_{\chi}^2 - (\hbar\nu_F k^{\chi})^2} \right], \quad (5.17)$$

expressão semelhante a DOS publicada por ref. [2], o que para o nosso caso, a DOS resulta em

$$\rho_0^{\chi}(\varepsilon) = \sum_{\chi} \frac{3}{D^3} \varepsilon_{\chi}^2, \quad (5.18)$$

onde aplicando o somatório obtemos (eq. A.40)

$$\rho_0(\varepsilon) = \frac{6}{D^3} (\varepsilon^2 + Q_0^2). \quad (5.19)$$

Além disso, em eq. 5.16 Σ_{\pm} e $\Sigma_{z\pm}$ em função de \mathbf{R}_{mj} , e Σ'_{\pm} e $\Sigma'_{z\pm}$ em função de \mathbf{R}_{lm} representam as auto-energias (do inglês, *self-energies*) não-interagentes, ou seja, elas não possuem repulsão Coulombiana e nem hopping entre impurezas. Tais auto-energias podem ser escritas como

$$\Sigma_{\pm}(\varepsilon, \mathbf{R}_{mj}) = \frac{\nu_0^2}{\mathcal{N}} \sum_{\mathbf{k}} \frac{\chi k_{\pm}^{\chi}}{\tilde{\varepsilon}_{\chi}^2 - (\hbar\nu_F k^{\chi})^2} e^{-i(\mathbf{k}^{\chi} + \chi\mathbf{Q}) \cdot \mathbf{R}_{mj}} \quad (5.20)$$

$$\Sigma_{z\pm}(\varepsilon, \mathbf{R}_{mj}) = \frac{\nu_0^2}{\mathcal{N}} \sum_{\mathbf{k}} \frac{\varepsilon + i\eta \mp \chi k_{z\pm}^{\chi}}{\tilde{\varepsilon}_{\chi}^2 - (\hbar\nu_F k^{\chi})^2} e^{-i(\mathbf{k}^{\chi} + \chi\mathbf{Q}) \cdot \mathbf{R}_{mj}} \quad (5.21)$$

$$\Sigma'_{\pm}(\varepsilon, \mathbf{R}_{lm}) = \frac{\nu_0^2}{\mathcal{N}} \sum_{\mathbf{q}} \frac{\chi' q_{\pm}^{\chi}}{\tilde{\varepsilon}_{\chi'}^2 - (\hbar\nu_F q^{\chi})^2} e^{-i(\mathbf{q}^{\chi} + \chi'\mathbf{Q}) \cdot \mathbf{R}_{lm}} \quad (5.22)$$

$$\Sigma'_{z\pm}(\varepsilon, \mathbf{R}_{lm}) = \frac{\nu_0^2}{\mathcal{N}} \sum_{\mathbf{q}} \frac{\varepsilon + i\eta \mp \chi' q_{z\pm}^{\chi}}{\tilde{\varepsilon}_{\chi'}^2 - (\hbar\nu_F q^{\chi})^2} e^{-i(\mathbf{q}^{\chi} + \chi'\mathbf{Q}) \cdot \mathbf{R}_{lm}} \quad (5.23)$$

Por fim, observe que eq. 5.16 é dependente de GFs para as impurezas j e l . Sendo assim, podemos reescrever a LDOS como

$$\rho_{LDOS}^x(\varepsilon) = \rho_0^x(\varepsilon) + \sum_j \Delta LDOS_{jj} + \sum_j \Delta LDOS_{j\bar{j}}, \quad (5.24)$$

no qual $\Delta LDOS_{jj}$ abrange os termos com as GFs diretas ($j = l$) e $\Delta LDOS_{j\bar{j}}$ abrange os termos com as GFs cruzadas ($j \neq l$).

5.3 Auto-energias

Sem dúvida o termo mais importante é a auto-energia não-interagente, que em certo sentido descreve a forma com que as impurezas sentem o sistema (hospedeiro) em que estão enterradas. Nas seções seguintes, iremos resolver as auto-energias apresentadas em eq. [5.20-5.23] para duas situações possíveis, as quais são $\mathbf{R} \neq 0$ e $\mathbf{R} = 0$, no qual \mathbf{R} é uma posição geral que pode assumir os valores de \mathbf{R}_{mj} e \mathbf{R}_{lm} , assim como \mathbf{R}_{jl} (como veremos mais afrente).

Para facilitar o cálculo das auto-energias, tornando-as mais gerais, substituiremos \mathbf{k}^x e \mathbf{q}^x por κ , também substituiremos os sinais (\pm/\mp) das eq. [5.20-5.23] por σ , admitindo valor positivo ou negativo dependendo da auto-energia escolhida, ou seja,

$$\sigma = \begin{cases} + & , \text{ para } \Sigma_+, \Sigma_{z+}, \Sigma'_+ \text{ e } \Sigma'_{z+} \\ - & , \text{ para } \Sigma_-, \Sigma_{z-}, \Sigma'_- \text{ e } \Sigma'_{z-} \end{cases}. \quad (5.25)$$

Além disso, como queremos escolher um \mathbf{R} para generalizar as posições do nosso sistema, precisamos de verificar se há alguma mudança nas auto-energias, dependendo do \mathbf{R} escolhido. Observando os vetores posição de cada elemento do nosso sistema na fig. 5.2, temos

$$\begin{cases} \mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_{m1} = |\mathbf{k}| \cdot |\mathbf{R}_{m1}| \cdot \cos \theta = kR_{m1} \cos \theta \\ \mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_{1m} = |\mathbf{k}| \cdot |\mathbf{R}_{1m}| \cdot \cos (\theta + \pi) = -kR_{1m} \cos \theta \end{cases} \quad (5.26)$$

$$\begin{cases} \mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_{m2} = |\mathbf{k}| \cdot |\mathbf{R}_{m2}| \cdot \cos \phi = kR_{m2} \cos \phi \\ \mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_{2m} = |\mathbf{k}| \cdot |\mathbf{R}_{2m}| \cdot \cos (\phi + \pi) = -kR_{2m} \cos \phi \end{cases} \quad (5.27)$$

Assim, observe que dependendo do \mathbf{R} escolhido há uma mudança de sinal em $\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_{mj}$ ou $\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_{lm}$. Sendo assim, escolheremos também um σ_R , admitindo valor positivo ou negativo dependendo da \mathbf{R} escolhido, ou seja,

$$\sigma_R = \begin{cases} + & , \text{ para } \mathbf{R} = \mathbf{R}_{mj} \text{ ou } \mathbf{R}_{12} \\ - & , \text{ para } \mathbf{R} = \mathbf{R}_{lm} \text{ ou } \mathbf{R}_{21} \end{cases}. \quad (5.28)$$

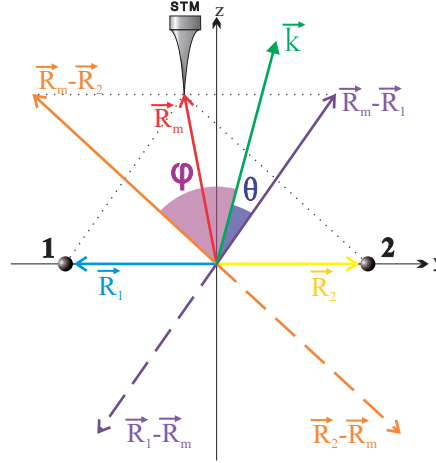


Figura 5.2: Vetores esquematizando a direção do momento \mathbf{k} (ou \mathbf{q}) e as posições de cada elemento do sistema, no qual \mathbf{R}_j e $\mathbf{R}_{\bar{j}}$ são a posição dos sítios onde as impurezas estão localizadas, \mathbf{R}_m representa a posição da ponta do STM, $\mathbf{R}_m - \mathbf{R}_j = \mathbf{R}_{mj}$ ($j = 1$ ou 2) é a posição da ponta do STM referente aos sítios, e $\mathbf{R}_l - \mathbf{R}_m = \mathbf{R}_{lm}$ ($l = 1$ ou 2) é a posição inversa a posição \mathbf{R}_{mj} .

Portanto, eq. [5.20-5.23] podem ser resumidas em duas auto-energias,

$$\Sigma_{\sigma}(\varepsilon, \mathbf{R}) = \frac{\nu_0^2}{\mathcal{N}} \sum_{\mathbf{k}} \frac{\chi^{\kappa_{\sigma}}}{\tilde{\varepsilon}_{\chi}^2 - (\hbar\nu_F\kappa)^2} e^{-i(\sigma_R\kappa + \chi\mathbf{Q}) \cdot \mathbf{R}} \quad (5.29)$$

$$\Sigma_{z\sigma}(\varepsilon, \mathbf{R}) = \frac{\nu_0^2}{\mathcal{N}} \sum_{\mathbf{k}} \frac{\varepsilon + i\eta - \sigma\chi\kappa_{z\sigma}}{\tilde{\varepsilon}_{\chi}^2 - (\hbar\nu_F\kappa)^2} e^{-i(\sigma_R\kappa + \chi\mathbf{Q}) \cdot \mathbf{R}} \quad (5.30)$$

Para resolvermos as auto-energias, precisamos transformar a somatória discreta $\sum_{\mathbf{k}}$ em uma integral contínua para um hospedeiro tridimensional. De acordo com ref. [24], esta aproximação é descrita por

$$\begin{aligned} \sum_{\mathbf{k}} &\rightarrow \left(\frac{1}{2\pi}\right)^3 \Omega \int d^3\mathbf{k}. \\ &\rightarrow \frac{\Omega}{(2\pi)^3} \iiint_{-\infty}^{+\infty} dk_x dk_y dk_z \end{aligned} \quad (5.31)$$

Mudando a variável de \mathbf{k} para \mathbf{k}^{χ}

$$\begin{cases} k_x = k_x^{\chi} + \chi Q_x \\ k_y = k_y^{\chi} + \chi Q_y \\ k_z = k_z^{\chi} + \chi Q_z \end{cases} \quad \begin{cases} dk_x = dk_x^{\chi} \\ dk_y = dk_y^{\chi} \\ dk_z = dk_z^{\chi} \end{cases} \quad \begin{cases} -\infty \leq k_x^{\chi} \leq +\infty \\ -\infty \leq k_y^{\chi} \leq +\infty \\ -\infty \leq k_z^{\chi} \leq +\infty \end{cases} \quad (5.32)$$

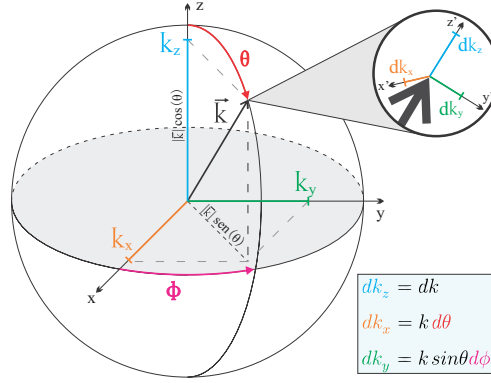


Figura 5.3: Vetores esquematizando a direção do momento \mathbf{k} (ou \mathbf{q}) e suas componentes no eixo x , y e z .

a eq. 5.31 pode ser reescrita da seguinte forma

$$\begin{aligned} \sum_{\mathbf{k}} &\rightarrow \left(\frac{1}{2\pi}\right)^3 \Omega \int d^3 \mathbf{k}^x \\ &\rightarrow \frac{\Omega}{(2\pi)^3} \iiint_{-\infty}^{+\infty} dk_x^x dk_y^x dk_z^x. \\ &\rightarrow \sum_{\mathbf{k}^x} \end{aligned}$$

Fazendo a mudança de coordenadas para esféricas, assim como esquematizado na em fig. 5.3, temos

$$\begin{cases} k_x^\tau = k^\tau \sin\theta \cos\phi \\ k_y^\tau = k^\tau \sin\theta \sin\phi \\ k_z^\tau = k^\tau \cos\theta \end{cases} \quad \begin{cases} dk_x^\tau = k^\tau d\theta \\ dk_y^\tau = k^\tau \sin\theta d\phi \\ dk_z^\tau = dk^\tau \end{cases} \quad \begin{cases} 0 \leq k^\tau \leq \infty \\ 0 \leq \theta \leq \pi \\ 0 \leq \phi \leq 2\pi \end{cases}, \quad (5.33)$$

o que nos leva a

$$\sum_{\mathbf{k}^x} \rightarrow \frac{\Omega}{(2\pi)^3} \int_0^\infty \int_0^\pi \int_0^{2\pi} |k^\tau|^2 \sin\theta d\phi d\theta dk^\tau. \quad (5.34)$$

Para $\boldsymbol{\kappa} = \mathbf{k}^x, \mathbf{q}^x$

$$\sum_{\boldsymbol{\kappa}} \rightarrow \frac{\Omega}{(2\pi)^3} \int_0^\infty \int_0^\pi \int_0^{2\pi} \kappa^2 \sin\theta d\phi d\theta d\kappa$$

Aplicando essa aproximação em eq. 5.29, o resultado tanto para $\mathbf{R} \neq 0$, quanto para $\mathbf{R} = 0$ é

$$\boxed{\Sigma_{\pm}(\mathbf{R}) = 0} \quad (5.35)$$

Sendo assim, vamos focar na resolução da auto-energia com momento no eixo z .

5.3.1 Auto-energia $\Sigma_{z\sigma}(\varepsilon, \mathbf{R})$ para $\mathbf{R} \neq 0$

Para o caso $\mathbf{R} \neq 0$, usando eq. 5.30 e transformando a somatória em uma integral contínua como fizemos em eq. 5.34, obteremos

$$\begin{aligned} \Sigma_{z\pm}(\mathbf{R}) &= \frac{\nu_0^2 \Omega}{\mathcal{N} (2\pi)^2} e^{-i\chi \mathbf{Q} \cdot \mathbf{R}} \left\{ \int_0^\infty \int_0^\pi \frac{\tilde{\varepsilon}_\chi \kappa^2 \sin(\theta) e^{-\sigma_R i \kappa R \cos \theta}}{\tilde{\varepsilon}_\chi^2 - (\hbar \nu_F \kappa)^2} d\theta d\kappa \right. \\ &\quad \left. \mp \chi \hbar \nu_F \int_0^\infty \int_0^\pi \frac{\kappa^3 \sin(\theta) \cos(\theta) e^{-\sigma_R i \kappa R \cos \theta}}{\tilde{\varepsilon}_\chi^2 - (\hbar \nu_F \kappa)^2} d\theta d\kappa \right\}, \end{aligned} \quad (5.36)$$

no qual, separaremos em duas integrais

$$\mathcal{I}_1 = \int_0^\infty \frac{\tilde{\varepsilon}_\chi \kappa^2}{\tilde{\varepsilon}_\chi^2 - (\hbar \nu_F \kappa)^2} \left[\int_0^\pi \sin(\theta) e^{-\sigma_R i \kappa R \cos \theta} d\theta \right] d\kappa, \quad (5.37)$$

$$\mathcal{I}_2 = \int_0^\infty \frac{\kappa^3}{\tilde{\varepsilon}_\chi^2 - (\hbar \nu_F \kappa)^2} \left[\int_0^\pi \sin \theta \cos \theta e^{-\sigma_R i \kappa R \cos \theta} d\theta \right] d\kappa, \quad (5.38)$$

para tornar o cálculo mais fácil de ser resolver. Resolvendo a integral de θ em \mathcal{I}_1 por substituição, no qual

$$\begin{cases} a = -\sigma_R i \kappa R \cos \theta \\ da = \sigma_R i \kappa R \sin \theta d\theta \\ -\sigma_R i \kappa R \leq a \leq +\sigma_R i \kappa R \end{cases}, \quad (5.39)$$

obteremos,

$$\int_0^\pi \sin(\theta) e^{-\sigma_R i \kappa R \cos \theta} d\theta = -\frac{i\sigma_R}{\kappa R} (e^{\sigma_R i \kappa R} - e^{-\sigma_R i \kappa R}), \quad (5.40)$$

que por sua vez, ao substituirmos em eq. 5.37 obteremos

$$\mathcal{I}_1 = -\frac{i\sigma_R}{R} \left[\int_0^\infty \frac{\tilde{\varepsilon}_\chi \kappa}{(\hbar \nu_F \kappa)^2 - \tilde{\varepsilon}_\chi^2} (e^{\sigma_R i \kappa R} - e^{-\sigma_R i \kappa R}) d\kappa \right]. \quad (5.41)$$

Devido ao fato de que κ é uma variável muda, chamaremos uma outra variável $\mathfrak{K} = -\kappa$ para tornar esta integral solúvel. Assim, usando

$$\begin{cases} -\kappa = \mathfrak{K} \\ d\kappa = -d\mathfrak{K} \\ 0 \leq \mathfrak{K} \leq -\infty \end{cases}, \quad (5.42)$$

substituindo em eq. 5.41 e resolvendo os dois casos no qual $\sigma_R = \pm$, obteremos

$$\mathcal{I}_1 = \frac{i}{R} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\tilde{\varepsilon}_\chi \kappa}{(\hbar \nu_F \kappa)^2 - \tilde{\varepsilon}_\chi^2} e^{i\kappa R} d\kappa. \quad (5.43)$$

Agora, resolvendo \mathcal{I}_2 , de acordo com ref. [32],

$$\int_0^\pi \sin(x) \cdot \cos(x) \cdot e^{\mp i \cdot a \cdot \cos(x)} dx = \mp \frac{2i}{a^2} [a \cdot \cos(a) - \sin(a)].$$

Sendo assim, a integral de θ em \mathcal{I}_2 pode ser descrita fazendo uso da fórmula de Euler $e^{\pm ix} = \cos(x) \pm i \sin(x)$ como

$$\begin{aligned} \int_0^\pi \sin \theta \cos \theta e^{-\sigma_R i \kappa R \cos \theta} &= -\frac{2i\sigma_R}{(\kappa R)^2} [\kappa R \cdot \cos(\kappa R) - \sin(\kappa R)] \\ &= -\frac{\sigma_R}{\kappa^2 R^2} [i\kappa R \cdot (e^{i\kappa R} + e^{-i\kappa R}) - (e^{i\kappa R} - e^{-i\kappa R})]. \end{aligned} \quad (5.44)$$

que por sua vez, ao substituirmos em eq. 5.38 obteremos

$$\begin{aligned} \mathcal{I}_2 &= -\frac{i\sigma_R}{R} \int_0^\infty \frac{\kappa^2}{\tilde{\varepsilon}_\chi^2 - (\hbar\nu_F\kappa)^2} (e^{i\kappa R} + e^{-i\kappa R}) d\kappa \\ &+ \frac{\sigma_R}{R^2} \int_0^\infty \frac{\kappa}{\tilde{\varepsilon}_\chi^2 - \kappa^2} (e^{i\kappa R} - e^{-i\kappa R}) d\kappa. \end{aligned} \quad (5.45)$$

Nos já calculamos o sendo termo desta equação em eq. 5.41. Para o primeiro termo, aplicando a substituição eq. 5.42, obtemos

$$\int_0^\infty \frac{\kappa}{\tilde{\varepsilon}_\chi^2 - \kappa^2} (e^{i\kappa R} - e^{-i\kappa R}) d\kappa = \int_{-\infty}^\infty \frac{\kappa^2}{\tilde{\varepsilon}_\chi^2 - (\hbar\nu_F\kappa)^2} e^{i\kappa R} d\kappa, \quad (5.46)$$

substituindo a solução dos dois termos de eq. 5.45, temos

$$\mathcal{I}_2 = -\frac{i\sigma_R}{R} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\kappa^2}{\tilde{\varepsilon}_\chi^2 - (\hbar\nu_F\kappa)^2} e^{i\kappa R} d\kappa + \frac{\sigma_R}{R^2} \int_{-\infty}^\infty \frac{\kappa}{\tilde{\varepsilon}_\chi^2 - (\hbar\nu_F\kappa)^2} e^{i\kappa R} d\kappa. \quad (5.47)$$

Para resolvermos \mathcal{I}_1 e \mathcal{I}_2 , faremos uso do teorema dos resíduos,

$$\begin{aligned} \mathcal{I}_1 &= \frac{i\tilde{\varepsilon}_\chi}{R\hbar^2\nu_F^2} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\kappa}{\kappa^2 - \left(\frac{\tilde{\varepsilon}_\chi}{\hbar\nu_F}\right)^2} e^{i\kappa R} d\kappa \\ &= \frac{i\tilde{\varepsilon}_\chi}{R\hbar^2\nu_F^2} \int_{-\infty}^\infty f_1(\kappa) d\kappa \\ &= -\frac{2\pi\tilde{\varepsilon}_\chi}{R\hbar^2\nu_F^2} \text{Res } f_1(\kappa) \end{aligned} \quad (5.48)$$

$$\begin{aligned}
 \mathcal{I}_2 &= \frac{i\sigma_R}{R\hbar^2\nu_F^2} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\kappa^2}{\kappa^2 - \left(\frac{\tilde{\varepsilon}_\chi}{\hbar\nu_F}\right)^2} e^{i\kappa R} d\kappa - \frac{\sigma_R}{R^2\hbar^2\nu_F^2} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\kappa}{\kappa^2 - \left(\frac{\tilde{\varepsilon}_\chi}{\hbar\nu_F}\right)^2} e^{i\kappa R} d\kappa \\
 &= \frac{i\sigma_R}{R\hbar^2\nu_F^2} \int_{-\infty}^{\infty} f_2(\kappa) d\kappa - \frac{\sigma_R}{R^2\hbar^2\nu_F^2} \int_{-\infty}^{\infty} f_1(\kappa) d\kappa \\
 &= -\frac{2\pi\sigma_R}{R\hbar^2\nu_F^2} \left[\text{Res } f_2(\kappa) + \frac{i}{R} \text{Res } f_1(\kappa) \right]
 \end{aligned} \tag{5.49}$$

Sabendo que os polos das duas funções $f_2(\kappa)$ e $f_1(\kappa)$ é $\beta = \pm\tilde{\varepsilon}_\chi/\hbar\nu_F$,

$$\begin{aligned}
 \text{Res } f_1(\kappa) &= \lim_{\kappa \rightarrow \frac{\tilde{\varepsilon}_\chi}{\hbar\nu_F}} \left(\kappa - \frac{\tilde{\varepsilon}_\chi}{\hbar\nu_F} \right) \cdot \frac{\kappa}{\kappa^2 - \left(\frac{\tilde{\varepsilon}_\chi}{\hbar\nu_F}\right)^2} e^{i\kappa R} \\
 &= \lim_{\kappa \rightarrow \frac{\tilde{\varepsilon}_\chi}{\hbar\nu_F}} \left(\kappa - \frac{\tilde{\varepsilon}_\chi}{\hbar\nu_F} \right) \cdot \frac{\kappa}{\left(\kappa - \frac{\tilde{\varepsilon}_\chi}{\hbar\nu_F}\right) \cdot \left(\kappa + \frac{\tilde{\varepsilon}_\chi}{\hbar\nu_F}\right)} e^{i\kappa R} \\
 &= \frac{1}{2} e^{iR\tilde{\varepsilon}_\chi/\hbar\nu_F}
 \end{aligned} \tag{5.50}$$

$$\begin{aligned}
 \text{Res } f_2(\kappa) &= \lim_{\kappa \rightarrow \frac{\tilde{\varepsilon}_\chi}{\hbar\nu_F}} \left(\kappa - \frac{\tilde{\varepsilon}_\chi}{\hbar\nu_F} \right) \cdot \frac{\kappa^2}{\kappa^2 - \left(\frac{\tilde{\varepsilon}_\chi}{\hbar\nu_F}\right)^2} e^{i\kappa R} \\
 &= \lim_{\kappa \rightarrow \frac{\tilde{\varepsilon}_\chi}{\hbar\nu_F}} \left(\kappa - \frac{\tilde{\varepsilon}_\chi}{\hbar\nu_F} \right) \cdot \frac{\kappa^2}{\left(\kappa - \frac{\tilde{\varepsilon}_\chi}{\hbar\nu_F}\right) \cdot \left(\kappa + \frac{\tilde{\varepsilon}_\chi}{\hbar\nu_F}\right)} e^{i\kappa R} \\
 &= \frac{\tilde{\varepsilon}_\chi}{2\hbar\nu_F} e^{iR\tilde{\varepsilon}_\chi/\hbar\nu_F}
 \end{aligned} \tag{5.51}$$

Substituindo os resíduos em eq. 5.48 e eq. 5.49, temos

$$\mathcal{I}_1 = -\frac{\pi\tilde{\varepsilon}_\chi}{R\hbar^2\nu_F^2} e^{iR\tilde{\varepsilon}_\chi/\hbar\nu_F} \tag{5.52}$$

$$\mathcal{I}_2 = -\frac{\pi\sigma_R}{R\hbar^3\nu_F^3} e^{iR\tilde{\varepsilon}_\chi/\hbar\nu_F} \left(\tilde{\varepsilon}_\chi + i\frac{\hbar\nu_F}{R} \right) \tag{5.53}$$

Por conseguinte, substituindo as integrais em eq. 5.36, temos

$$\Sigma_{z\pm}(\mathbf{R}) = -\frac{\Omega\nu_0^2}{4\mathcal{N}\pi R\hbar^2\nu_F^2} e^{i(R\tilde{\varepsilon}_\chi/\hbar\nu_F - \chi\mathbf{Q}\cdot\mathbf{R})} \left[\tilde{\varepsilon}_\chi \mp \chi\sigma_R \left(\tilde{\varepsilon}_\chi + i\frac{\hbar\nu_F}{R} \right) \right]. \tag{5.54}$$

Substituindo \mathcal{N} por eq. (3.7), finalmente é possível definir a auto-energia $\Sigma_{z\sigma}$ como sendo

$$\boxed{\Sigma_{z\sigma}(\varepsilon, \mathbf{R}) = -\frac{3\pi\nu_0^2\nu_F}{2D^3R} e^{i(R\tilde{\varepsilon}_\chi/\hbar\nu_F - \chi\mathbf{Q}\cdot\mathbf{R})} \left[\tilde{\varepsilon}_\chi - \sigma_R\sigma\chi \left(\tilde{\varepsilon}_\chi + i\frac{\hbar\nu_F}{R} \right) \right]} \tag{5.55}$$

5.3.2 Auto-energia $\Sigma_{z\sigma}(\varepsilon, \mathbf{R})$ para $\mathbf{R} = 0$

Para o caso $\mathbf{R} = 0$, usando eq. 5.30, temos

$$\Sigma_{z\pm}(\varepsilon, 0) = \frac{\nu_0^2}{\mathcal{N}} \sum_{\mathbf{k}^\chi} \frac{\tilde{\varepsilon}_\chi}{\tilde{\varepsilon}_\chi^2 - (\hbar\nu_F k^\chi)^2} \mp \frac{\hbar\nu_F \chi \nu_0^2}{\mathcal{N}} \sum_{\mathbf{k}^\chi} \frac{k_z^\chi}{\tilde{\varepsilon}_\chi^2 - (\hbar\nu_F k^\chi)^2} \quad (5.56)$$

A partir desta expressão, podemos reconhecer que o primeiro termo é a auto-energia para o semimetal de Dirac 3D, publicado por [2] para $\mathbf{R} = 0$ e $\eta \rightarrow 0^+$. Sendo assim, transformando a somatória em uma integral contínua como fizemos em eq. 5.34, obteremos

$$\Sigma_{z\sigma}(\varepsilon, 0) = \frac{\nu_0^2 \Omega}{2\mathcal{N}\pi^2} \int_0^D \frac{\varepsilon_\chi k^\chi{}^2}{\varepsilon_\chi^2 - (\hbar\nu_F k^\chi)^2} dk^\chi, \quad (5.57)$$

no qual $\varepsilon_\chi = \varepsilon - \chi Q_0$. No desenvolver dos cálculos, o segundo termo da eq. 5.56 resulta em zero ao resolver a integral contendo o diferencial $d\theta$, sobrando apenas o termo referente a auto-energia do semimetal de Dirac 3D. Sendo assim, de acordo com ref. [2] o resultado para esta auto-energia é descrito como (eq. 5.30)

$$\Sigma_0^\chi(\varepsilon, 0) = -\frac{3\varepsilon_\chi \nu_0^2}{D^2} \left(1 - \frac{\varepsilon_\chi}{2D} \ln \left| \frac{D + \varepsilon_\chi}{D - \varepsilon_\chi} \right| \right) - i\pi\nu_0^2 \frac{3\varepsilon_\chi^2}{2D^3}, \quad (5.58)$$

no qual $\rho_0^\chi(\varepsilon) = \frac{3\varepsilon^2}{D^3}$ é a DOS já apresentada em eq. 5.18.

5.4 Função de Green das impurezas

Por definição, a função de Green das impurezas é definida no domínio do tempo por

$$\mathcal{G}_{d_{j\sigma}d_{l\sigma'}}(\tau) = -\frac{i}{\hbar} \theta(\tau) Z_e^{-1} \sum_n e^{-\beta E_n} \langle n | \left[d_{j\sigma}(t), d_{l\sigma'}^\dagger(0) \right]_+ | n \rangle \quad (5.59)$$

Calculando a EOM para $\mathcal{G}_{d_{j\sigma}d_{l\sigma'}}(\tau)$, obtemos (eq. A.68 e eq. A.69)

$$(\varepsilon + i\eta - \varepsilon_{j\sigma} - \Sigma_0) \tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\sigma}d_{l\sigma}}(\varepsilon) = \delta_{jl} + \left(\Sigma_{z\bar{\sigma}}^{j\bar{j}} - t \right) \tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\bar{\sigma}}d_{l\sigma}}(\varepsilon) + U_j \tilde{\mathcal{G}}_{n_{j\bar{\sigma}}d_{j\sigma}d_{l\sigma}}(\varepsilon), \quad (5.60)$$

no qual, $\Sigma_0 = \sum_\chi \Sigma_0^\chi(\varepsilon, 0)$

Observe que $\tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\sigma}d_{l\sigma}}(\varepsilon)$, resulta em uma dependência de $\tilde{\mathcal{G}}_{n_{j\bar{\sigma}}d_{j\sigma}d_{l\sigma}}(\varepsilon)$ com quatro operadores. Sendo assim, também faz necessário o cálculo da EOM para $\tilde{\mathcal{G}}_{n_{j\bar{\sigma}}d_{j\sigma}d_{l\sigma}}(\tau)$. Entretanto, ao

calcular a EOM chegaremos a seguinte expressão (A.91)

$$\begin{aligned}
(\varepsilon + i\eta - \varepsilon_{j\sigma} - U_j) \tilde{\mathcal{G}}_{n_{j\bar{\sigma}}d_{j\sigma}d_{l\sigma'}}(\varepsilon) &= \delta_{jl}\delta_{\sigma\sigma'} \langle d_{j\sigma}d_{j\sigma}^\dagger \rangle + \delta_{jl}\delta_{\sigma\sigma'} \langle n_{j\bar{\sigma}} \rangle - t\tilde{\mathcal{G}}_{n_{j\bar{\sigma}}d_{j\bar{\sigma}}d_{l\sigma'}}(\varepsilon) \\
&+ t\tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\bar{\sigma}}^\dagger d_{j\bar{\sigma}}d_{j\sigma}d_{l\sigma'}}(\varepsilon) - t\tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\bar{\sigma}}^\dagger d_{j\bar{\sigma}}d_{j\bar{\sigma}}d_{l\sigma'}}(\varepsilon) \\
&+ \sum_{\mathbf{k}\chi} V_{j\mathbf{k}} \tilde{\mathcal{G}}_{n_{j\bar{\sigma}}c_{\mathbf{k}\chi\sigma}d_{l\sigma'}}(\varepsilon) + \sum_{\mathbf{k}\chi} V_{j\mathbf{k}} \tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\bar{\sigma}}^\dagger c_{\mathbf{k}\chi\bar{\sigma}}d_{j\sigma}d_{l\sigma'}}(\varepsilon) \\
&- \sum_{\mathbf{k}\chi} V_{j\mathbf{k}}^* \tilde{\mathcal{G}}_{c_{\mathbf{k}\chi\bar{\sigma}}^\dagger d_{j\bar{\sigma}}d_{j\sigma}d_{l\sigma'}}(\varepsilon). \tag{5.61}
\end{aligned}$$

Neste ponto, podemos perceber que o desenvolvimento da EOM de uma GF de quatro operadores gera outras GFs de quatro operadores, que ao serem calculadas resultaram em outras GFs de quatro operadores, e assim por diante em um processo interminável. É neste ponto que se vê necessário aplicação de uma método de aproximação para tornar o cálculo finito. O método de aproximação escolhido é o Hubbard I, como foi explicado da seção 4.3. Assim, aplicando eq. 4.18 nas seguintes GFs

$$\tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\bar{\sigma}}^\dagger d_{j\bar{\sigma}}d_{j\sigma}d_{l\sigma'}}(\varepsilon) = \langle d_{j\bar{\sigma}}^\dagger d_{j\bar{\sigma}} \rangle \tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\sigma}d_{l\sigma}}(\varepsilon) \tag{5.62}$$

$$\tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\bar{\sigma}}^\dagger d_{j\bar{\sigma}}d_{j\sigma}d_{l\sigma'}}(\varepsilon) = \langle d_{j\bar{\sigma}}^\dagger d_{j\bar{\sigma}} \rangle \tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\sigma}d_{l\sigma}}(\varepsilon) \tag{5.63}$$

$$\tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\bar{\sigma}}^\dagger c_{\mathbf{q}\chi\bar{\sigma}}d_{j\sigma}d_{l\sigma}}(\varepsilon) = \langle d_{j\bar{\sigma}}^\dagger V_{j\mathbf{k}}c_{\mathbf{q}\chi\bar{\sigma}} \rangle \tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\sigma}d_{l\sigma}}(\varepsilon) \tag{5.64}$$

$$\tilde{\mathcal{G}}_{c_{\mathbf{q}\chi\bar{\sigma}}^\dagger d_{j\bar{\sigma}}d_{j\sigma}d_{l\sigma}}(\varepsilon) = \langle V_{j\mathbf{k}}^*c_{\mathbf{q}\chi\bar{\sigma}}^\dagger d_{j\bar{\sigma}} \rangle \tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\sigma}d_{l\sigma}}(\varepsilon) \tag{5.65}$$

no qual, de acordo com ref. [27], $\langle d_{j\bar{\sigma}}^\dagger V_{j\mathbf{k}}c_{\mathbf{q}\chi\bar{\sigma}} \rangle = \langle d_{j\bar{\sigma}}V_{j\mathbf{k}}^*c_{\mathbf{q}\chi\bar{\sigma}}^\dagger \rangle$ e $\langle d_{j\bar{\sigma}}^\dagger d_{j\bar{\sigma}} \rangle = \langle d_{j\bar{\sigma}}^\dagger d_{j\bar{\sigma}} \rangle$. Assim, obtemos (eq. A.98)

$$\begin{aligned}
\tilde{\mathcal{G}}_{n_{j\bar{\sigma}}d_{j\sigma}d_{l\sigma}}(\varepsilon) &= \frac{\langle n_{j\bar{\sigma}} \rangle \delta_{jl}}{\varepsilon + i\eta - \varepsilon_{j\sigma} - U_j} - \frac{t\tilde{\mathcal{G}}_{n_{j\bar{\sigma}}d_{j\bar{\sigma}}d_{l\sigma}}(\varepsilon)}{\varepsilon + i\eta - \varepsilon_{j\sigma} - U_j} \\
&+ \frac{\sum_{\mathbf{k}\chi} V_{j\mathbf{k}} \tilde{\mathcal{G}}_{n_{j\bar{\sigma}}c_{\mathbf{k}\chi\sigma}d_{l\sigma}}(\varepsilon)}{\varepsilon + i\eta - \varepsilon_{j\sigma} - U_j}, \tag{5.66}
\end{aligned}$$

no qual $\langle n_{j\sigma} \rangle$ representa a ocupação de um elétron com spin σ na impureza no sítio e é descrito como a soma sobre todos os estados de elétrons ocupados com energia $\varepsilon \leq \varepsilon_F$ [23], ou seja,

$$\langle n_{j\sigma} \rangle = \int_{-D}^0 DOS_{jl}(\varepsilon)d\varepsilon, \tag{5.67}$$

sendo que

$$DOS_{jl} = -\frac{1}{\pi} \text{Im} \left\{ \sum_{\sigma} \tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\sigma}d_{l\sigma}}(\varepsilon) \right\} \tag{5.68}$$

representa a DOS das impurezas $j = 1, 2$. O cálculo dessas expressões, juntamente com a

DOS do hospedeiro (obtida em eq. A.36) se faz necessário para tornar possível obter um perfil de condutância via LDOS. Entretanto, de acordo com eq. 5.66 o cálculo resultou em uma dependência de $\tilde{\mathcal{G}}_{n_{j\bar{\sigma}}c_{\mathbf{k}\chi\sigma}d_{l\sigma}}(\varepsilon)$, uma nova GF desconhecida e com quatro operadores. Assim, calculando a EOM para $\tilde{\mathcal{G}}_{n_{j\bar{\sigma}}c_{\mathbf{k}\chi\sigma}d_{l\sigma}}(\tau)$, chegaremos na seguinte expressão

$$\begin{aligned}
(\varepsilon + i\eta) \tilde{\mathcal{G}}_{n_{j\bar{\sigma}}c_{\mathbf{k}\chi\sigma}d_{l\sigma}}(\varepsilon) &= - \left\langle d_{j\bar{\sigma}}^\dagger c_{\mathbf{k}\chi\sigma} \right\rangle \delta_{jl} \delta_{\bar{\sigma}\sigma'} + \chi (k_+^\chi \delta_{\sigma\downarrow} + k_{z+}^\chi \delta_{\sigma\uparrow}) \tilde{\mathcal{G}}_{n_{j\bar{\sigma}}c_{\mathbf{k}\chi\uparrow}d_{l\sigma'}}(\varepsilon) \\
&+ \chi (k_-^\chi \delta_{\sigma\uparrow} - k_{z-}^\chi \delta_{\sigma\downarrow}) \tilde{\mathcal{G}}_{n_{j\bar{\sigma}}c_{\mathbf{k}\chi\downarrow}d_{l\sigma'}}(\varepsilon) \\
&- t \tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\bar{\sigma}}^\dagger d_{j\bar{\sigma}} c_{\mathbf{k}\chi\sigma} d_{l\sigma}}(\varepsilon) + t \tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\bar{\sigma}}^\dagger d_{j\bar{\sigma}} c_{\mathbf{k}\chi\sigma} d_{l\sigma}}(\varepsilon) \\
&+ \sum_{\mathbf{q}\chi'} V_{j\mathbf{q}} \tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\bar{\sigma}}^\dagger c_{\mathbf{q}\chi'\bar{\sigma}} c_{\mathbf{k}\chi\sigma} d_{l\sigma'}}(\varepsilon) - \sum_{\mathbf{q}\chi'} V_{j\mathbf{q}}^* \tilde{\mathcal{G}}_{c_{\mathbf{q}\chi'\bar{\sigma}}^\dagger d_{j\bar{\sigma}} c_{\mathbf{k}\chi\sigma} d_{l\sigma'}}(\varepsilon) \\
&+ \sum_{j'} V_{j'\mathbf{k}}^* \tilde{\mathcal{G}}_{n_{j'\bar{\sigma}} d_{j'\sigma} d_{l\sigma'}}(\varepsilon)
\end{aligned} \tag{5.69}$$

Aplicando a aproximação Hubbard I em eq. 4.18 para as seguintes GFs

$$\tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\bar{\sigma}}^\dagger d_{j\bar{\sigma}} c_{\mathbf{k}\chi\sigma} d_{l\sigma}}(\varepsilon) = \left\langle d_{j\bar{\sigma}}^\dagger d_{j\bar{\sigma}} \right\rangle \tilde{\mathcal{G}}_{c_{\mathbf{k}\chi\sigma} d_{l\sigma}}(\varepsilon) \tag{5.70}$$

$$\tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\bar{\sigma}}^\dagger d_{j\bar{\sigma}} c_{\mathbf{k}\chi\sigma} d_{l\sigma}}(\varepsilon) = \left\langle d_{j\bar{\sigma}}^\dagger d_{j\bar{\sigma}} \right\rangle \tilde{\mathcal{G}}_{c_{\mathbf{k}\chi\sigma} d_{l\sigma}}(\varepsilon) \tag{5.71}$$

$$V_{j\mathbf{q}} \tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\bar{\sigma}}^\dagger c_{\mathbf{q}\chi'\bar{\sigma}} c_{\mathbf{k}\chi\sigma} d_{l\sigma}}(\varepsilon) = \left\langle d_{j\bar{\sigma}}^\dagger V_{j\mathbf{q}} c_{\mathbf{q}\chi'\bar{\sigma}} \right\rangle \tilde{\mathcal{G}}_{c_{\mathbf{k}\chi\sigma} d_{l\sigma}}(\varepsilon) \tag{5.72}$$

$$V_{j\mathbf{q}}^* \tilde{\mathcal{G}}_{c_{\mathbf{q}\chi'\bar{\sigma}}^\dagger d_{j\bar{\sigma}} c_{\mathbf{k}\chi\sigma} d_{l\sigma}}(\varepsilon) = \left\langle V_{j\mathbf{q}}^* c_{\mathbf{q}\chi'\bar{\sigma}}^\dagger d_{j\bar{\sigma}} \right\rangle \tilde{\mathcal{G}}_{c_{\mathbf{k}\chi\sigma} d_{l\sigma}}(\varepsilon), \tag{5.73}$$

no qual $\left\langle d_{j\bar{\sigma}}^\dagger d_{j\bar{\sigma}} \right\rangle = \left\langle d_{j\bar{\sigma}}^\dagger d_{j\bar{\sigma}} \right\rangle$ e $\left\langle V_{j\mathbf{q}} d_{j\bar{\sigma}}^\dagger c_{\mathbf{q}\chi'\bar{\sigma}} \right\rangle = \left\langle V_{j\mathbf{q}}^* c_{\mathbf{q}\chi'\bar{\sigma}}^\dagger d_{j\bar{\sigma}} \right\rangle$. Assim, obtemos (eq. A.134 e eq. A.135)

$$\begin{aligned}
(\varepsilon + i\eta) \tilde{\mathcal{G}}_{n_{j\bar{\sigma}}c_{\mathbf{k}\chi\sigma}d_{l\sigma}}(\varepsilon) &= \frac{\varepsilon + i\eta + \chi k_{z\bar{\sigma}}^\chi}{\tilde{\varepsilon}_\chi^2 - (\hbar\nu_F k^\chi)^2} V_{j\mathbf{k}}^* \tilde{\mathcal{G}}_{n_{j\bar{\sigma}}d_{j\sigma}d_{l\sigma}}(\varepsilon) \\
&+ \frac{\varepsilon + i\eta + \chi k_{z\bar{\sigma}}^\chi}{\tilde{\varepsilon}_\chi^2 - (\hbar\nu_F k^\chi)^2} V_{j\mathbf{k}}^* \tilde{\mathcal{G}}_{n_{j\bar{\sigma}}d_{j\sigma}d_{l\sigma}}(\varepsilon) \\
&+ \frac{\chi k_{\bar{\sigma}}^\chi}{\tilde{\varepsilon}_\chi^2 - (\hbar\nu_F k^\chi)^2} V_{j\mathbf{k}}^* \tilde{\mathcal{G}}_{n_{j\bar{\sigma}}d_{j\bar{\sigma}}d_{l\sigma}}(\varepsilon) \\
&+ \frac{\chi k_{\bar{\sigma}}^\chi}{\tilde{\varepsilon}_\chi^2 - (\hbar\nu_F k^\chi)^2} V_{j\mathbf{k}}^* \tilde{\mathcal{G}}_{n_{j\bar{\sigma}}d_{j\bar{\sigma}}d_{l\sigma}}(\varepsilon)
\end{aligned} \tag{5.74}$$

Finalmente, chegamos em uma GF dependente apenas de GFs já calculadas. Sendo assim, substituindo eq. 5.74 em eq. 5.66, que por conseguinte substituindo a equação resultante em eq. 5.60, obteremos a seguinte expressões para a GF das impurezas (eq. A.219 e eq. A.220)

$$\tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\sigma}d_{j\sigma}}(\varepsilon) = \frac{\lambda_{j\sigma}}{\varepsilon + i\eta - \varepsilon_{j\sigma} - \Sigma_0 - \tilde{\Pi}_{j\sigma} - \tilde{\Sigma}_{j\sigma}}, \tag{5.75}$$

$$\tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\sigma}d_{j\sigma}}(\varepsilon) = \frac{\Sigma_{z^-}^{j\bar{j}} - t}{\varepsilon + i\eta - \varepsilon_{j\sigma} - \Sigma_0} \lambda_{j\sigma} \tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\sigma}d_{j\sigma}}(\varepsilon) \quad (5.76)$$

no qual $\tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\sigma}d_{j\sigma}}(\varepsilon)$ é a chamada GF direta, responsável por fornecer a DOS direta entre as impurezas, e $\tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\sigma}d_{j\sigma}}(\varepsilon)$ é chamada GF cruzada, responsável por fornecer a interação impureza-impureza. Além disso, chamado peso espectral $\lambda_{j\sigma}$ é responsável pela amplitude dos picos de Hubbard na DOS, podendo ser definido como (eq. A.206)

$$\lambda_{j\sigma} = 1 + \frac{\langle n_{j\bar{\sigma}} \rangle U_j}{(\varepsilon + i\eta - \varepsilon_{j\sigma} - \Sigma_0 - U_j)}, \quad (5.77)$$

$\tilde{\Pi}_{j\sigma}$ e $\tilde{\Sigma}_{j\sigma}$ são auto-energias responsáveis pela separação dos picos de Hubbard, tais termos podem ser expressos como (eq. A.215 e eq. A.216)

$$\tilde{\Pi}_{j\sigma} = \lambda_{j\sigma} \lambda_{j\bar{\sigma}} \frac{t^2 - t \left(\Sigma_{z\bar{\sigma}}^{j\bar{j}} + \Sigma_{z\bar{\sigma}}^{j\bar{j}} \right)}{\varepsilon + i\eta - \varepsilon_{j\sigma} - \Sigma_0}, \quad (5.78)$$

$$\tilde{\Sigma}_{j\sigma} = \lambda_{j\sigma} \lambda_{j\bar{\sigma}} \frac{\Sigma_{z\bar{\sigma}}^{j\bar{j}} \Sigma_{z\bar{\sigma}}^{j\bar{j}}}{\varepsilon + i\eta - \varepsilon_{j\sigma} - \Sigma_0}. \quad (5.79)$$

Resumindo, assim como pode ser observado na Fig. 5.4 todo o processo dos cálculos apresentados nessa seção, o cálculo da EOM das GFs começando pela $\tilde{\mathcal{G}}_{c_{\mathbf{k}\chi\sigma}c_{\mathbf{q}\chi'\sigma}}$ resultaram em novas GFs, sendo necessário aplicar a EOM nessas novas GFs em um processo cíclico chegando ao caso de resultar em uma GF de quatro variáveis. Neste caso, é necessário a utilização de um método de aproximação para truncar GFs e tornar possível a finalização dos cálculos.

$$\tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\sigma}d_{l\sigma}} \xrightarrow{\text{EOM}} \tilde{\mathcal{G}}_{n_{j\bar{\sigma}}d_{j\sigma}d_{l\sigma}} \xrightarrow{\text{EOM}} \left\{ \begin{array}{l} \tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\bar{\sigma}}^\dagger d_{j\bar{\sigma}} d_{j\sigma} d_{l\sigma}} \approx \langle d_{j\bar{\sigma}}^\dagger d_{j\bar{\sigma}} \rangle \tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\sigma}d_{l\sigma}}(\varepsilon) \\ \tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\bar{\sigma}}^\dagger d_{j\bar{\sigma}} d_{j\sigma} d_{l\sigma}} \approx \langle d_{j\bar{\sigma}}^\dagger d_{j\bar{\sigma}} \rangle \tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\sigma}d_{l\sigma}}(\varepsilon) \\ \tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\bar{\sigma}}^\dagger c_{\mathbf{k}\chi\bar{\sigma}} d_{j\sigma} d_{l\sigma}} \approx \langle V_{j\mathbf{k}} d_{j\bar{\sigma}}^\dagger c_{\mathbf{k}\chi\bar{\sigma}} \rangle \tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\sigma}d_{l\sigma}}(\varepsilon) \\ \tilde{\mathcal{G}}_{c_{\mathbf{k}\chi\bar{\sigma}}^\dagger d_{j\bar{\sigma}} d_{j\sigma} d_{l\sigma}} \approx \langle V_{j\mathbf{k}}^* c_{\mathbf{k}\chi\bar{\sigma}}^\dagger d_{j\bar{\sigma}} \rangle \tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\sigma}d_{l\sigma}}(\varepsilon) \\ \tilde{\mathcal{G}}_{n_{j\bar{\sigma}}c_{\mathbf{k}\chi\sigma}d_{l\sigma}} \xrightarrow{\text{EOM}} \left\{ \begin{array}{l} \tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\bar{\sigma}}^\dagger d_{j\bar{\sigma}} c_{\mathbf{k}\chi\sigma} d_{l\sigma}} \approx \langle d_{j\bar{\sigma}}^\dagger d_{j\bar{\sigma}} \rangle \tilde{\mathcal{G}}_{c_{\mathbf{k}\chi\sigma}d_{l\sigma}} \\ \tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\bar{\sigma}}^\dagger d_{j\bar{\sigma}} c_{\mathbf{k}\chi\sigma} d_{l\sigma}} \approx \langle d_{j\bar{\sigma}}^\dagger d_{j\bar{\sigma}} \rangle \tilde{\mathcal{G}}_{c_{\mathbf{k}\chi\sigma}d_{l\sigma}} \\ \tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\bar{\sigma}}^\dagger c_{\mathbf{q}\chi'\bar{\sigma}} c_{\mathbf{k}\chi\sigma} d_{l\sigma}} \approx \langle V_{j\mathbf{q}} d_{j\bar{\sigma}}^\dagger c_{\mathbf{q}\chi'\bar{\sigma}} \rangle \tilde{\mathcal{G}}_{c_{\mathbf{k}\chi\sigma}d_{l\sigma}} \\ \tilde{\mathcal{G}}_{c_{\mathbf{q}\chi'\bar{\sigma}}^\dagger d_{j\bar{\sigma}} c_{\mathbf{k}\chi\sigma} d_{l\sigma}} \approx \langle V_{j\mathbf{q}}^* c_{\mathbf{q}\chi'\bar{\sigma}}^\dagger d_{j\bar{\sigma}} \rangle \tilde{\mathcal{G}}_{c_{\mathbf{k}\chi\sigma}d_{l\sigma}} \\ \tilde{\mathcal{G}}_{n_{j\bar{\sigma}}d_{j\sigma}d_{l\sigma}} \end{array} \right. \end{array} \right.$$

Figura 5.4: Sumarização dos cálculos desenvolvidos desde a GF $\tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\sigma}d_{l\sigma}}$ até o fechamento do cálculo em $\tilde{\mathcal{G}}_{n_{j\bar{\sigma}}d_{j\sigma}d_{l\sigma}}$. O sinal “ \approx ” representa a utilização da aproximação de campo médio, como explicado na seção 4.3.

Capítulo 6

RESULTADOS E DISCUSSÃO

Considerando os parâmetros utilizados na ref. [1, 2], para duas impurezas idênticas situadas em $\mathbf{R}_j = (0, \mp 1, 0)$ nm enterradas no interior do WSM e com níveis de energia $\varepsilon_d = -0.07D$, no qual estão hibridizadas com os elétrons livres do WSM com amplitude de hibridização $\nu_0 = 0.14D$ das impureza j com o hospedeiro, e repulsão Coulombiana $U_j = 0.14D$. Além disso, foi considerado a velocidade de Fermi $\hbar\nu_F = 15 eV\text{\AA}$ e $D \approx 0.2 eV$. O conjunto desses parâmetros correspondem a simetria do regime de Anderson ($2\varepsilon_{d_{j\sigma}} + U_j = \varepsilon_F = 0$).

Analisando primeiramente o desenvolvimento dos cálculos do TIAM, podemos perceber a influência que a presença da segunda impureza causa no sistema. Pelos cálculos, concluímos que a impureza j sente a presença da impureza \bar{j} através da amplitude de hibridização V_{jk} , que posteriormente resulta na auto-energia eq. 5.55, que foi demonstrada na seção 5.3.1. Por sua vez, esta auto-energia resulta nas auto-energias eq. 5.79 e eq. 5.79, que duplicam os picos de Hubbard. Além disso, outros termos aparecem nos cálculos, ressaltando a contribuição que a impureza \bar{j} exerce no sistema, por exemplo a GF direta da impureza \bar{j} [$\tilde{\mathcal{G}}_{d_{\bar{j}\sigma}d_{\bar{j}\sigma}}(\varepsilon)$] e a GF cruzada dependente da impureza j e \bar{j} [$\tilde{\mathcal{G}}_{d_{\bar{j}\sigma}d_{j\sigma}}(\varepsilon)$].

O resultado da presença da impureza \bar{j} também pode ser observado comparando o esboço dos gráficos para os dois sistemas. Tais gráficos podem ser observados na Fig. 6.1, no qual estão plotadas as DOS e LDOS para o TIAM e para o modelo de Anderson de uma impureza (do inglês, *SIAM: Single impurity Anderson model*). No caso do TIAM, pode-se observar que a DOS possui quatro picos de Hubbard de largura finita, o que difere do modelo SIAM, que possui apenas dois picos de Hubbard posicionados em ε_d e $\varepsilon_d + U$. A posição desses picos está relacionada diretamente com a posição dos estados ocupados pelos portadores de cargas, e essa

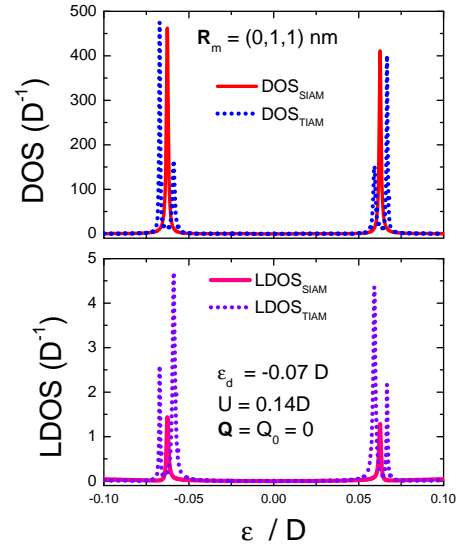


Figura 6.1: Gráficos da DOS e LDOS para o SIAM e TIAM.

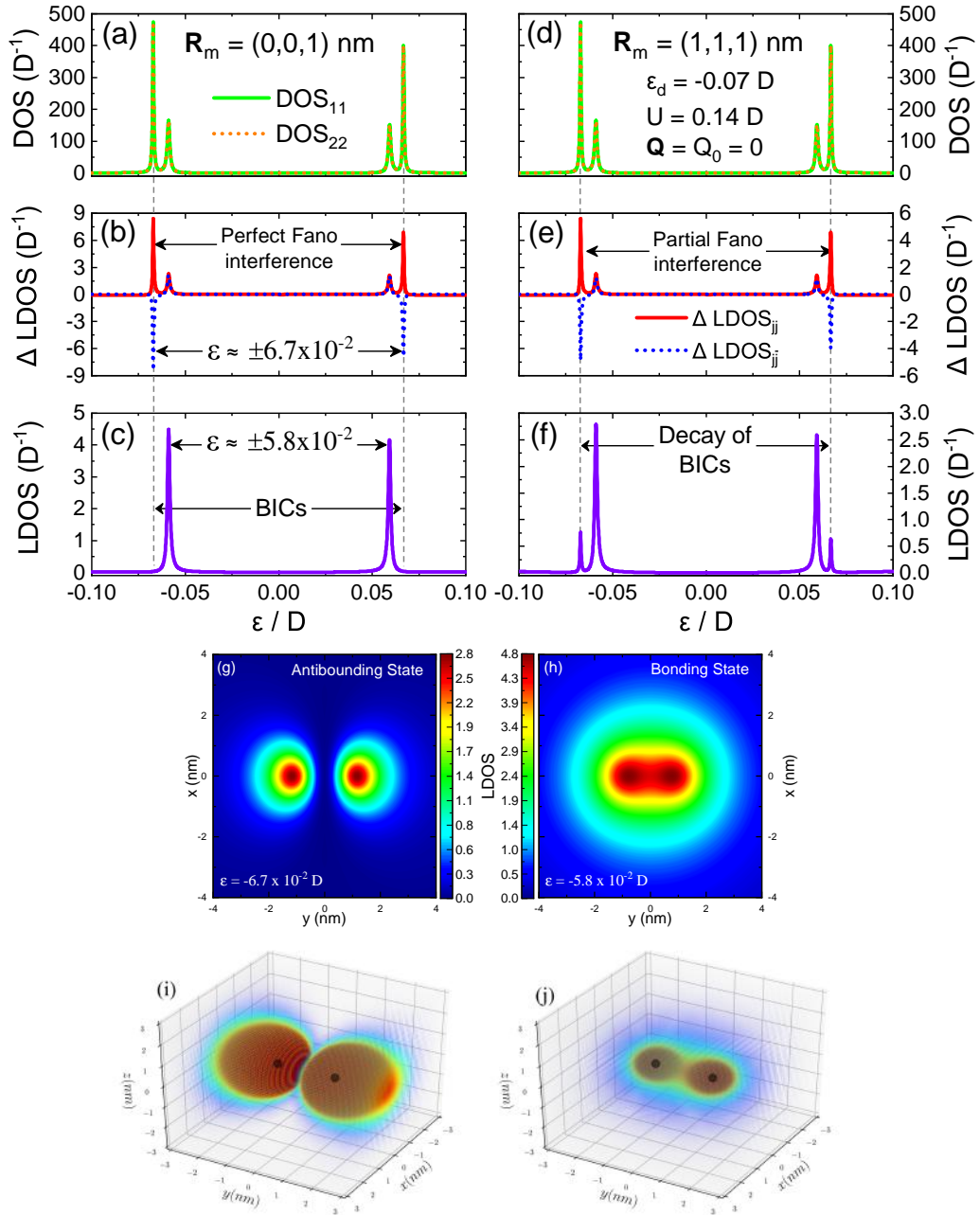


Figura 6.2: Gráficos da DOS (painéis ad), $\Delta LDOS$ (painéis be), $LDOS$ (painéis cf), orbitais 2D (painéis gh) e orbitais 3D (painéis ij) das impurezas localizadas em $\mathbf{R}_j = (0, \mp 1, 0)$ no *bulk* de um 3D-DSM. As colunas (abc) e (def) são para as respectivas posições $\mathbf{R}_m = (0, 0, 1)$ nm e $\mathbf{R}_m = (1, 1, 1)$ nm da ponta de STM, onde também são mostrados o efeito do BIC e seu decaimento, assim como apontado por ref. [2]. Nos painéis (g-j) são mostradas as ligações químicas entre as impurezas do 3D-DSM.

característica dos picos de Hubbard na DOS é idêntica à apresentada no Capítulo 3.

No caso de um 3D-DSM, representado na Fig. 6.2, observamos que os painéis (ad) possuem curvas de densidades de estados $DOS_{jj} = DOS_{11} = DOS_{22}$, apresentando as duplas de ressonâncias localizadas em torno de ε_d e $\varepsilon_d + U$, caracterizando a presença da impureza \bar{j} no sistema.

Na Fig. 6.2(be), é possível observar ressonâncias (linha vermelha) e antirressonâncias Fano (linha tracejada azul) interferindo entre si de forma construtiva e destrutiva. Sendo que, os estados em que há interferência destrutiva, são chamados de antiligantes e os estados que há interferência construtiva são chamados de ligantes. Assim, é possível observar o estado fundamental (pico em $\varepsilon = -6.7 \cdot 10^{-2}D$), desta molécula, a interação entre os dois átomos corresponde a um estado antiligante, enquanto que o primeiro estado excitado corresponde a um estado ligante.

É importante ressaltar que o estado antiligante não é comumente encontrado na natureza, já que o estado de interação entre as moléculas costuma sempre ser o estado ligante. Entretanto, segundo ref. [2], este tipo de efeito ocorre devido ao tunelamento indireto entre as impurezas mediante aos elétrons quasirelativísticos do 3D-DSM.

Na Fig. 6.2(c), comparando com o painel (a), observa-se a ausência de duas ressonância na LDOS, levando-nos a afirmar que o elétron ficou aprisionado no contínuo do *bulk*, tornando-o indetectável para a ponta de STM na posição $\mathbf{R}_m = (0, 0, 1)$, resultando assim no efeito chamado BIC, como explicado na Seção 1.1. Em contra partida, na Fig. 6.2(f), para a ponta na posição $\mathbf{R}_m = (1, 1, 1)$, observamos as quatro ressonâncias novamente, o que não caracterizaria como um BIC, pois, segundo a literatura [8, 9], para ser considerado um BIC o elétron deveria estar aprisionado no *bulk* independente da localização da ponta de STM. Esse efeito do decaimento dos BICs também foi discutido e apontado por ref. [2], o qual conclui com a inserção de um novo conceito de BIC como sendo a interferência destrutiva perfeita da ressonância e antirressonância Fano observada no painel (b), o que difere do BIC usualmente utilizado em literaturas anteriores à publicação da ref. [2].

No Cap. 2 falamos sobre o Weyl com quebra de IS e explicamos que os nós de Weyl

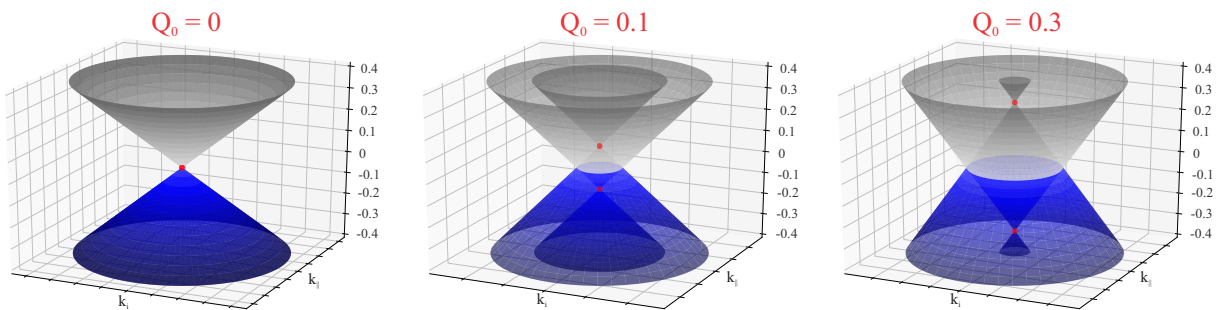


Figura 6.3: Gráficos da estrutura de bandas de um WSM para diferentes valores de Q_0 , mostrando a quebra de IS cria estados no nível de Fermi ($\varepsilon_F = 0$). Os pontos vermelhos representam os nós de Weyl, no qual para o caso em que a IS é quebrada, eles possuem mesmo momento k , porém energias diferentes.

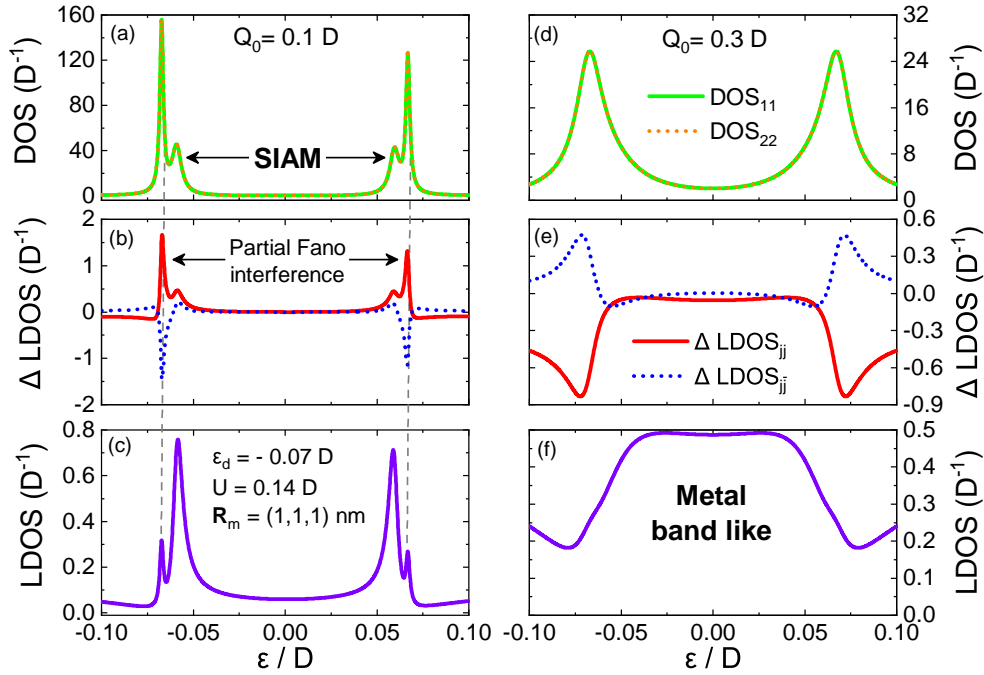


Figura 6.4: Gráficos da DOS (painéis ad), $\Delta LDOS$ (painéis be) e $LDOS$ (painéis cf) de um WSM com quebra de IS. As colunas (abc) e (def) são, respectivamente, para $Q_0 = 0.1D$ e $Q_0 = 0.3D$. Pode-se verificar que quanto mais se aumenta o valor de Q_0 , ocorre um alargamento dos picos de Hubbard, até o ponto que os dois picos tornam-se um só (abaixo e acima de ε_F), o que caracteriza o sistema como um SIAM. Continuando a aumentar o valor de Q_0 , começa a aparecer estados no nível de Fermi, caracterizando-o como um metal.

separam-se em direções opostas no eixo das energias, alargando a sua estrutura banda, assim como esboçado na Fig. 6.3. Ao alargar a sua estrutura de bandas no nível Fermi, o semimetal deixa de apresentar um pseudo-gap e passa a apresentar estados no nível de Fermi, passando característica de uma semimetal.

O alargamento da banda do WSM no nível de Fermi pode ser observado na Fig. 6.4, no qual apresenta ressonâncias mais largas na coluna (abc) se comparado com a coluna (def) da Fig. 6.2. O alargamento da dupla de ressonâncias em ε_d e $\varepsilon_d + U$ torna-se mais proeminente a medida que Q_0 aumenta, até o ponto que a dupla de ressonâncias torna-se uma única ressonância (ainda localizada em ε_d e $\varepsilon_d + U$), como mostrado na coluna (def) da Fig. 6.4. Neste ponto, este sistema é semelhante ao de um SIAM, como apresentado na Fig. 6.1. Sendo assim, pode-se afirmar que as impurezas não sentem mais a presença uma da outra, pois a característica que deixa evidente esta interação na DOS é a dupla de ressonâncias em ε_d e $\varepsilon_d + U$.

Além disso, observado a LDOS do sistema, nota-se que com o aumento de Q_0 surgem estados no nível de Fermi, até o ponto que o Weyl deixa de ser um semimetal e passa a apresentar características de um metal.

No Cap. 2 falamos sobre o WSM com quebra de TRS, que também é abordado por ref. [1, 5], falamos também na Seção 2.1 sobre o conceito matemático da TRS, e explicamos que ao se quebrar a TRS do WSM, os nós de Weyl sofrem uma separação da direção do eixo dos

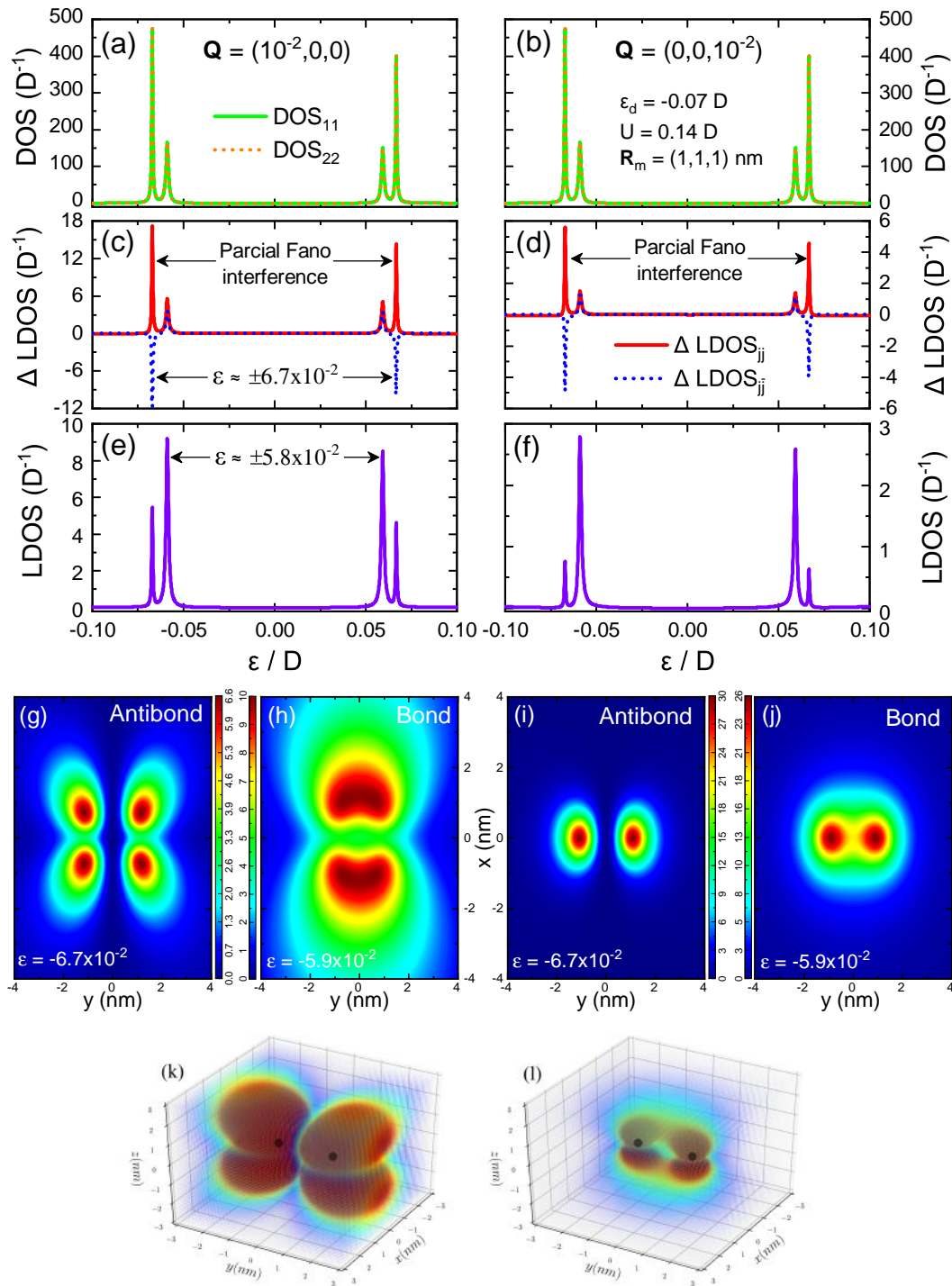


Figura 6.5: Gráfico da DOS (painéis ad), $\Delta LDOS$ (painéis be), $LDOS$ (painéis cf), orbitais bidimensionais (painéis g-j) e orbitais tridimensionais (painéis kl) das impurezas localizadas em $\mathbf{R}_j = (0, \mp 1, 0)$ no *bulk* de um WSM com quebra de TRS. Os painéis (abcgh) e (defijkl) são para $\mathbf{Q} = Q_x = (10^{-2}, 0, 0)$ e $\mathbf{Q} = Q_z = (0, 0, 10^{-2})$, respectivamente.

momentos, Fig. 2.2(c).

Observando a Fig. 6.5, na qual contem a DOS , $\Delta LDOS$, $LDOS$ do WSM com quebra de TRS, para dois diferentes valores de \mathbf{Q} , e com a ponta de STM localizada em $\mathbf{R}_m = (1, 1, 1)$, nós encontramos resultados similares aos do 3D-DSM, apresentado anteriormente, com diferença apenas nas amplitudes das ressonâncias. O novo resultado, que difere dos orbitais do 3D-DSM da Fig. 6.2, encontra-se quando quebramos a TRS aplicando uma quantidade $\mathbf{Q} = Q_x$ e $\mathbf{Q} = Q_z$, e olhamos para os orbitais das impurezas, nas energias $\varepsilon = -6.7 \cdot 10^{-2}D$ e $\varepsilon = -5.9 \cdot 10^{-2}D$, o qual ocorre a formação de um par de orbitais de ligações química π para os estados antiligantes (painéis gj) e ligantes (painéis hi) e . Isto significa que os elétrons foram excitados de ondas s para os ondas p , o que pelos cálculos isso ocorre devido a inserção do termo $e^{-i\chi\mathbf{Q}\cdot\mathbf{R}}$ na auto-energia escrita em eq. 5.55.

É importante deixar claro para o leitor que embora os painéis (ij) da Fig. 6.5 possam parecer com orbitais s , assim como apresentado nos os painéis (gh) da Fig. 6.2, os painéis (ij) ainda são orbitais do tipo p . Esta falsa impressão de obter orbitais aparentemente s para o WSM com quebra de TRS é apenas uma ilusão causada devido à bidimensionalidade do gráfico em (ij). Isto fica mais evidente na Fig. 6.6, no qual temos a representação de um orbital ligante para \mathbf{Q} nas direções Q_x e Q_z , onde na “sombra” de (ab) temos a representação do gráfico bidimensional feito pela ponta de STM, resultando nos painéis (hj) da Fig. 6.5. Observe que o pseudo-campo \mathbf{Q} direciona a nuvem eletrônica, o que para o painel (a), a ponta de STM observa tanto a parte superior quanto a parte inferior do orbital ligante, resultando no painel (h) da Fig. 6.5, mas no painel (b) a ponta de STM observa apenas a parte superior do orbital ligante, quanto que a parte inferior está ocultada pela parte superior, resultando no painel (j) da Fig. 6.5.

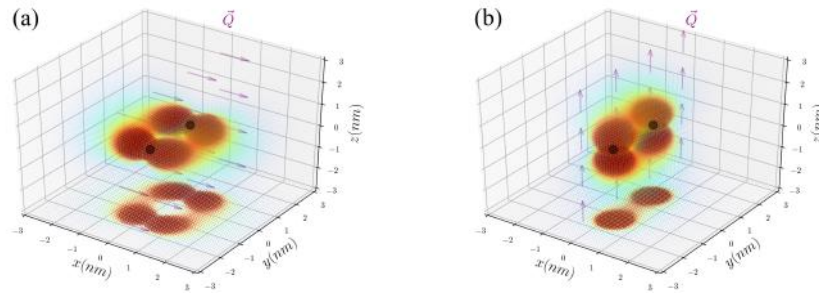


Figura 6.6: Gráficos dos orbitais ligantes para a ligação π de um WSM com quebra de TRS, no qual o painel (a) é para o caso $\mathbf{Q} = Q_x$ e (b) para $\mathbf{Q} = Q_z$. Em cada gráfico, na parte superior há a representação tridimensional do orbital e na parte inferior (na “sombra” do orbital) a representação bidimensional do que a ponta de STM observa.

Capítulo 7

CONCLUSÕES

Em síntese, mostramos que a equação de Weyl contendo tanto as componentes de Dirac, Weyl com quebra de IS (Weyl não-centrossimétrico) e Weyl com quebra de TRS (Weyl magnético) descreve a estrutura de banda de cada um dos três casos separadamente. Sendo que para o caso em que consideramos $Q_0 = \mathbf{Q} = 0$, é possível resgatar e obter os mesmos resultados publicados por Phys. Rev. B 96, 041112(R) (2017) [2] para um 3D-DSM.

Notamos que ao quebrarmos a IS do WSM, inserindo o parâmetro Q_0 , ocorre um alargamento dos picos de ressonância, até o ponto que o sistema passa a comportar-se como um SIAM, no qual uma impureza deixa de sentir a presença da segunda impureza. Isto ocorre, pois com a quebra da IS, o WSM perde a sua propriedade de meio relativístico, no qual as impurezas distantes perdem a interação uma com a outra.

Ainda no WSM com quebra de IS, observou-se que aumentando o valor de Q_0 , a estrutura de bandas do material apresenta estados no nível de Fermi, até o ponto que o material passa a apresentar uma estrutura de bandas semelhante a de um metal.

Para o caso do WSM com quebra de TRS, inserindo o parâmetro \mathbf{Q} , nas direções Q_x e Q_z , os elétrons são excitados de ondas s para as ondas p , formando uma molécula de ligação química do tipo π . Essa excitação de elétrons da nuvem eletrônica ocorre devido a inserção do termo $e^{-i\mathbf{x}\cdot\mathbf{Q}}$ na auto-energia em eq. 5.55. Além disso, também observou-se que a inserção do parâmetro \mathbf{Q} direcional os orbitais das impurezas.

É importante ressaltar, que a discussão e apresentação dos resultados para $\mathbf{Q} = Q_y$, faz parte da dissertação de mestrado intitulada “*Interação entre impurezas enterradas em um semimetal de Weyl: Caso magnético*”, escrita pelo mestrando e colega de grupo William N. Mizobata. A inserção de $\mathbf{Q} = Q_y$ magnetiza as impurezas, o que foge do escopo deste trabalho, já que trata-se dos resultados para não magnetização das impurezas.

Os resultados apresentados nessa dissertação (assim como os resultados contidos na tese do mestrando Mizobata), ainda estão em processo de construção para escrita de um artigo científico que possivelmente será publicado no ano de 2019.

Por fim, ressaltamos a importância desses estudos para a física da matéria condensada, uma vez que estes efeitos não são naturalmente encontrados em moléculas diatômicas.

Referências Bibliográficas

- [1] Shi-Han Zheng, Rui-Qiang Wang, Min Zhong, and Hou-Jian Duan, [Sci. Rep. 6, 36106 \(2016\)](#).
- [2] Y. Marques, A. E. Obispo, L. S. Ricco, M. de Souza, I. A. Shelykh, and A. C. Seridonio, [Phys. Rev. B 96, 041112\(R\) \(2017\)](#).
- [3] M. Ternes, A. J. Heinrich, and W. Schneider, [J. Phys.: Condens. Matter 21 053001 \(2008\)](#).
- [4] A. E. Miroshnichenko, S. Flach, and Y. S. Kivshar, [Rev. Mod. Phys. 82, 2257 \(2010\)](#).
- [5] Hao-Ran Chang, Jianhui Zhou, Shi-Xiong Wang, Wen-Yu Shan, and Di Xiao, [Phys. Rev. B 92, 241103\(R\) \(2015\)](#).
- [6] B. Galilo and A. Turner (2013). *Weyl Semimetal* (Master thesis). Universiteit Van Amsterdam, Insitute of Physics, Amsterdã, Países Baixos. Retirado de [FNWI - Physics and Astronomy](#).
- [7] A. A. Burkov and L. Balents, [Phys. Rev. Lett. 107, 127205 \(2011\)](#).
- [8] J. von Neumann and E. Wigner, [Phys. Z. 30, 465 \(1929\)](#).
- [9] A. S. Weighman. *The Collected Works of Eugene Paul Wigner* (1993). Volume I. Springer-Verlag Berlin Heidelberg. ISBN: 978-3-662-02781-3.
- [10] P. A. M. Dirac, [Proc. Roy. Soc. Lond., 117, 610-624 \(1928\)](#).
- [11] A. Plotnitsky, [Found. Phys. 45, 1222 \(2015\)](#).
- [12] A. H. Castro Neto, F. Guinea, N. M. R. Peres, K. S. Novoselov, and A. K. Geim, [Rev. Mod. Phys. 81, 109 \(2009\)](#)
- [13] N. P. Armitage, E. J. Mele, and A. Vishwanath, [Rev. Mod. Phys. 90, 015001 \(2018\)](#).
- [14] H. Weyl, [Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A. 15, 323 \(1929\)](#).
- [15] P. S. Baireuther (2017). *On transport properties of Weyl semimetals* (Doctoral Thesis). University of Leiden, Netherlands. ISBN: 978-90-8593-292-5.

- [16] T. D. Lee and C. N. Yang, [Phys. Rev. 104, 254 \(1956\)](#)
- [17] C. S. Wu, E. Ambler, R. W. Hayward, D. D. Hoppes, and R. P. Hudson, [Phys. Rev. 105, 1413 \(1957\)](#)
- [18] A. G. Grushin, J. W. F. Venderbos, A. Vishwanath, and R. Ilan, [Phys. Rev. X 6, 041046 \(2016\)](#).
- [19] M. M. Vazifeh and M. Franz. [Phys. Rev. Lett. 111, 027201 \(2013\)](#)
- [20] S.-Y. Xu, *et al.* [Science 349 \(6248\): 613–617 \(2015\)](#).
- [21] P. W. Anderson, [Phys. Rev. 124, 41 \(1961\)](#).
- [22] A. Altland, and B. Simons. *Condensed Matter Field Theory*. 2nd edition, Cambridge University Press, 2010. [ISBN-13 978-0-521-76975-4](#).
- [23] P. Phillips. *Advanced Solid State Physics*. 2nd edition, Cambridge University Press, 2012. [ISBN 978-0-521-19490-7](#).
- [24] I. S. Oliveira e V. L. B. de Jesus. *Introdução à Física do Estado Sólido*. 2ª edição, Editora Livraria da Física, 2011. [ISBN 978-85-7861-061-6](#).
- [25] H. Bruus and K. Flensberg. *Many-body Quantum Theory in Condensed Matter Physics: An Introduction*. Oxford Graduate Texts, 2004. [ISBN-13: 978-0198566335](#).
- [26] E. W. Weisstein. Heaviside Step Function. Available from [Wolfram MathWorld](#).
- [27] Antonio C. Seridonio. *Lecture on Quantum Transport: Kondo effect, STM, Green's functions, Anderson model, Fano interference and Hubbard I approximation*. (**Unpublished document**) Oct 6th, 2013.
- [28] J. Hubbard, [Proc. R. Soc. London, Ser. A 276, 238 \(1963\)](#).
- [29] G. D. Mahan. Seção 2.7 Dyson's Equation. *Many-Particle Physics*. 3rd edition, Springer US, 2000. [ISBN 978-1-4757-5714-9](#).
- [30] G. B. Arfken, H. J. Weber and F. E. Harris. *Mathematical Methods for Physicists*. 7th edition, Elsevier, 2013. [ISBN: 978-0-12-384654-9](#).
- [31] R. F. Camargo (2005). *1.5 - Valor principal de Cauchy* (pag. 22-25). Em: *Do Teorema de Cauchy ao Método de Cagniard* (Dissertação de mestrado). IMECC UNICAMP, Campinas, São Paulo, Brasil. Retirado de [Repositório da Unicamp](#).
- [32] Wolfram Alpha: computational intelligence. [Link](#).
- [33] L. Balents, [Physics 4, 36 \(2011\)](#).

APÊNDICE

Apêndice A

Weyl Full Project 2018

A.1 Effective Hamiltonian

The effective low energy Hamiltonian describing the Weyl semimetal (the Hamiltonian of the host) is given by

$$\mathcal{H}_0 = \sum_{\mathbf{k}, \chi} \psi_{\chi}^{\dagger}(\mathbf{k}) h_{\chi}(\mathbf{k}) \psi_{\chi}(\mathbf{k}), \quad (\text{A.1})$$

in which, according to [A1]

$$h_{\chi} = \chi [\hbar v_F \boldsymbol{\sigma} \cdot (\mathbf{k} - \chi \mathbf{Q}) + \sigma_0 Q_0], \quad (\text{A.2})$$

where χ accounts the chirality of the spinor ($\chi = \pm$) and , in which $\mathbf{Q} = Q_x \hat{i} + Q_y \hat{j} + Q_z \hat{k}$ is the position of the chirality and $\mathbf{k} = k_x \hat{i} + k_y \hat{j} + k_z \hat{k}$ is the momentum. Besides, the Pauli matrices $\boldsymbol{\sigma} = \sigma_x \hat{i} + \sigma_y \hat{j} + \sigma_z \hat{k}$ are defined by

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad (\text{A.3})$$

and

$$\sigma_0 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix},$$

and our spinors can be represented as

$$\psi_{\chi}(\mathbf{k}) = \begin{pmatrix} c_{\mathbf{k}\chi\uparrow} \\ c_{\mathbf{k}\chi\downarrow} \end{pmatrix}, \quad \psi_{\chi}^{\dagger}(\mathbf{k}) = \begin{pmatrix} c_{\mathbf{k}\chi\uparrow}^{\dagger} & c_{\mathbf{k}\chi\downarrow}^{\dagger} \end{pmatrix}. \quad (\text{A.4})$$

For the case of simplicity, we are going to substitute $\mathbf{k}^{\chi} = \mathbf{k} - \chi \mathbf{Q}$ [A2] in Eq. (A.2). In other hands, we know that

$$\begin{aligned} \mathbf{k}^{\chi} &= \mathbf{k} - \chi \mathbf{Q} \\ &= k_x^{\chi} \hat{i} + k_y^{\chi} \hat{j} + k_z^{\chi} \hat{k} \\ &= (k_x - \chi Q_x) \hat{i} + (k_y - \chi Q_y) \hat{j} + (k_z - \chi Q_z) \hat{k} \end{aligned} \quad (\text{A.5})$$

$$\begin{aligned} \mathbf{q}^{\chi} &= \mathbf{q} - \chi' \mathbf{Q} \\ &= q_x^{\chi} \hat{i} + q_y^{\chi} \hat{j} + q_z^{\chi} \hat{k} \\ &= (q_x - \chi' Q_x) \hat{i} + (q_y - \chi' Q_y) \hat{j} + (q_z - \chi' Q_z) \hat{k} \end{aligned} \quad (\text{A.6})$$

Therefore,

$$h_\chi = \chi (\hbar\nu_F \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{k}^\chi + \sigma_0 Q_0),$$

This h_χ is similar to the h_χ from the noncentrosymmetric Weyl semimetal, where $\mathbf{Q} = 0$.

Now, calculating the matrices of h_χ

$$\begin{aligned} h_\chi &= \chi [\hbar\nu_F \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{k}^\chi + \sigma_0 Q_0] \\ &= \chi \left\{ \hbar\nu_F (\sigma_x \hat{i} + \sigma_y \hat{j} + \sigma_z \hat{k}) \cdot (k_x^\chi \hat{i} + k_y^\chi \hat{j} + k_z^\chi \hat{k}) + \sigma_0 Q_0 \right\} \\ &= \chi \left\{ \hbar\nu_F \sigma_x k_x^\chi + \hbar\nu_F k_y^\chi \sigma_y + \hbar\nu_F \sigma_z k_z^\chi + \sigma_0 Q_0 \right\} \\ &= \chi \left[\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \hbar\nu_F k_x^\chi + \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \hbar\nu_F k_y^\chi + \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \hbar\nu_F k_z^\chi + \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} Q_0 \right] \\ &= \chi \left[\begin{pmatrix} 0 & \hbar\nu_F k_x^\chi \\ \hbar\nu_F k_x^\chi & 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & -i\hbar\nu_F k_y^\chi \\ i\hbar\nu_F k_y^\chi & 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \hbar\nu_F k_z^\chi & 0 \\ 0 & -\hbar\nu_F k_z^\chi \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} Q_0 & 0 \\ 0 & Q_0 \end{pmatrix} \right] \\ &= \chi \begin{pmatrix} \hbar\nu_F k_z^\chi + Q_0 & \hbar\nu_F (k_x^\chi - ik_y^\chi) \\ \hbar\nu_F (k_x^\chi + ik_y^\chi) & -\hbar\nu_F k_z^\chi + Q_0 \end{pmatrix} \\ &= \chi \begin{pmatrix} \hbar\nu_F k_z^\chi + Q_0 & \hbar\nu_F (k_x^\chi - ik_y^\chi) \\ \hbar\nu_F (k_x^\chi + ik_y^\chi) & -(\hbar\nu_F k_z^\chi - Q_0) \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (\text{A.7})$$

for sake of simplicity, we are going to assuming

$$\begin{cases} \mathbf{k}^\chi = \mathbf{k} - \chi \mathbf{Q} \\ k_{\pm}^\chi = \hbar\nu_F (k_x^\chi \pm ik_y^\chi) \\ k_{z\pm}^\chi = \hbar\nu_F k_z^\chi \pm Q_0 \end{cases} \quad \begin{cases} \mathbf{q}^\chi = \mathbf{q} - \chi' \mathbf{Q} \\ q_{\pm}^\chi = \hbar\nu_F (q_x^\chi \pm iq_y^\chi) \\ q_{z\pm}^\chi = \hbar\nu_F q_z^\chi \pm Q_0 \end{cases} \quad (\text{A.8})$$

Therefore,

$$h_\chi = \chi \begin{pmatrix} k_{z+}^\chi & k_-^\chi \\ k_+^\chi & -k_{z-}^\chi \end{pmatrix} \quad (\text{A.9})$$

Substituting the Eq.(A.9) in Eq. (A.1), our Hamiltonian can be expressed as

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_0 &= \sum_{\mathbf{k}^\chi} \psi_\chi^\dagger(\mathbf{k}^\chi) h_\chi(\mathbf{k}^\chi) \psi_\chi(\mathbf{k}^\chi) \\ &= \sum_{\mathbf{k}^\chi} \begin{pmatrix} c_{\mathbf{k}^\chi \uparrow}^\dagger & c_{\mathbf{k}^\chi \downarrow}^\dagger \end{pmatrix} \left[\chi \begin{pmatrix} k_{z+}^\chi & k_-^\chi \\ k_+^\chi & -k_{z-}^\chi \end{pmatrix} \right] \begin{pmatrix} c_{\mathbf{k}^\chi \uparrow} \\ c_{\mathbf{k}^\chi \downarrow} \end{pmatrix} \\ &= \sum_{\mathbf{k}^\chi} \chi \begin{pmatrix} c_{\mathbf{k}^\chi \uparrow}^\dagger & c_{\mathbf{k}^\chi \downarrow}^\dagger \end{pmatrix} \begin{pmatrix} k_{z+}^\chi c_{\mathbf{k}^\chi \uparrow} + k_-^\chi c_{\mathbf{k}^\chi \downarrow} \\ k_+^\chi c_{\mathbf{k}^\chi \uparrow} - k_{z-}^\chi c_{\mathbf{k}^\chi \downarrow} \end{pmatrix} \\ &= \sum_{\mathbf{k}^\chi} \chi c_{\mathbf{k}^\chi \uparrow}^\dagger [k_{z+}^\chi c_{\mathbf{k}^\chi \uparrow} + k_-^\chi c_{\mathbf{k}^\chi \downarrow}] \\ &\quad + \sum_{\mathbf{k}^\chi} \chi c_{\mathbf{k}^\chi \downarrow}^\dagger [k_+^\chi c_{\mathbf{k}^\chi \uparrow} - k_{z-}^\chi c_{\mathbf{k}^\chi \downarrow}] \\ &= \sum_{\mathbf{k}^\chi} \chi k_{z+}^\chi c_{\mathbf{k}^\chi \uparrow}^\dagger c_{\mathbf{k}^\chi \uparrow} + \sum_{\mathbf{k}^\chi} \chi k_-^\chi c_{\mathbf{k}^\chi \uparrow}^\dagger c_{\mathbf{k}^\chi \downarrow} \\ &\quad + \sum_{\mathbf{k}^\chi} \chi k_+^\chi c_{\mathbf{k}^\chi \downarrow}^\dagger c_{\mathbf{k}^\chi \uparrow} - \sum_{\mathbf{k}^\chi} \chi k_{z-}^\chi c_{\mathbf{k}^\chi \downarrow}^\dagger c_{\mathbf{k}^\chi \downarrow} \end{aligned} \quad (\text{A.10})$$

Thus,

$$\begin{aligned}\mathcal{H}_0 &= \sum_{\mathbf{k}\chi} \chi k_z^\chi c_{\mathbf{k}\chi\uparrow}^\dagger c_{\mathbf{k}\chi\uparrow} + \sum_{\mathbf{k}\chi} \chi k_z^\chi c_{\mathbf{k}\chi\uparrow}^\dagger c_{\mathbf{k}\chi\downarrow} \\ &+ \sum_{\mathbf{k}\chi} \chi k_+^\chi c_{\mathbf{k}\chi\downarrow}^\dagger c_{\mathbf{k}\chi\uparrow} - \sum_{\mathbf{k}\chi} \chi k_z^\chi c_{\mathbf{k}\chi\downarrow}^\dagger c_{\mathbf{k}\chi\downarrow}\end{aligned}\quad (\text{A.11})$$

Additionally, the Hamiltonians for the two-impurity Anderson model (TIAM) are described as $\mathcal{H}_{TIAM} = \mathcal{H}_{imp} + \mathcal{H}_{hyb} + \mathcal{H}_U$, in which each term of \mathcal{H}_{TIAM} is given by (Eq. 1 in ref. [A4])

$$\mathcal{H}_{imp} = \sum_{j\sigma} \varepsilon_{j\sigma} d_{j\sigma}^\dagger d_{j\sigma}, \quad (\text{A.12})$$

$$\mathcal{H}_{hyb} = \sum_{j\mathbf{k}\sigma\chi} (V_{j\mathbf{k}} d_{j\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\chi\sigma} + \text{H.c.}), \quad (\text{A.13})$$

$$\mathcal{H}_U = \sum_j U_j d_{j\uparrow}^\dagger d_{j\uparrow} d_{j\downarrow}^\dagger d_{j\downarrow}, \quad (\text{A.14})$$

which \mathcal{H}_{imp} is the unperturbed energy of the free-electron system in second-quantized notation [A6], \mathcal{H}_{hyb} is the Hamiltonian for the hybridization and \mathcal{H}_U is the Hamiltonian for the Coulomb potential. Besides, U_j is the localized-orbital Coulomb interaction, j is the term that sum the impurities ($j = j, \bar{j}$), $\varepsilon_{j\sigma}$ is the energy function (also called *dispersion relation* [A7]), χ is the position of the chirality, σ is the momentum spin ($\sigma = \uparrow, \downarrow$), and

$$V_{j\mathbf{k}} = \frac{\nu_0}{\sqrt{\mathcal{N}}} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_j} \longrightarrow V_{j\mathbf{k}\chi} = \frac{\nu_0}{\sqrt{\mathcal{N}}} e^{-i(\mathbf{k}\chi + \chi\mathbf{Q})\cdot\mathbf{R}_j} \quad (\text{A.15})$$

represents the the hybridization amplitude of the impurities with the host, where $\frac{\nu_0}{\sqrt{\mathcal{N}}} = V$ is called hybridization strength by [A8].

We are also put an Hamiltonian of tunneling \mathcal{H}_{tun} between the two impurities

$$\mathcal{H}_{tun} = - \sum_{j\sigma} t d_{j\sigma}^\dagger d_{\bar{j}\sigma} \quad (\text{A.16})$$

which t is the hopping amplitude[A9] (also called *hopping integral*[A10]) describing the mobility of the impurities in the lattice.

Therefore the Hamiltonian that describes the system for the Weyl noncentrosymmetric $\mathcal{H}_{W_{full}}$ is

$$\mathcal{H}_{W_{full}} = \mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_{tun} + \mathcal{H}_{imp} + \mathcal{H}_{hyb} + \mathcal{H}_U. \quad (\text{A.17})$$

Substituting each term of $\mathcal{H}_{W_{full}}$

$$\begin{aligned}\mathcal{H}_{W_{full}} &= \mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_{tun} + \mathcal{H}_{imp} + \mathcal{H}_{hyb} + \mathcal{H}_U \\ &= \sum_{\mathbf{k}\chi} \chi k_z^\chi c_{\mathbf{k}\chi\uparrow}^\dagger c_{\mathbf{k}\chi\uparrow} + \sum_{\mathbf{k}\chi} \chi k_z^\chi c_{\mathbf{k}\chi\uparrow}^\dagger c_{\mathbf{k}\chi\downarrow} + \sum_{\mathbf{k}\chi} \chi k_+^\chi c_{\mathbf{k}\chi\downarrow}^\dagger c_{\mathbf{k}\chi\uparrow} - \sum_{\mathbf{k}\chi} \chi k_z^\chi c_{\mathbf{k}\chi\downarrow}^\dagger c_{\mathbf{k}\chi\downarrow} \\ &+ (-1) \sum_{j\sigma} t d_{j\sigma}^\dagger d_{\bar{j}\sigma} + \sum_{j\sigma} \varepsilon_{j\sigma} d_{j\sigma}^\dagger d_{j\sigma} + \sum_{j\mathbf{k}\sigma\chi} (V_{j\mathbf{k}} d_{j\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\chi\sigma} + V_{j\mathbf{k}}^* c_{\mathbf{k}\chi\sigma}^\dagger d_{j\sigma}) + \sum_j U_j d_{j\uparrow}^\dagger d_{j\uparrow} d_{j\downarrow}^\dagger d_{j\downarrow}\end{aligned}\quad (\text{A.18})$$

We are interested in the calculation of the Local Density of States (LDOS) per spin $\rho_{LDOS}(\varepsilon)$, which is given by

$$\rho_{LDOS}(\varepsilon) = -\frac{1}{\pi} \sum_{\sigma} \text{Im} \left[\tilde{\mathcal{G}}_{\sigma}(\varepsilon^+) \right], \quad (\text{A.19})$$

which $\varepsilon^+ = \varepsilon + i\eta$. In eq. A.19, $\tilde{\mathcal{G}}_\sigma(\varepsilon^+)$ is a Green Function in energy space, in which in time space, that Green Function is given by

$$\mathcal{G}_\sigma(\tau) = \frac{1}{\mathcal{N}} \sum_{\mathbf{k}q\chi\chi'} e^{-i(\mathbf{k}-\mathbf{q})\cdot\mathbf{R}_m} \mathcal{G}_{c_{\mathbf{k}\chi\sigma}c_{\mathbf{q}'\chi'\sigma}}(\tau), \quad (\text{A.20})$$

using the properties in eq. A.5 and eq. A.6,

$$\begin{aligned} \mathcal{G}_\sigma(\tau) &= \frac{1}{\mathcal{N}} \sum_{\mathbf{k}q\chi\chi'} e^{-i(\mathbf{k}^\chi + \chi\mathbf{Q} - \mathbf{q}^\chi - \chi'\mathbf{Q})\cdot\mathbf{R}_m} \mathcal{G}_{c_{\mathbf{k}\chi\sigma}c_{\mathbf{q}'\chi'\sigma}}(\tau) \\ &= \frac{1}{\mathcal{N}} \sum_{\mathbf{k}q\chi\chi'} e^{-i(\mathbf{k}^\chi + \chi\mathbf{Q})\cdot\mathbf{R}_m} e^{i(\mathbf{q}^\chi + \chi'\mathbf{Q})\cdot\mathbf{R}_m} \mathcal{G}_{c_{\mathbf{k}\chi\sigma}c_{\mathbf{q}'\chi'\sigma}}(\tau). \end{aligned}$$

Therefore,

$$\tilde{\mathcal{G}}_\sigma(\varepsilon) = \frac{1}{\mathcal{N}} \sum_{\mathbf{k}q\chi\chi'} e^{-i(\mathbf{k}^\chi + \chi\mathbf{Q})\cdot\mathbf{R}_m} e^{i(\mathbf{q}^\chi + \chi'\mathbf{Q})\cdot\mathbf{R}_m} \tilde{\mathcal{G}}_{c_{\mathbf{k}\chi\sigma}c_{\mathbf{q}'\chi'\sigma}}(\varepsilon) \quad (\text{A.21})$$

in which \mathcal{N} is the normalization factor and \mathbf{R}_m is the STM position. Observe that the final $\rho_{LDOS}(\varepsilon)$ for this system, is the imaginary part of two GF, $\tilde{\mathcal{G}}_{c_{\mathbf{k}\chi\uparrow}c_{\mathbf{q}'\chi'\uparrow}}(\varepsilon)$ and $\tilde{\mathcal{G}}_{c_{\mathbf{k}\chi\downarrow}c_{\mathbf{q}'\chi'\downarrow}}(\varepsilon)$.

A.2 Local Density of State (LDOS)

From previous calculations in other projects, we already know that $\tilde{\mathcal{G}}_{c_{\mathbf{k}\chi\downarrow}c_{\mathbf{q}'\chi'\downarrow}}(\varepsilon)$ and $\tilde{\mathcal{G}}_{c_{\mathbf{k}\chi\uparrow}c_{\mathbf{q}'\chi'\uparrow}}(\varepsilon)$ are given by

$$\begin{aligned} \tilde{\mathcal{G}}_{c_{\mathbf{k}\chi\downarrow}c_{\mathbf{q}'\chi'\downarrow}}(\varepsilon) &= \frac{\varepsilon + i\eta + \chi k_{z-}^\chi}{\tilde{\varepsilon}_\chi^2 - (\hbar\nu_F k^\chi)^2} \delta_{\mathbf{k}q} \delta_{\chi\chi'} \\ &+ \frac{1}{\mathcal{N}} \sum_{jl} \left[\frac{(\varepsilon + i\eta + \chi k_{z-}^\chi) \nu_0}{\tilde{\varepsilon}_\chi^2 - (\hbar\nu_F k^\chi)^2} e^{i(\mathbf{k}^\chi + \chi\mathbf{Q})\cdot\mathbf{R}_j} \right] \cdot \left[\frac{(\varepsilon + i\eta + \chi' q_{z-}^\chi) \nu_0}{\tilde{\varepsilon}_{\chi'}^2 - (\hbar\nu_F q^\chi)^2} e^{-i(\mathbf{q}^\chi + \chi'\mathbf{Q})\cdot\mathbf{R}_l} \right] \tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\uparrow}d_{l\uparrow}}(\varepsilon) \\ &+ \frac{1}{\mathcal{N}} \sum_{jl} \left[\frac{(\varepsilon + i\eta + \chi k_{z-}^\chi) \nu_0 e^{i(\mathbf{k}^\chi + \chi\mathbf{Q})\cdot\mathbf{R}_j}}{\tilde{\varepsilon}_\chi^2 - (\hbar\nu_F k^\chi)^2} \right] \cdot \left[\frac{\chi' q_{z+}^\chi \nu_0}{\tilde{\varepsilon}_{\chi'}^2 - (\hbar\nu_F q^\chi)^2} e^{-i(\mathbf{q}^\chi + \chi'\mathbf{Q})\cdot\mathbf{R}_l} \right] \tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\uparrow}d_{l\downarrow}}(\varepsilon) \\ &+ \frac{1}{\mathcal{N}} \sum_{jl} \left[\frac{\chi k_{z+}^\chi \nu_0}{\tilde{\varepsilon}_\chi^2 - (\hbar\nu_F k^\chi)^2} e^{i(\mathbf{k}^\chi + \chi\mathbf{Q})\cdot\mathbf{R}_j} \right] \cdot \left[\frac{(\varepsilon + i\eta + \chi' q_{z-}^\chi) \nu_0}{\tilde{\varepsilon}_{\chi'}^2 - (\hbar\nu_F q^\chi)^2} e^{-i(\mathbf{q}^\chi + \chi'\mathbf{Q})\cdot\mathbf{R}_l} \right] \tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\downarrow}d_{l\uparrow}}(\varepsilon) \\ &+ \frac{1}{\mathcal{N}} \sum_{jl} \left[\frac{\chi k_{z+}^\chi \nu_0}{\tilde{\varepsilon}_\chi^2 - (\hbar\nu_F k^\chi)^2} e^{i(\mathbf{k}^\chi + \chi\mathbf{Q})\cdot\mathbf{R}_j} \right] \cdot \left[\frac{\chi' q_{z+}^\chi \nu_0}{\tilde{\varepsilon}_{\chi'}^2 - (\hbar\nu_F q^\chi)^2} e^{-i(\mathbf{q}^\chi + \chi'\mathbf{Q})\cdot\mathbf{R}_l} \right] \tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\downarrow}d_{l\downarrow}}(\varepsilon) \quad (\text{A.22}) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \tilde{\mathcal{G}}_{c_{\mathbf{k}\chi\uparrow}c_{\mathbf{q}'\chi'\uparrow}}(\varepsilon) &= \frac{(\varepsilon + i\eta - \chi k_{z+}^\chi)}{\tilde{\varepsilon}_\chi^2 - (\hbar\nu_F k^\chi)^2} \delta_{\mathbf{k}q} \delta_{\chi\chi'} \\ &+ \frac{1}{\mathcal{N}} \sum_{jl} \left[\frac{(\varepsilon + i\eta - \chi k_{z+}^\chi) \nu_0}{\tilde{\varepsilon}_\chi^2 - (\hbar\nu_F k^\chi)^2} e^{i(\mathbf{k}^\chi + \chi\mathbf{Q})\cdot\mathbf{R}_j} \right] \cdot \left[\frac{(\varepsilon + i\eta - \chi' q_{z+}^\chi) \nu_0 e^{-i(\mathbf{q}^\chi + \chi'\mathbf{Q})\cdot\mathbf{R}_l}}{\tilde{\varepsilon}_{\chi'}^2 - (\hbar\nu_F q^\chi)^2} \right] \tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\downarrow}d_{l\downarrow}}(\varepsilon) \\ &+ \frac{1}{\mathcal{N}} \sum_{jl} \left[\frac{(\varepsilon + i\eta - \chi k_{z+}^\chi) \nu_0}{\tilde{\varepsilon}_\chi^2 - (\hbar\nu_F k^\chi)^2} e^{i(\mathbf{k}^\chi + \chi\mathbf{Q})\cdot\mathbf{R}_j} \right] \cdot \left[\frac{\chi' q_{z-}^\chi \nu_0}{\tilde{\varepsilon}_{\chi'}^2 - (\hbar\nu_F q^\chi)^2} e^{-i(\mathbf{q}^\chi + \chi'\mathbf{Q})\cdot\mathbf{R}_l} \right] \tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\downarrow}d_{l\uparrow}}(\varepsilon) \\ &+ \frac{1}{\mathcal{N}} \sum_{jl} \left[\frac{\chi k_{z+}^\chi \nu_0}{\tilde{\varepsilon}_\chi^2 - (\hbar\nu_F k^\chi)^2} e^{i(\mathbf{k}^\chi + \chi\mathbf{Q})\cdot\mathbf{R}_j} \right] \cdot \left[\frac{(\varepsilon + i\eta - \chi' q_{z+}^\chi) \nu_0}{\tilde{\varepsilon}_{\chi'}^2 - (\hbar\nu_F q^\chi)^2} e^{-i(\mathbf{q}^\chi + \chi'\mathbf{Q})\cdot\mathbf{R}_l} \right] \tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\uparrow}d_{l\downarrow}}(\varepsilon) \\ &+ \frac{1}{\mathcal{N}} \sum_{jl} \left[\frac{\chi k_{z+}^\chi \nu_0}{\tilde{\varepsilon}_\chi^2 - (\hbar\nu_F k^\chi)^2} e^{i(\mathbf{k}^\chi + \chi\mathbf{Q})\cdot\mathbf{R}_j} \right] \cdot \left[\frac{\chi' q_{z-}^\chi \nu_0}{\tilde{\varepsilon}_{\chi'}^2 - (\hbar\nu_F q^\chi)^2} e^{-i(\mathbf{q}^\chi + \chi'\mathbf{Q})\cdot\mathbf{R}_l} \right] \tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\uparrow}d_{l\uparrow}}(\varepsilon) \quad (\text{A.23}) \end{aligned}$$

in which \mathbf{R}_j and \mathbf{R}_l are the distances of the impurities. Thus, substituting in eq. A.21 for the respective spin,

$$\begin{aligned}
 \tilde{G}_{\downarrow}(\varepsilon) &= \frac{1}{\mathcal{N}} \sum_{\mathbf{k}q\chi\chi'} e^{-i(\mathbf{k}^x + \chi\mathbf{Q}) \cdot \mathbf{R}_m} e^{i(\mathbf{q}^x + \chi'\mathbf{Q}) \cdot \mathbf{R}_m} \tilde{G}_{c_{\mathbf{k}\chi\downarrow} c_{\mathbf{q}\chi'\downarrow}}(\varepsilon) \\
 &= \frac{1}{\mathcal{N}} \sum_{\mathbf{k}q\chi\chi'} e^{-i(\mathbf{k}^x + \chi\mathbf{Q}) \cdot \mathbf{R}_m} e^{i(\mathbf{q}^x + \chi'\mathbf{Q}) \cdot \mathbf{R}_m} \left\{ \frac{(\varepsilon + i\eta - \chi k_{z+}^x)}{\tilde{\varepsilon}_{\chi}^2 - (\hbar\nu_F k^x)^2} \delta_{\mathbf{k}q} \delta_{\chi\chi'} \right. \\
 &+ \frac{1}{\mathcal{N}} \sum_{jl} \left[\frac{(\varepsilon + i\eta - \chi k_{z+}^x) \nu_0 e^{i(\mathbf{k}^x + \chi\mathbf{Q}) \cdot \mathbf{R}_j}}{\tilde{\varepsilon}_{\chi}^2 - (\hbar\nu_F k^x)^2} \right] \cdot \left[\frac{(\varepsilon + i\eta - \chi' q_{z+}^x) \nu_0 e^{-i(\mathbf{q}^x + \chi'\mathbf{Q}) \cdot \mathbf{R}_l}}{\tilde{\varepsilon}_{\chi'}^2 - (\hbar\nu_F q^x)^2} \right] \tilde{G}_{d_{j\downarrow} d_{l\downarrow}}(\varepsilon) \\
 &+ \frac{1}{\mathcal{N}} \sum_{jl} \left[\frac{(\varepsilon + i\eta - \chi k_{z+}^x) \nu_0 e^{i(\mathbf{k}^x + \chi\mathbf{Q}) \cdot \mathbf{R}_j}}{\tilde{\varepsilon}_{\chi}^2 - (\hbar\nu_F k^x)^2} \right] \cdot \left[\frac{\chi' q_{z+}^x \nu_0 e^{-i(\mathbf{q}^x + \chi'\mathbf{Q}) \cdot \mathbf{R}_l}}{\tilde{\varepsilon}_{\chi'}^2 - (\hbar\nu_F q^x)^2} \right] \tilde{G}_{d_{j\downarrow} d_{l\uparrow}}(\varepsilon) \\
 &+ \frac{1}{\mathcal{N}} \sum_{jl} \left[\frac{\chi k_{z+}^x \nu_0 e^{i(\mathbf{k}^x + \chi\mathbf{Q}) \cdot \mathbf{R}_j}}{\tilde{\varepsilon}_{\chi}^2 - (\hbar\nu_F k^x)^2} \right] \cdot \left[\frac{(\varepsilon + i\eta - \chi' q_{z+}^x) \nu_0 e^{-i(\mathbf{q}^x + \chi'\mathbf{Q}) \cdot \mathbf{R}_l}}{\tilde{\varepsilon}_{\chi'}^2 - (\hbar\nu_F q^x)^2} \right] \tilde{G}_{d_{j\uparrow} d_{l\downarrow}}(\varepsilon) \\
 &+ \left. \frac{1}{\mathcal{N}} \sum_{jl} \left[\frac{\chi k_{z+}^x \nu_0 e^{i(\mathbf{k}^x + \chi\mathbf{Q}) \cdot \mathbf{R}_j}}{\tilde{\varepsilon}_{\chi}^2 - (\hbar\nu_F k^x)^2} \right] \cdot \left[\frac{\chi' q_{z+}^x \nu_0 e^{-i(\mathbf{q}^x + \chi'\mathbf{Q}) \cdot \mathbf{R}_l}}{\tilde{\varepsilon}_{\chi'}^2 - (\hbar\nu_F q^x)^2} \right] \tilde{G}_{d_{j\uparrow} d_{l\uparrow}}(\varepsilon) \right\} \\
 &= \frac{1}{\mathcal{N}} \sum_{\mathbf{k}q\chi\chi'} \frac{(\varepsilon + i\eta - \chi k_{z+}^x)}{\tilde{\varepsilon}_{\chi}^2 - (\hbar\nu_F k^x)^2} e^{-i(\mathbf{k}^x + \chi\mathbf{Q}) \cdot \mathbf{R}_m} e^{i(\mathbf{q}^x + \chi'\mathbf{Q}) \cdot \mathbf{R}_m} \delta_{\mathbf{k}q} \delta_{\chi\chi'} \\
 &+ \frac{1}{\mathcal{N}^2} \sum_{\mathbf{k}q\chi\chi'jl} \left[\frac{(\varepsilon + i\eta - \chi k_{z+}^x) \nu_0}{\tilde{\varepsilon}_{\chi}^2 - (\hbar\nu_F k^x)^2} e^{i(\mathbf{k}^x + \chi\mathbf{Q}) \cdot \mathbf{R}_j} e^{-i(\mathbf{k}^x + \chi\mathbf{Q}) \cdot \mathbf{R}_m} \right] \times \\
 &\times \left[\frac{(\varepsilon + i\eta - \chi' q_{z+}^x) \nu_0}{\tilde{\varepsilon}_{\chi'}^2 - (\hbar\nu_F q^x)^2} e^{-i(\mathbf{q}^x + \chi'\mathbf{Q}) \cdot \mathbf{R}_l} e^{i(\mathbf{q}^x + \chi'\mathbf{Q}) \cdot \mathbf{R}_m} \right] \tilde{G}_{d_{j\downarrow} d_{l\downarrow}}(\varepsilon) \\
 &+ \frac{1}{\mathcal{N}^2} \sum_{\mathbf{k}q\chi\chi'jl} \left[\frac{(\varepsilon + i\eta - \chi k_{z+}^x) \nu_0}{\tilde{\varepsilon}_{\chi}^2 - (\hbar\nu_F k^x)^2} e^{i(\mathbf{k}^x + \chi\mathbf{Q}) \cdot \mathbf{R}_j} e^{-i(\mathbf{k}^x + \chi\mathbf{Q}) \cdot \mathbf{R}_m} \right] \times \\
 &\times \left[\frac{\chi' q_{z+}^x \nu_0}{\tilde{\varepsilon}_{\chi'}^2 - (\hbar\nu_F q^x)^2} e^{-i(\mathbf{q}^x + \chi'\mathbf{Q}) \cdot \mathbf{R}_l} e^{i(\mathbf{q}^x + \chi'\mathbf{Q}) \cdot \mathbf{R}_m} \right] \tilde{G}_{d_{j\downarrow} d_{l\uparrow}}(\varepsilon) \\
 &+ \frac{1}{\mathcal{N}^2} \sum_{\mathbf{k}q\chi\chi'jl} \left[\frac{\chi k_{z+}^x \nu_0}{\tilde{\varepsilon}_{\chi}^2 - (\hbar\nu_F k^x)^2} e^{i(\mathbf{k}^x + \chi\mathbf{Q}) \cdot \mathbf{R}_j} e^{-i(\mathbf{k}^x + \chi\mathbf{Q}) \cdot \mathbf{R}_m} \right] \times \\
 &\times \left[\frac{(\varepsilon + i\eta - \chi' q_{z+}^x) \nu_0}{\tilde{\varepsilon}_{\chi'}^2 - (\hbar\nu_F q^x)^2} e^{-i(\mathbf{q}^x + \chi'\mathbf{Q}) \cdot \mathbf{R}_l} e^{i(\mathbf{q}^x + \chi'\mathbf{Q}) \cdot \mathbf{R}_m} \right] \tilde{G}_{d_{j\uparrow} d_{l\downarrow}}(\varepsilon) \\
 &+ \frac{1}{\mathcal{N}^2} \sum_{\mathbf{k}q\chi\chi'jl} \left[\frac{\chi k_{z+}^x \nu_0}{\tilde{\varepsilon}_{\chi}^2 - (\hbar\nu_F k^x)^2} e^{i(\mathbf{k}^x + \chi\mathbf{Q}) \cdot \mathbf{R}_j} e^{-i(\mathbf{k}^x + \chi\mathbf{Q}) \cdot \mathbf{R}_m} \right] \times \\
 &\times \left[\frac{\chi' q_{z+}^x \nu_0}{\tilde{\varepsilon}_{\chi'}^2 - (\hbar\nu_F q^x)^2} e^{-i(\mathbf{q}^x + \chi'\mathbf{Q}) \cdot \mathbf{R}_l} e^{i(\mathbf{q}^x + \chi'\mathbf{Q}) \cdot \mathbf{R}_m} \right] \tilde{G}_{d_{j\uparrow} d_{l\uparrow}}(\varepsilon)
 \end{aligned}$$

\mathbf{R}_{lm}

$$\Sigma_+(\mathbf{R}_{mj}) = \frac{\nu_0^2}{\mathcal{N}} \sum_{\mathbf{k}} \frac{\chi k_+^X}{\tilde{\varepsilon}_\chi^2 - (\hbar\nu_F k^\chi)^2} e^{-i(\mathbf{k}^X + \chi\mathbf{Q}) \cdot \mathbf{R}_{mj}} \quad \Sigma'_+(\mathbf{R}_{lm}) = \frac{\nu_0^2}{\mathcal{N}} \sum_{\mathbf{k}'} \frac{\chi' q_+^X}{\tilde{\varepsilon}_{\chi'}^2 - (\hbar\nu_F q^\chi)^2} e^{-i(\mathbf{q}^X + \chi'\mathbf{Q}) \cdot \mathbf{R}_{lm}} \quad (\text{A.28})$$

$$\Sigma_-(\mathbf{R}_{mj}) = \frac{\nu_0^2}{\mathcal{N}} \sum_{\mathbf{k}} \frac{\chi k_-^X}{\tilde{\varepsilon}_\chi^2 - (\hbar\nu_F k^\chi)^2} e^{-i(\mathbf{k}^X + \chi\mathbf{Q}) \cdot \mathbf{R}_{mj}} \quad \Sigma'_-(\mathbf{R}_{lm}) = \frac{\nu_0^2}{\mathcal{N}} \sum_{\mathbf{k}'} \frac{\chi' q_-^X}{\tilde{\varepsilon}_{\chi'}^2 - (\hbar\nu_F q^\chi)^2} e^{-i(\mathbf{q}^X + \chi'\mathbf{Q}) \cdot \mathbf{R}_{lm}} \quad (\text{A.29})$$

$$\Sigma_{z+}(\mathbf{R}_{mj}) = \frac{\nu_0^2}{\mathcal{N}} \sum_{\mathbf{k}} \frac{\varepsilon + i\eta - \chi k_{z+}^X}{\tilde{\varepsilon}_\chi^2 - (\hbar\nu_F k^\chi)^2} e^{-i(\mathbf{k}^X + \chi\mathbf{Q}) \cdot \mathbf{R}_{mj}} \quad \Sigma'_{z+}(\mathbf{R}_{lm}) = \frac{\nu_0^2}{\mathcal{N}} \sum_{\mathbf{k}'} \frac{\varepsilon + i\eta - \chi' q_{z+}^X}{\tilde{\varepsilon}_{\chi'}^2 - (\hbar\nu_F q^\chi)^2} e^{-i(\mathbf{q}^X + \chi'\mathbf{Q}) \cdot \mathbf{R}_{lm}} \quad (\text{A.30})$$

$$\Sigma_{z-}(\mathbf{R}_{mj}) = \frac{\nu_0^2}{\mathcal{N}} \sum_{\mathbf{k}} \frac{\varepsilon + i\eta + \chi k_{z-}^X}{\tilde{\varepsilon}_\chi^2 - (\hbar\nu_F k^\chi)^2} e^{-i(\mathbf{k}^X + \chi\mathbf{Q}) \cdot \mathbf{R}_{mj}} \quad \Sigma'_{z-}(\mathbf{R}_{lm}) = \frac{\nu_0^2}{\mathcal{N}} \sum_{\mathbf{k}'} \frac{\varepsilon + i\eta + \chi' q_{z-}^X}{\tilde{\varepsilon}_{\chi'}^2 - (\hbar\nu_F q^\chi)^2} e^{-i(\mathbf{q}^X + \chi'\mathbf{Q}) \cdot \mathbf{R}_{lm}} \quad (\text{A.31})$$

Therefore,...

$$\begin{aligned} \tilde{\mathcal{G}}_\uparrow(\varepsilon) &= \frac{1}{\mathcal{N}} \sum_{\mathbf{k}\chi} \frac{\varepsilon + i\eta + \chi k_{z-}^X}{\tilde{\varepsilon}_\chi^2 - (\hbar\nu_F k^\chi)^2} \\ &+ \frac{1}{\nu_0^2} \sum_{\chi\chi'jl} \Sigma_{z-}(\mathbf{R}_{mj}) \cdot \Sigma'_{z-}(\mathbf{R}_{lm}) \cdot \tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\uparrow}d_{l\uparrow}}(\varepsilon) \\ &+ \frac{1}{\nu_0^2} \sum_{\chi\chi'jl} \Sigma_{z-}(\mathbf{R}_{mj}) \cdot \Sigma'_+(\mathbf{R}_{lm}) \cdot \tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\uparrow}d_{l\downarrow}}(\varepsilon) \\ &+ \frac{1}{\nu_0^2} \sum_{\chi\chi'jl} \Sigma_-(\mathbf{R}_{mj}) \cdot \Sigma'_{z-}(\mathbf{R}_{lm}) \cdot \tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\downarrow}d_{l\uparrow}}(\varepsilon) \\ &+ \frac{1}{\nu_0^2} \sum_{\chi\chi'jl} \Sigma_-(\mathbf{R}_{mj}) \cdot \Sigma'_+(\mathbf{R}_{lm}) \cdot \tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\downarrow}d_{l\downarrow}}(\varepsilon) \end{aligned} \quad (\text{A.32})$$

$$\begin{aligned} \tilde{\mathcal{G}}_\downarrow(\varepsilon) &= \frac{1}{\mathcal{N}} \sum_{\mathbf{k}\chi} \frac{\varepsilon + i\eta - \chi k_{z+}^X}{\tilde{\varepsilon}_\chi^2 - (\hbar\nu_F k^\chi)^2} \\ &+ \frac{1}{\nu_0^2} \sum_{\chi\chi'jl} \Sigma_{z+}(\mathbf{R}_{mj}) \cdot \Sigma'_{z+}(\mathbf{R}_{lm}) \cdot \tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\downarrow}d_{l\downarrow}}(\varepsilon) \\ &+ \frac{1}{\nu_0^2} \sum_{\chi\chi'jl} \Sigma_{z+}(\mathbf{R}_{mj}) \cdot \Sigma'_-(\mathbf{R}_{lm}) \cdot \tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\downarrow}d_{l\uparrow}}(\varepsilon) \\ &+ \frac{1}{\nu_0^2} \sum_{\chi\chi'jl} \Sigma_+(\mathbf{R}_{mj}) \cdot \Sigma'_{z+}(\mathbf{R}_{lm}) \cdot \tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\uparrow}d_{l\downarrow}}(\varepsilon) \\ &+ \frac{1}{\nu_0^2} \sum_{\chi\chi'jl} \Sigma_+(\mathbf{R}_{mj}) \cdot \Sigma'_-(\mathbf{R}_{lm}) \cdot \tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\uparrow}d_{l\uparrow}}(\varepsilon) \end{aligned} \quad (\text{A.33})$$

Let us recalling equation Eq. (A.19)

$$\begin{aligned}
 \rho_{LDOS}(\varepsilon) &= -\frac{1}{\pi} \sum_{\sigma} \text{Im} \left[\tilde{\mathcal{G}}_{\sigma}(\varepsilon) \right] \\
 &= -\frac{1}{\pi} \text{Im} \left[\tilde{\mathcal{G}}_{\uparrow}(\varepsilon) + \tilde{\mathcal{G}}_{\downarrow}(\varepsilon) \right] \\
 \rho_{LDOS}^{\chi}(\varepsilon) &= -\frac{1}{\pi} \text{Im} \left[\frac{1}{\mathcal{N}} \sum_{\mathbf{k}_{\chi}} \frac{\varepsilon + i\eta + \chi k_{z-}^{\chi}}{\tilde{\varepsilon}_{\chi}^2 - (\hbar\nu_F k^{\chi})^2} \right. \\
 &\quad + \frac{1}{\nu_0^2} \sum_{\chi\chi'jl} \Sigma_{z-}(\mathbf{R}_{mj}) \cdot \Sigma'_{z-}(\mathbf{R}_{lm}) \cdot \tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\uparrow}d_{l\uparrow}}(\varepsilon) \\
 &\quad + \frac{1}{\nu_0^2} \sum_{\chi\chi'jl} \Sigma_{z-}(\mathbf{R}_{mj}) \cdot \Sigma'_{+}(\mathbf{R}_{lm}) \cdot \tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\uparrow}d_{l\downarrow}}(\varepsilon) \\
 &\quad + \frac{1}{\nu_0^2} \sum_{\chi\chi'jl} \Sigma_{-}(\mathbf{R}_{mj}) \cdot \Sigma'_{z-}(\mathbf{R}_{lm}) \cdot \tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\downarrow}d_{l\uparrow}}(\varepsilon) \\
 &\quad + \frac{1}{\nu_0^2} \sum_{\chi\chi'jl} \Sigma_{-}(\mathbf{R}_{mj}) \cdot \Sigma'_{+}(\mathbf{R}_{lm}) \cdot \tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\downarrow}d_{l\downarrow}}(\varepsilon) \\
 &\quad + \frac{1}{\mathcal{N}} \sum_{\mathbf{k}_{\chi}} \frac{\varepsilon + i\eta - \chi k_{z+}^{\chi}}{\tilde{\varepsilon}_{\chi}^2 - (\hbar\nu_F k^{\chi})^2} \\
 &\quad + \frac{1}{\nu_0^2} \sum_{\chi\chi'jl} \Sigma_{z+}(\mathbf{R}_{mj}) \cdot \Sigma'_{z+}(\mathbf{R}_{lm}) \cdot \tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\downarrow}d_{l\downarrow}}(\varepsilon) \\
 &\quad + \frac{1}{\nu_0^2} \sum_{\chi\chi'jl} \Sigma_{z+}(\mathbf{R}_{mj}) \cdot \Sigma'_{-}(\mathbf{R}_{lm}) \cdot \tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\downarrow}d_{l\uparrow}}(\varepsilon) \\
 &\quad + \frac{1}{\nu_0^2} \sum_{\chi\chi'jl} \Sigma_{+}(\mathbf{R}_{mj}) \cdot \Sigma'_{z+}(\mathbf{R}_{lm}) \cdot \tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\uparrow}d_{l\downarrow}}(\varepsilon) \\
 &\quad \left. + \frac{1}{\nu_0^2} \sum_{\chi\chi'jl} \Sigma_{+}(\mathbf{R}_{mj}) \cdot \Sigma'_{-}(\mathbf{R}_{lm}) \cdot \tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\uparrow}d_{l\uparrow}}(\varepsilon) \right] \\
 &= -\frac{1}{\pi} \text{Im} \left[\frac{1}{\mathcal{N}} \sum_{\mathbf{k}_{\chi}} \frac{(\varepsilon + i\eta + \chi k_{z-}^{\chi}) + (\varepsilon + i\eta - \chi k_{z+}^{\chi})}{\tilde{\varepsilon}_{\chi}^2 - (\hbar\nu_F k^{\chi})^2} \right] \\
 &\quad + -\frac{1}{\pi} \sum_{\chi\chi'jl} \text{Im} \left\{ \frac{1}{\nu_0^2} [\Sigma_{z-}(\mathbf{R}_{mj}) \cdot \Sigma'_{z-}(\mathbf{R}_{lm}) + \Sigma_{+}(\mathbf{R}_{mj}) \cdot \Sigma'_{-}(\mathbf{R}_{lm})] \tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\uparrow}d_{l\uparrow}}(\varepsilon) \right\} \\
 &\quad + -\frac{1}{\pi} \sum_{\chi\chi'jl} \text{Im} \left\{ \frac{1}{\nu_0^2} [\Sigma_{z-}(\mathbf{R}_{mj}) \cdot \Sigma'_{+}(\mathbf{R}_{lm}) + \Sigma_{+}(\mathbf{R}_{mj}) \cdot \Sigma'_{z+}(\mathbf{R}_{lm})] \tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\uparrow}d_{l\downarrow}}(\varepsilon) \right\} \\
 &\quad + -\frac{1}{\pi} \sum_{\chi\chi'jl} \text{Im} \left\{ \frac{1}{\nu_0^2} [\Sigma_{-}(\mathbf{R}_{mj}) \cdot \Sigma'_{z-}(\mathbf{R}_{lm}) + \Sigma_{z+}(\mathbf{R}_{mj}) \cdot \Sigma'_{-}(\mathbf{R}_{lm})] \tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\downarrow}d_{l\uparrow}}(\varepsilon) \right\} \\
 &\quad + -\frac{1}{\pi} \sum_{\chi\chi'jl} \text{Im} \left\{ \frac{1}{\nu_0^2} [\Sigma_{-}(\mathbf{R}_{mj}) \cdot \Sigma'_{+}(\mathbf{R}_{lm}) + \Sigma_{z+}(\mathbf{R}_{mj}) \cdot \Sigma'_{z+}(\mathbf{R}_{lm})] \tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\downarrow}d_{l\downarrow}}(\varepsilon) \right\} \tag{A.34}
 \end{aligned}$$

Therefore,

$$\begin{aligned}
 \rho_{LDOS}^{\chi}(\varepsilon) &= -\frac{2}{\pi} \text{Im} \left[\frac{1}{\mathcal{N}} \sum_{\mathbf{k}\chi} \frac{(\varepsilon + i\eta - \chi Q_0)}{\tilde{\varepsilon}_{\chi}^2 - (\hbar\nu_F k\chi)^2} \right] \\
 &+ -\frac{1}{\pi\nu_0^2} \sum_{\chi\chi'jl} \text{Im} \left\{ [\Sigma_{z-} \cdot \Sigma'_{z-} + \Sigma_{z+} \cdot \Sigma'_{z-}] \tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\uparrow}d_{l\uparrow}}(\varepsilon) \right\} \\
 &+ -\frac{1}{\pi\nu_0^2} \sum_{\chi\chi'jl} \text{Im} \left\{ [\Sigma_{z-} \cdot \Sigma'_{z+} + \Sigma_{z+} \cdot \Sigma'_{z+}] \tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\uparrow}d_{l\downarrow}}(\varepsilon) \right\} \\
 &+ -\frac{1}{\pi\nu_0^2} \sum_{\chi\chi'jl} \text{Im} \left\{ [\Sigma_{z-} \cdot \Sigma'_{z-} + \Sigma_{z+} \cdot \Sigma'_{z-}] \tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\downarrow}d_{l\uparrow}}(\varepsilon) \right\} \\
 &+ -\frac{1}{\pi\nu_0^2} \sum_{\chi\chi'jl} \text{Im} \left\{ [\Sigma_{z-} \cdot \Sigma'_{z+} + \Sigma_{z+} \cdot \Sigma'_{z+}] \tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\downarrow}d_{l\downarrow}}(\varepsilon) \right\}
 \end{aligned} \tag{A.35}$$

where we can see the $\rho_0^{\chi}(\varepsilon)$, defined by

$$\rho_0^{\chi}(\varepsilon) = -\frac{2}{\pi} \text{Im} \left[\frac{1}{\mathcal{N}} \sum_{\mathbf{k}\chi} \frac{\varepsilon + i\eta - \chi Q_0}{\tilde{\varepsilon}_{\chi}^2 - (\hbar\nu_F k\chi)^2} \right] \tag{A.36}$$

Thus, the LDOS of the system is defined by

$$\begin{aligned}
 \rho_{LDOS}^{\chi}(\varepsilon) &= \rho_0^{\chi} \\
 &+ -\frac{1}{\pi\nu_0^2} \sum_{\chi\chi'jl} \text{Im} \left\{ [\Sigma_{z-} \cdot \Sigma'_{z-} + \Sigma_{z+} \cdot \Sigma'_{z-}] \tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\uparrow}d_{l\uparrow}}(\varepsilon) \right\} \\
 &+ -\frac{1}{\pi\nu_0^2} \sum_{\chi\chi'jl} \text{Im} \left\{ [\Sigma_{z-} \cdot \Sigma'_{z+} + \Sigma_{z+} \cdot \Sigma'_{z+}] \tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\uparrow}d_{l\downarrow}}(\varepsilon) \right\} \\
 &+ -\frac{1}{\pi\nu_0^2} \sum_{\chi\chi'jl} \text{Im} \left\{ [\Sigma_{z-} \cdot \Sigma'_{z-} + \Sigma_{z+} \cdot \Sigma'_{z-}] \tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\downarrow}d_{l\uparrow}}(\varepsilon) \right\} \\
 &+ -\frac{1}{\pi\nu_0^2} \sum_{\chi\chi'jl} \text{Im} \left\{ [\Sigma_{z-} \cdot \Sigma'_{z+} + \Sigma_{z+} \cdot \Sigma'_{z+}] \tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\downarrow}d_{l\downarrow}}(\varepsilon) \right\}
 \end{aligned} \tag{A.37}$$

A.2.1 DOS $\rho_0(\varepsilon)$ evaluation

This special case represents only the bulk of the Weyl-Dirac semimetal, in other words, there is no impurity inside the solid. Recalling Eq. (A.36), we have

$$\rho_0^{\chi}(\varepsilon) = -\frac{2}{\pi} \text{Im} \left[\frac{1}{\mathcal{N}} \sum_{\mathbf{k}\chi} \frac{\varepsilon + i\eta - \chi Q_0}{\tilde{\varepsilon}_{\chi}^2 - (\hbar\nu_F k\chi)^2} \right]$$

By $\varepsilon_{\chi} = \varepsilon - \chi Q_0$

$$\rho_0^{\chi}(\varepsilon) = -\frac{2}{\pi} \text{Im} \left[\frac{1}{\mathcal{N}} \sum_{\mathbf{k}\chi} \frac{\varepsilon_{\chi} + i\eta}{(\varepsilon_{\chi} + i\eta)^2 - (\hbar\nu_F k\chi)^2} \right]$$

This is an expression similar to the DOS in [A3] (equation 12). Thus, the result is going to be similar to the \mathcal{D}_0 given by [A3]. For this reason,

$$\rho_0^{\chi}(\varepsilon) = \sum_{\chi} \frac{3}{D^3} \varepsilon_{\chi}^2 \tag{A.38}$$

Performing summation over χ

$$\begin{aligned}
 \rho_0^\chi(\varepsilon) &= \sum_{\chi} \frac{3}{D^3} \varepsilon_\chi^2 \\
 &= \frac{3}{D^3} \sum_{\chi} (\varepsilon - \chi Q_0)^2 \\
 &= \frac{3}{D^3} [(\varepsilon - Q_0)^2 + (\varepsilon + Q_0)^2] \\
 &= \frac{3}{D^3} [(\varepsilon^2 - 2\varepsilon Q_0 + Q_0^2) + (\varepsilon^2 + 2\varepsilon Q_0 + Q_0^2)] \\
 &= \frac{3}{D^3} (2\varepsilon^2 + 2Q_0^2)
 \end{aligned} \tag{A.39}$$

Therefore,

$$\rho_0(\varepsilon) = \frac{6}{D^3} (\varepsilon^2 + Q_0^2) \tag{A.40}$$

A.3 Conclusions for $U_j = 0$

According to what we calculate in the previous section, $\Sigma_{\pm}(\mathbf{R}_{mj}) = \Sigma'_{\pm}(\mathbf{R}_{lm}) = 0$. Thus, the LDOS is given by

$$\begin{aligned}
 \rho_{LDOS}^\chi(\varepsilon) &= 2\rho_0^\sigma \\
 &+ -\frac{1}{\pi\nu_0^2} \sum_{\chi\chi'jl} \text{Im} \left\{ [\Sigma_{z-} \cdot \Sigma'_{z-} + \cancel{\Sigma_{z+}} \cdot \cancel{\Sigma'_{z-}}] \tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\uparrow}d_{l\uparrow}}(\varepsilon) \right\} \\
 &+ -\frac{1}{\pi\nu_0^2} \sum_{\chi\chi'jl} \text{Im} \left\{ [\Sigma_{z-} \cdot \cancel{\Sigma'_{z+}} + \cancel{\Sigma_{z+}} \cdot \Sigma'_{z+}] \tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\uparrow}d_{l\downarrow}}(\varepsilon) \right\} \\
 &+ -\frac{1}{\pi\nu_0^2} \sum_{\chi\chi'jl} \text{Im} \left\{ [\cancel{\Sigma_{z-}} \cdot \Sigma'_{z-} + \Sigma_{z+} \cdot \cancel{\Sigma'_{z-}}] \tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\downarrow}d_{l\uparrow}}(\varepsilon) \right\} \\
 &+ -\frac{1}{\pi\nu_0^2} \sum_{\chi\chi'jl} \text{Im} \left\{ [\cancel{\Sigma_{z-}} \cdot \cancel{\Sigma'_{z+}} + \Sigma_{z+} \cdot \Sigma'_{z+}] \tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\downarrow}d_{l\downarrow}}(\varepsilon) \right\} \\
 &= 2\rho_0^\sigma \\
 &+ -\frac{1}{\pi\nu_0^2} \sum_{\chi\chi'jl} \text{Im} \left\{ [\Sigma_{z-} \cdot \Sigma'_{z-} + 0 \cdot 0] \tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\uparrow}d_{l\uparrow}}(\varepsilon) \right\} \\
 &+ -\frac{1}{\pi\nu_0^2} \sum_{\chi\chi'jl} \text{Im} \left\{ [\Sigma_{z-} \cdot 0 + 0 \cdot \Sigma'_{z+}] \tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\uparrow}d_{l\downarrow}}(\varepsilon) \right\} \\
 &+ -\frac{1}{\pi\nu_0^2} \sum_{\chi\chi'jl} \text{Im} \left\{ [0 \cdot \Sigma'_{z-} + \Sigma_{z+} \cdot 0] \tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\downarrow}d_{l\uparrow}}(\varepsilon) \right\} \\
 &+ -\frac{1}{\pi\nu_0^2} \sum_{\chi\chi'jl} \text{Im} \left\{ [0 \cdot 0 + \Sigma_{z+} \cdot \Sigma'_{z+}] \tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\downarrow}d_{l\downarrow}}(\varepsilon) \right\} \\
 &= 2\rho_0^\sigma \\
 &+ -\frac{1}{\pi\nu_0^2} \sum_{\chi\chi'jl} \text{Im} \left\{ [\Sigma_{z-} \cdot \Sigma'_{z-}] \tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\uparrow}d_{l\uparrow}}(\varepsilon) \right\} \\
 &+ -\frac{1}{\pi\nu_0^2} \sum_{\chi\chi'jl} \text{Im} \left\{ [\Sigma_{z+} \cdot \Sigma'_{z+}] \tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\downarrow}d_{l\downarrow}}(\varepsilon) \right\}
 \end{aligned}$$

Therefore,

$$\rho_{LDOS}^{\chi}(\varepsilon) = \rho_0^{\sigma} - \frac{1}{\pi\nu_0^2} \sum_{\chi\chi'jl} \text{Im} \left[\left(\Sigma_{z-} \tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\uparrow}d_{l\uparrow}}(\varepsilon) \Sigma'_{z-} \right) + \left(\Sigma_{z+} \tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\downarrow}d_{l\downarrow}}(\varepsilon) \Sigma'_{z+} \right) \right] \quad (\text{A.41})$$

Thus, as we can see, for $R \neq 0$, the LDOS is dependent only by the GFs with the same spin.

Now, applying the summation over the chirality χ

$$\begin{aligned} \rho_{LDOS}^{\chi}(\varepsilon) &= \rho_0^{\sigma} - \frac{1}{\pi\nu_0^2} \sum_{\chi\chi'jl} \text{Im} \left[\left(\Sigma_{z-} \tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\uparrow}d_{l\uparrow}}(\varepsilon) \Sigma'_{z-} \right) + \left(\Sigma_{z+} \tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\downarrow}d_{l\downarrow}}(\varepsilon) \Sigma'_{z+} \right) \right] \\ &= \rho_0^{\sigma} - \frac{1}{\pi\nu_0^2} \sum_{jl} \text{Im} \left[\sum_{\chi\chi'} \left(\Sigma_{z-} \tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\uparrow}d_{l\uparrow}}(\varepsilon) \Sigma'_{z-} \right) + \sum_{\chi\chi'} \left(\Sigma_{z+} \tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\downarrow}d_{l\downarrow}}(\varepsilon) \Sigma'_{z+} \right) \right] \\ &= \rho_0^{\sigma} - \frac{1}{\pi\nu_0^2} \sum_{jl} \text{Im} \left[\left(\Sigma_{z-}^{\chi} \Sigma'_{z-}^{\chi} + \Sigma_{z-}^{\bar{\chi}} \Sigma'_{z-}^{\bar{\chi}} + \Sigma_{z-}^{\chi} \Sigma'_{z-}^{\bar{\chi}} + \Sigma_{z-}^{\bar{\chi}} \Sigma'_{z-}^{\chi} \right) \cdot \tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\uparrow}d_{l\uparrow}}(\varepsilon) \right. \\ &\quad \left. + \left(\Sigma_{z+}^{\chi} \Sigma'_{z+}^{\chi} + \Sigma_{z+}^{\bar{\chi}} \Sigma'_{z+}^{\bar{\chi}} + \Sigma_{z+}^{\chi} \Sigma'_{z+}^{\bar{\chi}} + \Sigma_{z+}^{\bar{\chi}} \Sigma'_{z+}^{\chi} \right) \cdot \tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\downarrow}d_{l\downarrow}}(\varepsilon) \right] \\ &= \rho_0^{\sigma} - \frac{1}{\pi\nu_0^2} \sum_{jl} \text{Im} \left[\left(\Sigma_{z-}^{\chi} \Sigma'_{z-}^{\chi} + \Sigma_{z-}^{\bar{\chi}} \Sigma'_{z-}^{\bar{\chi}} \right) \cdot \tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\uparrow}d_{l\uparrow}}(\varepsilon) + \left(\Sigma_{z+}^{\chi} \Sigma'_{z+}^{\chi} + \Sigma_{z+}^{\bar{\chi}} \Sigma'_{z+}^{\bar{\chi}} \right) \cdot \tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\downarrow}d_{l\downarrow}}(\varepsilon) \right] \\ &\quad + \rho_0^{\sigma} - \frac{1}{\pi\nu_0^2} \sum_{jl} \text{Im} \left[\left(\Sigma_{z-}^{\bar{\chi}} \Sigma'_{z-}^{\chi} + \Sigma_{z-}^{\chi} \Sigma'_{z-}^{\bar{\chi}} \right) \cdot \tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\uparrow}d_{l\uparrow}}(\varepsilon) + \left(\Sigma_{z+}^{\bar{\chi}} \Sigma'_{z+}^{\chi} + \Sigma_{z+}^{\chi} \Sigma'_{z+}^{\bar{\chi}} \right) \cdot \tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\downarrow}d_{l\downarrow}}(\varepsilon) \right] \end{aligned} \quad (\text{A.42})$$

Therefore,

$$\rho_{LDOS}^{\chi}(\varepsilon) = \text{Intra}_{jl} + \text{Inter}_{jl} \quad (\text{A.43})$$

Here, the Intra_{jl} and Inter_{jl} represent the Weyl intra-node and the Weyl inter-node, respectively.

A.4 Green's Functions for $U_j \neq 0$

Here, we will calculate the impurities GF $\tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\sigma}d_{l\sigma'}}(\varepsilon)$ for $U_j \neq 0$ through Hubbard I approximation. So, we start by applying the same EOM method in the impurity GF with the full Hamiltonian similar to Eq. (A.18) but with the Hamiltonian for the Coulomb potential \mathcal{H}_U

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{Wncs} &= \mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_{tun} + \mathcal{H}_{imp} + \mathcal{H}_{hyb} + \mathcal{H}_U \\ &= \sum_{\mathbf{k}\chi} \chi k_z^{\chi} c_{\mathbf{k}\chi\uparrow}^{\dagger} c_{\mathbf{k}\chi\uparrow} + \sum_{\mathbf{k}\chi} \chi k_z^{\chi} c_{\mathbf{k}\chi\uparrow}^{\dagger} c_{\mathbf{k}\chi\downarrow} + \sum_{\mathbf{k}\chi} \chi k_z^{\chi} c_{\mathbf{k}\chi\downarrow}^{\dagger} c_{\mathbf{k}\chi\uparrow} - \sum_{\mathbf{k}\chi} \chi k_z^{\chi} c_{\mathbf{k}\chi\downarrow}^{\dagger} c_{\mathbf{k}\chi\downarrow} \\ &\quad - \sum_{j\sigma} t d_{j\sigma}^{\dagger} d_{j\sigma} + \sum_{j\sigma} \varepsilon_{j\sigma} d_{j\sigma}^{\dagger} d_{j\sigma} + \sum_{j\mathbf{k}\sigma\chi} (V_j \mathbf{k} d_{j\sigma}^{\dagger} c_{\mathbf{k}\chi\sigma} + V_j^* \mathbf{k} c_{\mathbf{k}\chi\sigma}^{\dagger} d_{j\sigma}) + \sum_j U_j d_{j\uparrow}^{\dagger} d_{j\uparrow} d_{j\downarrow}^{\dagger} d_{j\downarrow} \end{aligned} \quad (\text{A.44})$$

A.4.1 Calculation of $\tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\sigma}d_{l\sigma'}}(\varepsilon)$

The impurity GF is given by

$$\mathcal{G}_{d_{j\sigma}d_{l\sigma'}}(\tau) = -\frac{i}{\hbar} \theta(\tau) Z_e^{-1} \sum_n e^{-\beta E_n} \langle n | \left[d_{j\sigma}(\tau), d_{l\sigma'}^{\dagger}(0) \right]_+ | n \rangle \quad (\text{A.45})$$

The derivative is

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial \tau} \mathcal{G}_{d_{j\sigma} d_{l\sigma'}}(\tau) &= -\frac{i}{\hbar} \delta(\tau) Z_e^{-1} \sum_n e^{-\beta E_n} \langle n | \left[d_{j\sigma}(\tau), d_{l\sigma'}^\dagger(0) \right]_+ | n \rangle \\ &+ \left(-\frac{i}{\hbar} \right) \theta(\tau) Z_e^{-1} \sum_n e^{-\beta E_n} \langle n | \left[\frac{\partial}{\partial \tau} d_{j\sigma}(\tau), d_{l\sigma'}^\dagger(0) \right]_+ | n \rangle \end{aligned} \quad (\text{A.46})$$

Using the Heisenberg equation to calculate $\frac{\partial}{\partial \tau} d_{j\sigma}(\tau)$,

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial \tau} d_{j\sigma}(\tau) &= [d_{j\sigma}, \mathcal{H}_{Wncs}] \\ &= [d_{j\sigma}, \mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_{tun} + \mathcal{H}_{imp} + \mathcal{H}_{hyb} + \mathcal{H}_U] \\ &= \cancel{[d_{j\sigma}, \mathcal{H}_0]} + [d_{j\sigma}, \mathcal{H}_{tun}] + [d_{j\sigma}, \mathcal{H}_{imp}] + [d_{j\sigma}, \mathcal{H}_{hyb}] + [d_{j\sigma}, \mathcal{H}_U] \\ &= (-td_{j\sigma}) + (\varepsilon_{j\sigma} d_{j\sigma}) + \left(\sum_{\mathbf{k}\chi} V_{j\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}\chi\sigma} \right) + \left[d_{j\sigma}, \sum_{j'} U_{j'} d_{j'\uparrow}^\dagger d_{j'\uparrow} d_{j'\downarrow}^\dagger d_{j'\downarrow} \right] \\ \frac{\partial}{\partial \tau} d_{j\sigma}(\tau) &= \frac{i}{\hbar} td_{j\sigma} - \frac{i}{\hbar} \varepsilon_{j\sigma} d_{j\sigma} - \frac{i}{\hbar} \sum_{\mathbf{k}\chi} V_{j\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}\chi\sigma} - \frac{i}{\hbar} \left[d_{j\sigma}, \sum_{j'} U_{j'} d_{j'\uparrow}^\dagger d_{j'\uparrow} d_{j'\downarrow}^\dagger d_{j'\downarrow} \right] \end{aligned} \quad (\text{A.47})$$

Solving the term with U_j

$$\begin{aligned} \left[d_{j\sigma}, \sum_{j'} U_{j'} d_{j'\uparrow}^\dagger d_{j'\uparrow} d_{j'\downarrow}^\dagger d_{j'\downarrow} \right] &= \sum_{j'} U_{j'} \left(d_{j\sigma} d_{j'\uparrow}^\dagger d_{j'\uparrow} d_{j'\downarrow}^\dagger d_{j'\downarrow} - d_{j'\uparrow}^\dagger d_{j'\uparrow} d_{j'\downarrow}^\dagger d_{j'\downarrow} d_{j\sigma} \right) \\ &= \sum_{j'} U_{j'} \left[\left(\delta_{jj'} \delta_{\sigma\uparrow} - d_{j'\uparrow}^\dagger d_{j\sigma} \right) d_{j'\uparrow} d_{j'\downarrow}^\dagger d_{j'\downarrow} - d_{j'\uparrow}^\dagger d_{j'\uparrow} d_{j'\downarrow}^\dagger (-d_{j\sigma} d_{j'\downarrow}) \right] \\ &= \sum_{j'} U_{j'} \left[\delta_{jj'} \delta_{\sigma\uparrow} d_{j'\uparrow} d_{j'\downarrow}^\dagger d_{j'\downarrow} - d_{j'\uparrow}^\dagger d_{j\sigma} d_{j'\uparrow} d_{j'\downarrow}^\dagger + d_{j'\uparrow}^\dagger d_{j'\uparrow} d_{j'\downarrow}^\dagger d_{j\sigma} \right] d_{j'\downarrow} \\ &= \sum_{j'} U_{j'} \left[\delta_{jj'} \delta_{\sigma\uparrow} d_{j'\uparrow} d_{j'\downarrow}^\dagger d_{j'\downarrow} - d_{j'\uparrow}^\dagger (-d_{j'\uparrow} d_{j\sigma}) d_{j'\downarrow}^\dagger + d_{j'\uparrow}^\dagger d_{j'\uparrow} d_{j'\downarrow}^\dagger d_{j\sigma} \right] d_{j'\downarrow} \\ &= \sum_{j'} U_{j'} \left[\delta_{jj'} \delta_{\sigma\uparrow} d_{j'\uparrow} d_{j'\downarrow}^\dagger d_{j'\downarrow} + d_{j'\uparrow}^\dagger d_{j'\uparrow} d_{j\sigma} d_{j'\downarrow}^\dagger + d_{j'\uparrow}^\dagger d_{j'\uparrow} d_{j'\downarrow}^\dagger d_{j\sigma} \right] d_{j'\downarrow} \\ &= \sum_{j'} U_{j'} \left\{ \delta_{jj'} \delta_{\sigma\uparrow} d_{j'\uparrow} d_{j'\downarrow}^\dagger + d_{j'\uparrow}^\dagger d_{j'\uparrow} \left(d_{j\sigma} d_{j'\downarrow}^\dagger + d_{j'\downarrow}^\dagger d_{j\sigma} \right) \right\} d_{j'\downarrow} \\ &= \sum_{j'} U_{j'} \left\{ \delta_{jj'} \delta_{\sigma\uparrow} d_{j'\uparrow} d_{j'\downarrow}^\dagger + d_{j'\uparrow}^\dagger d_{j'\uparrow} \left[d_{j\sigma}, d_{j'\downarrow}^\dagger \right]_+ \right\} d_{j'\downarrow} \\ &= \sum_{j'} U_{j'} \left\{ \delta_{jj'} \delta_{\sigma\uparrow} d_{j'\uparrow} d_{j'\downarrow}^\dagger + d_{j'\uparrow}^\dagger d_{j'\uparrow} (\delta_{jj'} \delta_{\sigma\downarrow}) \right\} d_{j'\downarrow} \\ &= \sum_{j'} U_{j'} \delta_{jj'} \left\{ \delta_{\sigma\uparrow} d_{j'\uparrow} d_{j'\downarrow}^\dagger + \delta_{\sigma\downarrow} d_{j'\uparrow}^\dagger d_{j'\uparrow} \right\} d_{j'\downarrow} \\ &= \sum_{j'=j} U_j \delta_{jj} \left\{ \delta_{\sigma\uparrow} d_{j\uparrow} d_{j\downarrow}^\dagger + \delta_{\sigma\downarrow} d_{j\uparrow}^\dagger d_{j\uparrow} \right\} d_{j\downarrow} \\ &= U_j \left(\delta_{\sigma\uparrow} d_{j\uparrow} d_{j\downarrow}^\dagger + \delta_{\sigma\downarrow} d_{j\uparrow}^\dagger d_{j\uparrow} \right) d_{j\downarrow} \\ &= U_j \left[\delta_{\sigma\uparrow} \left(-d_{j\downarrow}^\dagger d_{j\uparrow} \right) d_{j\downarrow} + \delta_{\sigma\downarrow} n_{j\uparrow} d_{j\downarrow} \right] \\ &= U_j \left[-\delta_{\sigma\uparrow} d_{j\downarrow}^\dagger \left(-d_{j\downarrow} d_{j\uparrow} \right) + \delta_{\sigma\downarrow} n_{j\uparrow} d_{j\downarrow} \right] \\ &= U_j \left(\delta_{\sigma\uparrow} d_{j\downarrow}^\dagger d_{j\downarrow} d_{j\uparrow} + \delta_{\sigma\downarrow} n_{j\uparrow} d_{j\downarrow} \right) \\ &= U_j \left(\delta_{\sigma\uparrow} n_{j\downarrow} d_{j\uparrow} + \delta_{\sigma\downarrow} n_{j\uparrow} d_{j\downarrow} \right) \end{aligned} \quad (\text{A.48})$$

Observe that for $\sigma = \uparrow$ the result will be $U_j n_{j\downarrow} d_{j\uparrow}$ and for $\sigma = \downarrow$ the result will be $U_j n_{j\uparrow} d_{j\downarrow}$, so we have a general expression $U_j n_{j\bar{\sigma}} d_{j\sigma}$ for both results, where $\bar{\sigma}$ has the opposite spin of σ . Therefore,

$$\left[d_{j\sigma}, \sum_{j'} U_{j'} d_{j'\uparrow}^\dagger d_{j'\uparrow} d_{j'\downarrow}^\dagger d_{j'\downarrow} \right] = U_j n_{j\bar{\sigma}} d_{j\sigma} \quad (\text{A.49})$$

where, $n_{j\bar{\sigma}} = d_{j\bar{\sigma}}^\dagger d_{j\bar{\sigma}}$.

Substituting in Eq. (A.47)

$$\frac{\partial}{\partial \tau} d_{j\sigma}(\tau) = \frac{i}{\hbar} t d_{j\sigma} - \frac{i}{\hbar} \varepsilon_{j\sigma} d_{j\sigma} - \frac{i}{\hbar} \sum_{\mathbf{k}\chi} V_{j\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}\chi\sigma} - \frac{i}{\hbar} U_j n_{j\bar{\sigma}} d_{j\sigma} \quad (\text{A.50})$$

Substituting Eq. (A.50)

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial \tau} \mathcal{G}_{d_{j\sigma} d_{l\sigma'}}(\tau) &= -\frac{i}{\hbar} \delta(\tau) Z_e^{-1} \sum_n e^{-\beta E_n} \langle n | \left[d_{j\sigma}(\tau), d_{l\sigma'}^\dagger(0) \right]_+ | n \rangle \\ &+ \left(-\frac{i}{\hbar} \right) \theta(\tau) Z_e^{-1} \sum_n e^{-\beta E_n} \langle n | \left[\frac{\partial}{\partial \tau} d_{j\sigma}(\tau), d_{l\sigma'}^\dagger(0) \right]_+ | n \rangle \\ &= -\frac{i}{\hbar} \delta(\tau) Z_e^{-1} \sum_n e^{-\beta E_n} \langle n | \left[d_{j\sigma}(\tau), d_{l\sigma'}^\dagger(0) \right]_+ | n \rangle \\ &+ \left(-\frac{i}{\hbar} \right) \theta(\tau) Z_e^{-1} \sum_n e^{-\beta E_n} \langle n | \left[\left(\frac{i}{\hbar} t d_{j\sigma} \right), d_{l\sigma'}^\dagger(0) \right]_+ | n \rangle \\ &+ \left(-\frac{i}{\hbar} \right) \theta(\tau) Z_e^{-1} \sum_n e^{-\beta E_n} \langle n | \left[\left\{ -\frac{i}{\hbar} \varepsilon_{j\sigma} d_{j\sigma} \right\}, d_{l\sigma'}^\dagger(0) \right]_+ | n \rangle \\ &+ \left(-\frac{i}{\hbar} \right) \theta(\tau) Z_e^{-1} \sum_n e^{-\beta E_n} \langle n | \left[\left\{ -\frac{i}{\hbar} \sum_{\mathbf{k}\chi} V_{j\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}\chi\sigma} \right\}, d_{l\sigma'}^\dagger(0) \right]_+ | n \rangle \\ &+ \left(-\frac{i}{\hbar} \right) \theta(\tau) Z_e^{-1} \sum_n e^{-\beta E_n} \langle n | \left[\left\{ -\frac{i}{\hbar} U_j n_{j\bar{\sigma}} d_{j\sigma} \right\}, d_{l\sigma'}^\dagger(0) \right]_+ | n \rangle \\ &= -\frac{i}{\hbar} \delta(\tau) Z_e^{-1} \sum_n e^{-\beta E_n} \langle n | \left[d_{j\sigma}(\tau), d_{l\sigma'}^\dagger(0) \right]_+ | n \rangle \\ &+ \frac{i}{\hbar} t \mathcal{G}_{d_{j\sigma} d_{l\sigma'}}(\tau) - \frac{i}{\hbar} \varepsilon_{j\sigma} \mathcal{G}_{d_{j\sigma} d_{l\sigma'}}(\tau) - \frac{i}{\hbar} \sum_{\mathbf{k}\chi} V_{j\mathbf{k}} \mathcal{G}_{c_{\mathbf{k}\chi\sigma} d_{l\sigma'}}(\tau) \\ &+ \left(-\frac{i}{\hbar} \right) U_j \left\{ -\frac{i}{\hbar} \theta(\tau) Z_e^{-1} \sum_n e^{-\beta E_n} \langle n | \left[n_{j\bar{\sigma}} d_{j\sigma}, d_{l\sigma'}^\dagger(0) \right]_+ | n \rangle \right\} \end{aligned} \quad (\text{A.51})$$

Therefore,

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial \tau} \mathcal{G}_{d_{j\sigma} d_{l\sigma'}}(\tau) &= -\frac{i}{\hbar} \delta(\tau) Z_e^{-1} \sum_n e^{-\beta E_n} \langle n | \left[d_{j\sigma}(\tau), d_{l\sigma'}^\dagger(0) \right]_+ | n \rangle \\ &+ \frac{i}{\hbar} t \mathcal{G}_{d_{j\sigma} d_{l\sigma'}}(\tau) - \frac{i}{\hbar} \varepsilon_{j\sigma} \mathcal{G}_{d_{j\sigma} d_{l\sigma'}}(\tau) - \frac{i}{\hbar} \sum_{\mathbf{k}\chi} V_{j\mathbf{k}} \mathcal{G}_{c_{\mathbf{k}\chi\sigma} d_{l\sigma'}}(\tau) - \frac{i}{\hbar} U_j \mathcal{G}_{n_{j\bar{\sigma}} d_{j\sigma} d_{l\sigma'}}(\tau) \end{aligned} \quad (\text{A.52})$$

Integrating and multiplying both sides by $e^{\frac{i}{\hbar}(\varepsilon+i\eta)t}$,

$$\tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\sigma} d_{l\sigma'}}(\varepsilon) = \frac{\delta_{jl} \delta_{\sigma\sigma'}}{(\varepsilon + i\eta - \varepsilon_{j\sigma})} - \frac{t}{\varepsilon + i\eta - \varepsilon_{j\sigma}} \tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\sigma} d_{l\sigma'}}(\varepsilon) + \frac{\sum_{\mathbf{k}\chi} V_{j\mathbf{k}} \tilde{\mathcal{G}}_{c_{\mathbf{k}\chi\sigma} d_{l\sigma'}}(\varepsilon)}{(\varepsilon + i\eta - \varepsilon_{j\sigma})} + U_j \tilde{\mathcal{G}}_{n_{j\bar{\sigma}} d_{j\sigma} d_{l\sigma'}}(\varepsilon) \quad (\text{A.53})$$

By looking at Eq. (A.41) we can see that the LDOS is only dependent of GF with the same spin σ . Thus

$$\tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\sigma}d_{l\sigma}}(\varepsilon) = \frac{\delta_{jl}}{(\varepsilon + i\eta - \varepsilon_{j\sigma})} - \frac{t}{\varepsilon + i\eta - \varepsilon_{j\sigma}} \tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\sigma}d_{l\sigma}}(\varepsilon) + \frac{\sum_{\mathbf{k}\chi} V_{j\mathbf{k}} \tilde{\mathcal{G}}_{c_{\mathbf{k}\chi\sigma}d_{l\sigma}}(\varepsilon)}{(\varepsilon + i\eta - \varepsilon_{j\sigma})} + U_j \tilde{\mathcal{G}}_{n_{j\sigma}d_{j\sigma}d_{l\sigma}}(\varepsilon) \quad (\text{A.54})$$

Now,

$$\tilde{\mathcal{G}}_{c_{\mathbf{k}\chi\uparrow}d_{l\uparrow}}(\varepsilon) = \frac{(\varepsilon + i\eta + \chi k_{z-}^X) \sum_j V_{j\mathbf{k}} V_{j\mathbf{k}}^* \tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\uparrow}d_{l\uparrow}}(\varepsilon)}{\tilde{\varepsilon}_\chi^2 - (\hbar\nu_F k^\chi)^2} + \frac{\chi k_{z-}^X \sum_j V_{j\mathbf{k}} V_{j\mathbf{k}}^* \tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\downarrow}d_{l\uparrow}}(\varepsilon)}{\tilde{\varepsilon}_\chi^2 - (\hbar\nu_F k^\chi)^2} \quad (\text{A.55})$$

$$\tilde{\mathcal{G}}_{c_{\mathbf{k}\chi\downarrow}d_{l\downarrow}}(\varepsilon) = \frac{(\varepsilon + i\eta - \chi k_{z+}^X) \sum_j V_{j\mathbf{k}} V_{j\mathbf{k}}^* \tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\downarrow}d_{l\downarrow}}(\varepsilon)}{\tilde{\varepsilon}_\chi^2 - (\hbar\nu_F k^\chi)^2} + \frac{\chi k_{z+}^X \sum_j V_{j\mathbf{k}} V_{j\mathbf{k}}^* \tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\uparrow}d_{l\downarrow}}(\varepsilon)}{\tilde{\varepsilon}_\chi^2 - (\hbar\nu_F k^\chi)^2} \quad (\text{A.56})$$

Using the previous equation to substitute in $\tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\sigma}d_{l\sigma}}(\varepsilon)$, changing the indices to \tilde{j} because we don't want it mix with j in the previous equation. Thus, for $\tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\uparrow}d_{l\uparrow}}(\varepsilon)$

$$\begin{aligned} \tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\uparrow}d_{l\uparrow}}(\varepsilon) &= \frac{\delta_{jl}}{(\varepsilon + i\eta - \varepsilon_{j\uparrow})} - \frac{t}{(\varepsilon + i\eta - \varepsilon_{j\uparrow})} \tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\uparrow}d_{l\uparrow}}(\varepsilon) + \frac{\sum_{\mathbf{k}\chi} V_{j\mathbf{k}} \tilde{\mathcal{G}}_{c_{\mathbf{k}\chi\uparrow}d_{l\uparrow}}(\varepsilon)}{(\varepsilon + i\eta - \varepsilon_{j\uparrow})} + \frac{U_j \tilde{\mathcal{G}}_{n_{j\downarrow}d_{j\uparrow}d_{l\uparrow}}(\varepsilon)}{(\varepsilon + i\eta - \varepsilon_{j\uparrow})} \\ (\varepsilon + i\eta - \varepsilon_{j\uparrow}) \tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\uparrow}d_{l\uparrow}}(\varepsilon) &= \delta_{jl} - t \tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\uparrow}d_{l\uparrow}}(\varepsilon) + U_j \tilde{\mathcal{G}}_{n_{j\downarrow}d_{j\uparrow}d_{l\uparrow}}(\varepsilon) \\ &+ \sum_{\mathbf{k}\chi} V_{j\mathbf{k}} \left[\frac{(\varepsilon + i\eta + \chi k_{z-}^X) \sum_{\tilde{j}} V_{\tilde{j}\mathbf{k}} V_{\tilde{j}\mathbf{k}}^* \tilde{\mathcal{G}}_{d_{\tilde{j}\uparrow}d_{l\uparrow}}(\varepsilon)}{\tilde{\varepsilon}_\chi^2 - (\hbar\nu_F k^\chi)^2} + \frac{\chi k_{z-}^X \sum_{\tilde{j}} V_{\tilde{j}\mathbf{k}} V_{\tilde{j}\mathbf{k}}^* \tilde{\mathcal{G}}_{d_{\tilde{j}\downarrow}d_{l\uparrow}}(\varepsilon)}{\tilde{\varepsilon}_\chi^2 - (\hbar\nu_F k^\chi)^2} \right] \\ &= \delta_{jl} - t \tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\uparrow}d_{l\uparrow}}(\varepsilon) + U_j \tilde{\mathcal{G}}_{n_{j\downarrow}d_{j\uparrow}d_{l\uparrow}}(\varepsilon) \\ &+ \sum_{\mathbf{k}\chi\tilde{j}} \frac{(\varepsilon + i\eta + \chi k_{z-}^X) V_{j\mathbf{k}} V_{\tilde{j}\mathbf{k}}^* \tilde{\mathcal{G}}_{d_{\tilde{j}\uparrow}d_{l\uparrow}}(\varepsilon)}{\tilde{\varepsilon}_\chi^2 - (\hbar\nu_F k^\chi)^2} + \sum_{\mathbf{k}\chi\tilde{j}} \frac{\chi k_{z-}^X \sum_{\tilde{j}} V_{j\mathbf{k}} V_{\tilde{j}\mathbf{k}}^* \tilde{\mathcal{G}}_{d_{\tilde{j}\downarrow}d_{l\uparrow}}(\varepsilon)}{\tilde{\varepsilon}_\chi^2 - (\hbar\nu_F k^\chi)^2} \\ &= \delta_{jl} - t \tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\uparrow}d_{l\uparrow}}(\varepsilon) + U_j \tilde{\mathcal{G}}_{n_{j\downarrow}d_{j\uparrow}d_{l\uparrow}}(\varepsilon) \\ &+ \sum_{\mathbf{k}\chi} \sum_{\tilde{j}=j} \frac{(\varepsilon + i\eta + \chi k_{z-}^X) V_{j\mathbf{k}} V_{\tilde{j}\mathbf{k}}^* \tilde{\mathcal{G}}_{d_{\tilde{j}\uparrow}d_{l\uparrow}}(\varepsilon)}{\tilde{\varepsilon}_\chi^2 - (\hbar\nu_F k^\chi)^2} + \sum_{\mathbf{k}\chi} \sum_{\tilde{j}=j} \frac{(\varepsilon + i\eta + \chi k_{z-}^X) V_{j\mathbf{k}} V_{\tilde{j}\mathbf{k}}^* \tilde{\mathcal{G}}_{d_{\tilde{j}\uparrow}d_{l\uparrow}}(\varepsilon)}{\tilde{\varepsilon}_\chi^2 - (\hbar\nu_F k^\chi)^2} \\ &+ \sum_{\mathbf{k}\chi} \sum_{\tilde{j}=j} \frac{\chi k_{z-}^X V_{j\mathbf{k}} V_{\tilde{j}\mathbf{k}}^* \tilde{\mathcal{G}}_{d_{\tilde{j}\downarrow}d_{l\uparrow}}(\varepsilon)}{(\varepsilon + i\eta - \chi Q_0)^2} + \sum_{\mathbf{k}\chi} \sum_{\tilde{j}=j} \frac{\chi k_{z-}^X V_{j\mathbf{k}} V_{\tilde{j}\mathbf{k}}^* \tilde{\mathcal{G}}_{d_{\tilde{j}\downarrow}d_{l\uparrow}}(\varepsilon)}{\tilde{\varepsilon}_\chi^2 - (\hbar\nu_F k^\chi)^2} \\ &= \delta_{jl} - t \tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\uparrow}d_{l\uparrow}}(\varepsilon) + U_j \tilde{\mathcal{G}}_{n_{j\downarrow}d_{j\uparrow}d_{l\uparrow}}(\varepsilon) \\ &+ \sum_{\mathbf{k}\chi} \frac{(\varepsilon + i\eta + \chi k_{z-}^X) V_{j\mathbf{k}} V_{j\mathbf{k}}^* \tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\uparrow}d_{l\uparrow}}(\varepsilon)}{\tilde{\varepsilon}_\chi^2 - (\hbar\nu_F k^\chi)^2} + \sum_{\mathbf{k}\chi} \frac{(\varepsilon + i\eta + \chi k_{z-}^X) V_{j\mathbf{k}} V_{j\mathbf{k}}^* \tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\uparrow}d_{l\uparrow}}(\varepsilon)}{\tilde{\varepsilon}_\chi^2 - (\hbar\nu_F k^\chi)^2} \\ &+ \sum_{\mathbf{k}\chi} \frac{\chi k_{z-}^X V_{j\mathbf{k}} V_{j\mathbf{k}}^* \tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\downarrow}d_{l\uparrow}}(\varepsilon)}{\tilde{\varepsilon}_\chi^2 - (\hbar\nu_F k^\chi)^2} + \sum_{\mathbf{k}\chi} \frac{\chi k_{z-}^X V_{j\mathbf{k}} V_{j\mathbf{k}}^* \tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\downarrow}d_{l\uparrow}}(\varepsilon)}{\tilde{\varepsilon}_\chi^2 - (\hbar\nu_F k^\chi)^2} \end{aligned} \quad (\text{A.57})$$

Let us that a break to analyze the terms with $V_{j\mathbf{k}}$. Using the Eq. (A.15) we are going to substitute it in a general equation with $V_{j\mathbf{k}}$,

$V_{j'\mathbf{k}}^*$ and $\gamma_{k\chi}$, which, in this case, $\gamma_{k\chi} = \chi k_-^\chi, \varepsilon + i\eta + \chi k_{z-}^\chi$, but it is a general term that multiplies $V_{j\mathbf{k}}$ and $V_{j'\mathbf{k}}^*$. Thus,

$$\begin{aligned}
 \Sigma_{jj'} &= \sum_{\mathbf{k}\chi} \frac{\gamma_{k\chi} V_{j\mathbf{k}} V_{j'\mathbf{k}}^*}{\tilde{\varepsilon}_\chi^2 - (\hbar\nu_F k^\chi)^2} \\
 &= \sum_{\mathbf{k}\chi} \frac{\gamma_{k\chi}}{\tilde{\varepsilon}_\chi^2 - (\hbar\nu_F k^\chi)^2} \cdot \left(\frac{\nu_0}{\sqrt{\mathcal{N}}} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_j} \right) \cdot \left(\frac{\nu_0}{\sqrt{\mathcal{N}}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_{j'}} \right) \\
 &= \frac{\nu_0^2}{\mathcal{N}} \sum_{\mathbf{k}\chi} \frac{\gamma_{k\chi}}{\tilde{\varepsilon}_\chi^2 - (\hbar\nu_F k^\chi)^2} \cdot e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_j} \cdot e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_{j'}} \\
 &= \frac{\nu_0^2}{\mathcal{N}} \sum_{\mathbf{k}\chi} \frac{\gamma_{k\chi}}{\tilde{\varepsilon}_\chi^2 - (\hbar\nu_F k^\chi)^2} \cdot e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_j + i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_{j'}} \\
 &= \frac{\nu_0^2}{\mathcal{N}} \sum_{\mathbf{k}\chi} \frac{\gamma_{k\chi}}{\tilde{\varepsilon}_\chi^2 - (\hbar\nu_F k^\chi)^2} \cdot e^{-i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{R}_j - \mathbf{R}_{j'})} \\
 \Sigma_{jj'}(\mathbf{R}_{jj'}) &= \frac{\nu_0^2}{\mathcal{N}} \sum_{\mathbf{k}\chi} \frac{\gamma_{k\chi}}{\tilde{\varepsilon}_\chi^2 - (\hbar\nu_F k^\chi)^2} \cdot e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_{jj'}} \tag{A.58}
 \end{aligned}$$

With Eq. (A.58), we can recognize some self energies in $\tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\uparrow}d_{l\uparrow}}(\varepsilon)$

$$\boxed{\Sigma_{z-}^{jj}(\mathbf{R}_{jj}) = \sum_{\mathbf{k}\chi} \frac{(\varepsilon + i\eta + \chi k_{z-}^\chi) V_{j\mathbf{k}} V_{j\mathbf{k}}^*}{\tilde{\varepsilon}_\chi^2 - (\hbar\nu_F k^\chi)^2}} \quad \boxed{\Sigma_{z-}^{j\bar{j}}(\mathbf{R}_{j\bar{j}}) = \sum_{\mathbf{k}\chi} \frac{(\varepsilon + i\eta + \chi k_{z-}^\chi) V_{j\mathbf{k}} V_{j\bar{j}\mathbf{k}}^*}{\tilde{\varepsilon}_\chi^2 - (\hbar\nu_F k^\chi)^2}} \tag{A.59}$$

$$\boxed{\Sigma_{-}^{jj}(\mathbf{R}_{jj}) = \sum_{\mathbf{k}\chi} \frac{\chi k_{-}^\chi V_{j\mathbf{k}} V_{j\mathbf{k}}^*}{\tilde{\varepsilon}_\chi^2 - (\hbar\nu_F k^\chi)^2}} \quad \boxed{\Sigma_{-}^{j\bar{j}}(\mathbf{R}_{j\bar{j}}) = \sum_{\mathbf{k}\chi} \frac{\chi k_{+}^\chi V_{j\mathbf{k}} V_{j\bar{j}\mathbf{k}}^*}{\tilde{\varepsilon}_\chi^2 - (\hbar\nu_F k^\chi)^2}} \tag{A.60}$$

Therefore, substituting these self-energies in $\tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\uparrow}d_{l\uparrow}}(\varepsilon)$

$$\begin{aligned}
 (\varepsilon + i\eta - \varepsilon_{j\uparrow}) \tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\uparrow}d_{l\uparrow}}(\varepsilon) &= \delta_{jl} - t \tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\uparrow}d_{l\uparrow}}(\varepsilon) + U_j \tilde{\mathcal{G}}_{n_{j\downarrow}d_{j\uparrow}d_{l\uparrow}}(\varepsilon) \\
 &\quad + \Sigma_{z-}^{jj} \tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\uparrow}d_{l\uparrow}}(\varepsilon) + \Sigma_{z-}^{j\bar{j}} \tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\uparrow}d_{l\uparrow}}(\varepsilon) + \Sigma_{-}^{jj} \tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\downarrow}d_{l\uparrow}}(\varepsilon) + \Sigma_{-}^{j\bar{j}} \tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\downarrow}d_{l\uparrow}}(\varepsilon) \\
 (\varepsilon + i\eta - \varepsilon_{j\uparrow} - \Sigma_{z-}^{jj}) \tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\uparrow}d_{l\uparrow}}(\varepsilon) &= \delta_{jl} + \left(\Sigma_{z-}^{j\bar{j}} - t \right) \tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\uparrow}d_{l\uparrow}}(\varepsilon) + \Sigma_{-}^{jj} \tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\downarrow}d_{l\uparrow}}(\varepsilon) + \Sigma_{-}^{j\bar{j}} \tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\downarrow}d_{l\uparrow}}(\varepsilon) + U_j \tilde{\mathcal{G}}_{n_{j\downarrow}d_{j\uparrow}d_{l\uparrow}}(\varepsilon) \tag{A.61}
 \end{aligned}$$

Now, for $\tilde{\mathcal{G}}_{d_j \downarrow d_{l \downarrow}}(\varepsilon)$

$$\begin{aligned}
 \tilde{\mathcal{G}}_{d_j \downarrow d_{l \downarrow}}(\varepsilon) &= \frac{\delta_{jl}}{(\varepsilon + i\eta - \varepsilon_{j \downarrow})} - \frac{t}{\varepsilon + i\eta - \varepsilon_{j \downarrow}} \tilde{\mathcal{G}}_{d_j \downarrow d_{l \downarrow}}(\varepsilon) + \frac{\sum_{\mathbf{k} \chi} V_{j \mathbf{k}} \tilde{\mathcal{G}}_{c_{\mathbf{k} \chi} \downarrow d_{l \downarrow}}(\varepsilon)}{(\varepsilon + i\eta - \varepsilon_{j \downarrow})} + U_j \tilde{\mathcal{G}}_{n_{j \uparrow} d_j \downarrow d_{l \downarrow}}(\varepsilon) \\
 (\varepsilon + i\eta - \varepsilon_{j \downarrow}) \tilde{\mathcal{G}}_{d_j \downarrow d_{l \downarrow}}(\varepsilon) &= \delta_{jl} - t \tilde{\mathcal{G}}_{d_j \downarrow d_{l \downarrow}}(\varepsilon) + U_j \tilde{\mathcal{G}}_{n_{j \uparrow} d_j \downarrow d_{l \downarrow}}(\varepsilon) \\
 &+ \sum_{\mathbf{k} \chi} V_{j \mathbf{k}} \left[\frac{(\varepsilon + i\eta - \chi k_{z+}^\chi) \sum_{\tilde{j}} V_{j \tilde{\mathbf{k}}}^* \tilde{\mathcal{G}}_{d_j \downarrow d_{l \downarrow}}(\varepsilon)}{\tilde{\varepsilon}_\chi^2 - (\hbar \nu_F k^\chi)^2} + \frac{\chi k_+^\chi \sum_{\tilde{j}} V_{j \tilde{\mathbf{k}}}^* \tilde{\mathcal{G}}_{d_j \uparrow d_{l \downarrow}}(\varepsilon)}{\tilde{\varepsilon}_\chi^2 - (\hbar \nu_F k^\chi)^2} \right] \\
 &= \delta_{jl} - t \tilde{\mathcal{G}}_{d_j \downarrow d_{l \downarrow}}(\varepsilon) + U_j \tilde{\mathcal{G}}_{n_{j \uparrow} d_j \downarrow d_{l \downarrow}}(\varepsilon) \\
 &+ \sum_{\mathbf{k} \chi \tilde{j}} \frac{(\varepsilon + i\eta - \chi k_{z+}^\chi) V_{j \mathbf{k}} V_{j \tilde{\mathbf{k}}}^* \tilde{\mathcal{G}}_{d_j \downarrow d_{l \downarrow}}(\varepsilon)}{\tilde{\varepsilon}_\chi^2 - (\hbar \nu_F k^\chi)^2} + \sum_{\mathbf{k} \chi \tilde{j}} \frac{\chi k_+^\chi V_{j \mathbf{k}} V_{j \tilde{\mathbf{k}}}^* \tilde{\mathcal{G}}_{d_j \uparrow d_{l \downarrow}}(\varepsilon)}{\tilde{\varepsilon}_\chi^2 - (\hbar \nu_F k^\chi)^2} \\
 &= \delta_{jl} - t \tilde{\mathcal{G}}_{d_j \downarrow d_{l \downarrow}}(\varepsilon) + U_j \tilde{\mathcal{G}}_{n_{j \uparrow} d_j \downarrow d_{l \downarrow}}(\varepsilon) \\
 &+ \sum_{\mathbf{k} \chi} \sum_{\tilde{j}=j} \frac{(\varepsilon + i\eta - \chi k_{z+}^\chi) V_{j \mathbf{k}} V_{j \tilde{\mathbf{k}}}^* \tilde{\mathcal{G}}_{d_j \downarrow d_{l \downarrow}}(\varepsilon)}{\tilde{\varepsilon}_\chi^2 - (\hbar \nu_F k^\chi)^2} + \sum_{\mathbf{k} \chi} \sum_{\tilde{j}=\bar{j}} \frac{(\varepsilon + i\eta - \chi k_{z+}^\chi) V_{j \mathbf{k}} V_{j \tilde{\mathbf{k}}}^* \tilde{\mathcal{G}}_{d_j \downarrow d_{l \downarrow}}(\varepsilon)}{\tilde{\varepsilon}_\chi^2 - (\hbar \nu_F k^\chi)^2} \\
 &+ \sum_{\mathbf{k} \chi} \sum_{\tilde{j}=j} \frac{\chi k_+^\chi V_{j \mathbf{k}} V_{j \tilde{\mathbf{k}}}^* \tilde{\mathcal{G}}_{d_j \uparrow d_{l \downarrow}}(\varepsilon)}{\tilde{\varepsilon}_\chi^2 - (\hbar \nu_F k^\chi)^2} + \sum_{\mathbf{k} \chi} \sum_{\tilde{j}=\bar{j}} \frac{\chi k_+^\chi V_{j \mathbf{k}} V_{j \tilde{\mathbf{k}}}^* \tilde{\mathcal{G}}_{d_j \uparrow d_{l \downarrow}}(\varepsilon)}{\tilde{\varepsilon}_\chi^2 - (\hbar \nu_F k^\chi)^2} \\
 &= \delta_{jl} - t \tilde{\mathcal{G}}_{d_j \downarrow d_{l \downarrow}}(\varepsilon) + U_j \tilde{\mathcal{G}}_{n_{j \uparrow} d_j \downarrow d_{l \downarrow}}(\varepsilon) \\
 &+ \sum_{\mathbf{k} \chi} \frac{(\varepsilon + i\eta - \chi k_{z+}^\chi) V_{j \mathbf{k}} V_{j \tilde{\mathbf{k}}}^* \tilde{\mathcal{G}}_{d_j \downarrow d_{l \downarrow}}(\varepsilon)}{\tilde{\varepsilon}_\chi^2 - (\hbar \nu_F k^\chi)^2} + \sum_{\mathbf{k} \chi} \frac{(\varepsilon + i\eta - \chi k_{z+}^\chi) V_{j \mathbf{k}} V_{j \tilde{\mathbf{k}}}^* \tilde{\mathcal{G}}_{d_j \downarrow d_{l \downarrow}}(\varepsilon)}{\tilde{\varepsilon}_\chi^2 - (\hbar \nu_F k^\chi)^2} \\
 &+ \sum_{\mathbf{k} \chi} \frac{\chi k_+^\chi V_{j \mathbf{k}} V_{j \tilde{\mathbf{k}}}^* \tilde{\mathcal{G}}_{d_j \uparrow d_{l \downarrow}}(\varepsilon)}{\tilde{\varepsilon}_\chi^2 - (\hbar \nu_F k^\chi)^2} + \sum_{\mathbf{k} \chi} \frac{\chi k_+^\chi V_{j \mathbf{k}} V_{j \tilde{\mathbf{k}}}^* \tilde{\mathcal{G}}_{d_j \uparrow d_{l \downarrow}}(\varepsilon)}{\tilde{\varepsilon}_\chi^2 - (\hbar \nu_F k^\chi)^2} \tag{A.62}
 \end{aligned}$$

With Eq. (A.58), we can recognize some self energies in $\tilde{\mathcal{G}}_{d_j \downarrow d_{l \downarrow}}(\varepsilon)$

$$\Sigma_{z+}^{jj}(\mathbf{R}_{jj}) = \sum_{\mathbf{k} \chi} \frac{(\varepsilon + i\eta - \chi k_{z+}^\chi) V_{j \mathbf{k}} V_{j \tilde{\mathbf{k}}}^*}{\tilde{\varepsilon}_\chi^2 - (\hbar \nu_F k^\chi)^2} \quad \Sigma_{z+}^{j\bar{j}}(\mathbf{R}_{j\bar{j}}) = \sum_{\mathbf{k} \chi} \frac{(\varepsilon + i\eta - \chi k_{z+}^\chi) V_{j \mathbf{k}} V_{j \tilde{\mathbf{k}}}^*}{\tilde{\varepsilon}_\chi^2 - (\hbar \nu_F k^\chi)^2} \tag{A.63}$$

$$\Sigma_{+}^{jj}(\mathbf{R}_{jj}) = \sum_{\mathbf{k} \chi} \frac{\chi k_+^\chi V_{j \mathbf{k}} V_{j \tilde{\mathbf{k}}}^*}{\tilde{\varepsilon}_\chi^2 - (\hbar \nu_F k^\chi)^2} \quad \Sigma_{+}^{j\bar{j}}(\mathbf{R}_{j\bar{j}}) = \sum_{\mathbf{k} \chi} \frac{\chi k_+^\chi V_{j \mathbf{k}} V_{j \tilde{\mathbf{k}}}^*}{\tilde{\varepsilon}_\chi^2 - (\hbar \nu_F k^\chi)^2} \tag{A.64}$$

Therefore, substituting these self-energies in $\tilde{\mathcal{G}}_{d_j \downarrow d_{l \downarrow}}(\varepsilon)$

$$\begin{aligned}
 (\varepsilon + i\eta - \varepsilon_{j \downarrow}) \tilde{\mathcal{G}}_{d_j \downarrow d_{l \downarrow}}(\varepsilon) &= \delta_{jl} - t \tilde{\mathcal{G}}_{d_j \downarrow d_{l \downarrow}}(\varepsilon) + U_j \tilde{\mathcal{G}}_{n_{j \uparrow} d_j \downarrow d_{l \downarrow}}(\varepsilon) \\
 &+ \Sigma_{z+}^{jj} \tilde{\mathcal{G}}_{d_j \downarrow d_{l \downarrow}}(\varepsilon) + \Sigma_{z+}^{j\bar{j}} \tilde{\mathcal{G}}_{d_j \downarrow d_{l \downarrow}}(\varepsilon) + \Sigma_{+}^{jj} \tilde{\mathcal{G}}_{d_j \uparrow d_{l \downarrow}}(\varepsilon) + \Sigma_{+}^{j\bar{j}} \tilde{\mathcal{G}}_{d_j \uparrow d_{l \downarrow}}(\varepsilon) \\
 (\varepsilon + i\eta - \varepsilon_{j \downarrow} - \Sigma_{z+}^{jj}) \tilde{\mathcal{G}}_{d_j \downarrow d_{l \downarrow}}(\varepsilon) &= \delta_{jl} + \left(\Sigma_{z+}^{j\bar{j}} - t \right) \tilde{\mathcal{G}}_{d_j \downarrow d_{l \downarrow}}(\varepsilon) + \Sigma_{+}^{jj} \tilde{\mathcal{G}}_{d_j \uparrow d_{l \downarrow}}(\varepsilon) + \Sigma_{+}^{j\bar{j}} \tilde{\mathcal{G}}_{d_j \uparrow d_{l \downarrow}}(\varepsilon) + U_j \tilde{\mathcal{G}}_{n_{j \uparrow} d_j \downarrow d_{l \downarrow}}(\varepsilon) \tag{A.65}
 \end{aligned}$$

Thus, for $\Sigma_{\pm}^{jj'}(\mathbf{R}_{jj'}) = 0$

$$(\varepsilon + i\eta - \varepsilon_{j \uparrow} - \Sigma_{z-}^{jj}) \tilde{\mathcal{G}}_{d_j \uparrow d_{l \uparrow}}(\varepsilon) = \delta_{jl} + \left(\Sigma_{z-}^{j\bar{j}} - t \right) \tilde{\mathcal{G}}_{d_j \uparrow d_{l \uparrow}}(\varepsilon) + \cancel{\Sigma_{z-}^{j\bar{j}} \tilde{\mathcal{G}}_{d_j \downarrow d_{l \uparrow}}(\varepsilon)} + \cancel{\Sigma_{z-}^{j\bar{j}} \tilde{\mathcal{G}}_{d_j \downarrow d_{l \uparrow}}(\varepsilon)} + U_j \tilde{\mathcal{G}}_{n_{j \downarrow} d_j \uparrow d_{l \uparrow}}(\varepsilon) \tag{A.66}$$

$$(\varepsilon + i\eta - \varepsilon_{j \downarrow} - \Sigma_{z+}^{jj}) \tilde{\mathcal{G}}_{d_j \downarrow d_{l \downarrow}}(\varepsilon) = \delta_{jl} + \left(\Sigma_{z+}^{j\bar{j}} - t \right) \tilde{\mathcal{G}}_{d_j \downarrow d_{l \downarrow}}(\varepsilon) + \cancel{\Sigma_{z+}^{j\bar{j}} \tilde{\mathcal{G}}_{d_j \uparrow d_{l \downarrow}}(\varepsilon)} + \cancel{\Sigma_{z+}^{j\bar{j}} \tilde{\mathcal{G}}_{d_j \uparrow d_{l \downarrow}}(\varepsilon)} + U_j \tilde{\mathcal{G}}_{n_{j \uparrow} d_j \downarrow d_{l \downarrow}}(\varepsilon) \tag{A.67}$$

Therefore,

$$\left(\varepsilon + i\eta - \varepsilon_{j \uparrow} - \Sigma_{z-}^{jj} \right) \tilde{\mathcal{G}}_{d_j \uparrow d_{l \uparrow}}(\varepsilon) = \delta_{jl} + \left(\Sigma_{z-}^{j\bar{j}} - t \right) \tilde{\mathcal{G}}_{d_j \uparrow d_{l \uparrow}}(\varepsilon) + U_j \tilde{\mathcal{G}}_{n_{j \downarrow} d_j \uparrow d_{l \uparrow}}(\varepsilon) \tag{A.68}$$

$$\boxed{(\varepsilon + i\eta - \varepsilon_{j\downarrow} - \Sigma_{z+}^{jj}) \tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\downarrow}d_{l\downarrow}}(\varepsilon) = \delta_{jl} + (\Sigma_{z+}^{j\bar{j}} - t) \tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\downarrow}d_{l\downarrow}}(\varepsilon) + U_j \tilde{\mathcal{G}}_{n_{j\uparrow}d_{j\downarrow}d_{l\downarrow}}(\varepsilon)} \quad (\text{A.69})$$

A.4.2 Calculating of $\tilde{\mathcal{G}}_{n_{j\bar{\sigma}}d_{j\sigma}d_{l\sigma}}(\varepsilon)$

According to Eq. (A.51)

$$\mathcal{G}_{n_{j\bar{\sigma}}d_{j\sigma}d_{l\sigma'}}(\tau) = -\frac{i}{\hbar} \theta(\tau) Z_e^{-1} \sum_n e^{-\beta E_n} \langle n | [n_{j\bar{\sigma}}(\tau) d_{j\sigma}(\tau), d_{l\sigma'}^\dagger(0)]_+ | n \rangle \quad (\text{A.70})$$

Deriving the Eq. (A.70)

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial \tau} \mathcal{G}_{n_{j\bar{\sigma}}d_{j\sigma}d_{l\sigma'}}(\tau) &= \frac{\partial}{\partial \tau} \left\{ -\frac{i}{\hbar} \theta(\tau) Z_e^{-1} \sum_n e^{-\beta E_n} \langle n | [n_{j\bar{\sigma}}(\tau) d_{j\sigma}(\tau), d_{l\sigma'}^\dagger(0)]_+ | n \rangle \right\} \\ &= -\frac{i}{\hbar} \delta(\tau) Z_e^{-1} \sum_n e^{-\beta E_n} \langle n | [n_{j\bar{\sigma}}(\tau) d_{j\sigma}(\tau), d_{l\sigma'}^\dagger(0)]_+ | n \rangle \\ &\quad + \left(-\frac{i}{\hbar} \right) \theta(\tau) Z_e^{-1} \sum_n e^{-\beta E_n} \langle n | \left[\frac{\partial}{\partial \tau} n_{j\bar{\sigma}}(\tau) d_{j\sigma}(\tau), d_{l\sigma'}^\dagger(0) \right]_+ | n \rangle \end{aligned} \quad (\text{A.71})$$

Using the Heisenberg equation to calculate $\frac{\partial}{\partial \tau} n_{j\bar{\sigma}}(\tau) d_{j\sigma}(\tau)$

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial \tau} n_{j\bar{\sigma}}(\tau) d_{j\sigma}(\tau) &= [n_{j\bar{\sigma}} d_{j\sigma}, \mathcal{H}_{Wncs}] \\ &= [n_{j\bar{\sigma}} d_{j\sigma}, \mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_{tun} + \mathcal{H}_{imp} + \mathcal{H}_{hyb} + \mathcal{H}_U] \\ &= [n_{j\bar{\sigma}} d_{j\sigma}, \mathcal{H}_0] + [d_{j\sigma}, \mathcal{H}_{tun}] + [n_{j\bar{\sigma}} d_{j\sigma}, \mathcal{H}_{imp}] + [n_{j\bar{\sigma}} d_{j\sigma}, \mathcal{H}_{hyb}] + [n_{j\bar{\sigma}} d_{j\sigma}, \mathcal{H}_U] \\ &= \left[n_{j\bar{\sigma}} d_{j\sigma}, \left\{ \sum_{\mathbf{k}\chi} \chi k_z^X c_{\mathbf{k}\chi\uparrow}^\dagger c_{\mathbf{k}\chi\uparrow} + \sum_{\mathbf{k}\chi} \chi k_x^X c_{\mathbf{k}\chi\uparrow}^\dagger c_{\mathbf{k}\chi\downarrow} + \sum_{\mathbf{k}\chi} \chi k_x^X c_{\mathbf{k}\chi\downarrow}^\dagger c_{\mathbf{k}\chi\uparrow} - \sum_{\mathbf{k}\chi} \chi k_z^X c_{\mathbf{k}\chi\downarrow}^\dagger c_{\mathbf{k}\chi\downarrow} \right\} \right] \\ &\quad + \left[n_{j\bar{\sigma}} d_{j\sigma}, \left\{ -\sum_{j'\sigma'} t d_{j'\sigma'}^\dagger d_{j'\sigma'} \right\} \right] + \left[n_{j\bar{\sigma}} d_{j\sigma}, \sum_{j'\sigma'} \varepsilon_{j'\sigma'} d_{j'\sigma'}^\dagger d_{j'\sigma'} \right] + \left[n_{j\bar{\sigma}} d_{j\sigma}, \sum_{j'\mathbf{k}\sigma'\chi} (V_{j'\mathbf{k}} d_{j'\sigma'}^\dagger c_{\mathbf{k}\chi\sigma'} + V_{j'\mathbf{k}}^* c_{\mathbf{k}\chi\sigma'}^\dagger) \right] \\ &\quad + \left[n_{j\bar{\sigma}} d_{j\sigma}, \sum_{j'} U_{j'} d_{j'\uparrow}^\dagger d_{j'\uparrow} d_{j'\downarrow}^\dagger d_{j'\downarrow} \right] \\ &= - \left[n_{j\bar{\sigma}} d_{j\sigma}, \sum_{j'\sigma'} t d_{j'\sigma'}^\dagger d_{j'\sigma'} \right] + \left[n_{j\bar{\sigma}} d_{j\sigma}, \sum_{j'\sigma'} \varepsilon_{j'\sigma'} d_{j'\sigma'}^\dagger d_{j'\sigma'} \right] + \sum_{j'\mathbf{k}\sigma'\chi} V_{j'\mathbf{k}} \left[n_{j\bar{\sigma}} d_{j\sigma}, d_{j'\sigma'}^\dagger c_{\mathbf{k}\chi\sigma'} \right] \\ &\quad + \sum_{j'\mathbf{k}\sigma'\chi} V_{j'\mathbf{k}}^* \left[n_{j\bar{\sigma}} d_{j\sigma}, c_{\mathbf{k}\chi\sigma'}^\dagger d_{j'\sigma'} \right] + \sum_{j'} U_{j'} \left[n_{j\bar{\sigma}} d_{j\sigma}, d_{j'\uparrow}^\dagger d_{j'\uparrow} d_{j'\downarrow}^\dagger d_{j'\downarrow} \right] \end{aligned}$$

Solving term by term separately starting by the term with t ,

$$\begin{aligned}
 \sum_{j'\sigma'} t \left[n_{j\bar{\sigma}} d_{j\sigma}, d_{j'\sigma'}^\dagger, d_{j'\sigma'} \right] &= \sum_{j'\sigma'} t \left[d_{j\bar{\sigma}}^\dagger d_{j\bar{\sigma}} d_{j\sigma}, d_{j'\sigma'}^\dagger, d_{j'\sigma'} \right] \\
 &= \sum_{j'\sigma'} t \left(d_{j\bar{\sigma}}^\dagger d_{j\bar{\sigma}} \mathbf{d}_{j\sigma} \mathbf{d}_{j'\sigma'}^\dagger d_{j'\sigma'} - d_{j'\sigma'}^\dagger \mathbf{d}_{j'\sigma'} \mathbf{d}_{j\bar{\sigma}}^\dagger d_{j\bar{\sigma}} d_{j\sigma} \right) \\
 &= \sum_{j'\sigma'} t \left\{ d_{j\bar{\sigma}}^\dagger d_{j\bar{\sigma}} \left(\delta_{jj'} \delta_{\sigma\sigma'} - d_{j'\sigma'}^\dagger d_{j\sigma} \right) d_{j'\sigma'} - d_{j'\sigma'}^\dagger \left(\delta_{j\bar{j}} \delta_{\bar{\sigma}\sigma'} - d_{j\bar{\sigma}}^\dagger d_{j'\sigma'} \right) d_{j\bar{\sigma}} d_{j\sigma} \right\} \\
 &= \sum_{j'\sigma'} t \left\{ \delta_{jj'} \delta_{\sigma\sigma'} d_{j\bar{\sigma}}^\dagger d_{j\bar{\sigma}} d_{j'\sigma'} - \delta_{j\bar{j}} \delta_{\bar{\sigma}\sigma'} d_{j'\sigma'}^\dagger d_{j\bar{\sigma}} d_{j\sigma} \right\} \\
 &+ \sum_{j'\sigma'} t \left\{ -d_{j\bar{\sigma}}^\dagger d_{j\bar{\sigma}} d_{j'\sigma'}^\dagger \mathbf{d}_{j\sigma} \mathbf{d}_{j'\sigma'} + d_{j'\sigma'}^\dagger \mathbf{d}_{j'\sigma'} \mathbf{d}_{j\bar{\sigma}}^\dagger d_{j\bar{\sigma}} \mathbf{d}_{j\sigma} \right\} \\
 &= \sum_{j'\sigma'} t \left\{ \delta_{jj'} \delta_{\sigma\sigma'} d_{j\bar{\sigma}}^\dagger d_{j\bar{\sigma}} d_{j'\sigma'} - \delta_{j\bar{j}} \delta_{\bar{\sigma}\sigma'} d_{j'\sigma'}^\dagger d_{j\bar{\sigma}} d_{j\sigma} \right\} \\
 &+ \sum_{j'\sigma'} t \left\{ -d_{j\bar{\sigma}}^\dagger d_{j\bar{\sigma}} d_{j'\sigma'}^\dagger (-d_{j'\sigma'} d_{j\sigma}) + \left(-d_{j\bar{\sigma}}^\dagger d_{j'\sigma'}^\dagger \right) (-d_{j\bar{\sigma}} d_{j'\sigma'}) d_{j\sigma} \right\} \\
 &= \sum_{j'\sigma'} t \left\{ \delta_{jj'} \delta_{\sigma\sigma'} d_{j\bar{\sigma}}^\dagger d_{j\bar{\sigma}} d_{j'\sigma'} - \delta_{j\bar{j}} \delta_{\bar{\sigma}\sigma'} d_{j'\sigma'}^\dagger d_{j\bar{\sigma}} d_{j\sigma} \right\} \\
 &+ \sum_{j'\sigma'} t d_{j\bar{\sigma}}^\dagger \left\{ d_{j\bar{\sigma}} d_{j'\sigma'}^\dagger + d_{j'\sigma'}^\dagger d_{j\bar{\sigma}} \right\} d_{j'\sigma'} d_{j\sigma} \\
 &= \sum_{j'\sigma'} t \left\{ \delta_{jj'} \delta_{\sigma\sigma'} d_{j\bar{\sigma}}^\dagger d_{j\bar{\sigma}} d_{j'\sigma'} - \delta_{j\bar{j}} \delta_{\bar{\sigma}\sigma'} d_{j'\sigma'}^\dagger d_{j\bar{\sigma}} d_{j\sigma} + d_{j\bar{\sigma}}^\dagger \left[d_{j\bar{\sigma}}, d_{j'\sigma'}^\dagger \right]_+ d_{j'\sigma'} d_{j\sigma} \right\} \\
 &= \sum_{j'\sigma'} t \left\{ \delta_{jj'} \delta_{\sigma\sigma'} d_{j\bar{\sigma}}^\dagger d_{j\bar{\sigma}} d_{j'\sigma'} - \delta_{j\bar{j}} \delta_{\bar{\sigma}\sigma'} d_{j'\sigma'}^\dagger d_{j\bar{\sigma}} d_{j\sigma} + \delta_{jj'} \delta_{\bar{\sigma}\sigma'} d_{j\bar{\sigma}}^\dagger d_{j'\sigma'} d_{j\sigma} \right\} \\
 &= \sum_{j'=j} \sum_{\sigma'=\sigma} t \delta_{jj} \delta_{\sigma\sigma} d_{j\bar{\sigma}}^\dagger d_{j\bar{\sigma}} d_{j\sigma} - \sum_{j'=\bar{j}} \sum_{\sigma'=\bar{\sigma}} t \delta_{j\bar{j}} \delta_{\bar{\sigma}\sigma} d_{j\bar{\sigma}}^\dagger d_{j\bar{\sigma}} d_{j\sigma} + \sum_{j'=j} \sum_{\sigma'=\bar{\sigma}} t \delta_{jj} \delta_{\bar{\sigma}\sigma} d_{j\bar{\sigma}}^\dagger d_{j'\sigma'} d_{j\sigma} \\
 &= t d_{j\bar{\sigma}}^\dagger d_{j\bar{\sigma}} d_{j\sigma} - t d_{j\bar{\sigma}}^\dagger d_{j\bar{\sigma}} d_{j\sigma} + t d_{j\bar{\sigma}}^\dagger d_{j\bar{\sigma}} d_{j\sigma} \\
 &= t \left(n_{j\bar{\sigma}} d_{j\sigma} - d_{j\bar{\sigma}}^\dagger d_{j\bar{\sigma}} d_{j\sigma} + d_{j\bar{\sigma}}^\dagger d_{j\bar{\sigma}} d_{j\sigma} \right)
 \end{aligned} \tag{A.73}$$

Solving term by term separately starting by the term with $\varepsilon_{j'\sigma'}$,

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

(A.74)

Now for the term with $V_{j'k}$,

$$\begin{aligned}
 \sum_{j'k\sigma'\chi} V_{j'k} \left[n_{j\bar{\sigma}} d_{j\sigma}, d_{j'\sigma'}^\dagger c_{k\chi\sigma'} \right] &= \sum_{j'k\sigma'\chi} V_{j'k} \left[d_{j\bar{\sigma}}^\dagger d_{j\bar{\sigma}} d_{j\sigma}, d_{j'\sigma'}^\dagger c_{k\chi\sigma'} \right] \\
 &= \sum_{j'k\sigma'\chi} V_{j'k} \left(d_{j\bar{\sigma}}^\dagger d_{j\bar{\sigma}} d_{j\sigma} d_{j'\sigma'}^\dagger c_{k\chi\sigma'} - d_{j'\sigma'}^\dagger c_{k\chi\sigma'} d_{j\bar{\sigma}}^\dagger d_{j\bar{\sigma}} d_{j\sigma} \right) \\
 &= \sum_{j'k\sigma'\chi} V_{j'k} \left[d_{j\bar{\sigma}}^\dagger d_{j\bar{\sigma}} d_{j\sigma} d_{j'\sigma'}^\dagger c_{k\chi\sigma'} - d_{j'\sigma'}^\dagger \left(-d_{j\bar{\sigma}}^\dagger d_{j\bar{\sigma}} d_{j\sigma} c_{k\chi\sigma'} \right) \right] \\
 &= \sum_{j'k\sigma'\chi} V_{j'k} \left[d_{j\bar{\sigma}}^\dagger d_{j\bar{\sigma}} d_{j\sigma} d_{j'\sigma'}^\dagger c_{k\chi\sigma'} + \left(-d_{j\bar{\sigma}}^\dagger d_{j'\sigma'}^\dagger \right) d_{j\bar{\sigma}} d_{j\sigma} c_{k\chi\sigma'} \right] \\
 &= \sum_{j'k\sigma'\chi} V_{j'k} d_{j\bar{\sigma}}^\dagger \left[d_{j\bar{\sigma}} d_{j\sigma} d_{j'\sigma'}^\dagger - d_{j'\sigma'}^\dagger d_{j\bar{\sigma}} d_{j\sigma} \right] c_{k\chi\sigma'} \\
 &= \sum_{j'k\sigma'\chi} V_{j'k} d_{j\bar{\sigma}}^\dagger \left[d_{j\bar{\sigma}} \left(\delta_{jj'} \delta_{\sigma\sigma'} - d_{j'\sigma'}^\dagger d_{j\sigma} \right) - d_{j'\sigma'}^\dagger d_{j\bar{\sigma}} d_{j\sigma} \right] c_{k\chi\sigma'} \\
 &= \sum_{j'k\sigma'\chi} V_{j'k} d_{j\bar{\sigma}}^\dagger \left[d_{j\bar{\sigma}} \delta_{jj'} \delta_{\sigma\sigma'} - d_{j\bar{\sigma}} d_{j'\sigma'}^\dagger d_{j\sigma} - d_{j'\sigma'}^\dagger d_{j\bar{\sigma}} d_{j\sigma} \right] c_{k\chi\sigma'} \\
 &= \sum_{j'k\sigma'\chi} V_{j'k} d_{j\bar{\sigma}}^\dagger \left\{ d_{j\bar{\sigma}} \delta_{jj'} \delta_{\sigma\sigma'} - \left(d_{j\bar{\sigma}} d_{j'\sigma'}^\dagger + d_{j'\sigma'}^\dagger d_{j\bar{\sigma}} \right) d_{j\sigma} \right\} c_{k\chi\sigma'} \\
 &= \sum_{j'k\sigma'\chi} V_{j'k} d_{j\bar{\sigma}}^\dagger \left\{ \delta_{jj'} \delta_{\sigma\sigma'} d_{j\bar{\sigma}} - \left[d_{j\bar{\sigma}}, d_{j'\sigma'}^\dagger \right]_+ d_{j\sigma} \right\} c_{k\chi\sigma'} \\
 &= \sum_{j'k\sigma'\chi} V_{j'k} d_{j\bar{\sigma}}^\dagger \left\{ \delta_{jj'} \delta_{\sigma\sigma'} d_{j\bar{\sigma}} - \delta_{jj'} \delta_{\bar{\sigma}\sigma'} d_{j\sigma} \right\} c_{k\chi\sigma'} \\
 &= \sum_{k\chi} \sum_{j'=j} \sum_{\sigma'=\sigma} V_{jk} d_{j\bar{\sigma}}^\dagger \delta_{jj} \delta_{\sigma\sigma} d_{j\bar{\sigma}} c_{k\chi\sigma} - \sum_{k\chi} \sum_{j'=j} \sum_{\sigma'=\bar{\sigma}} V_{jk} d_{j\bar{\sigma}}^\dagger \delta_{jj} \delta_{\bar{\sigma}\bar{\sigma}} d_{j\sigma} c_{k\chi\bar{\sigma}} \\
 &= \sum_{k\chi} V_{jk} d_{j\bar{\sigma}}^\dagger d_{j\bar{\sigma}} c_{k\chi\sigma} - \sum_{k\chi} V_{jk} d_{j\bar{\sigma}}^\dagger d_{j\sigma} c_{k\chi\bar{\sigma}} \\
 &= \sum_{k\chi} V_{jk} n_{j\bar{\sigma}} c_{k\chi\sigma} + \sum_{k\chi} V_{jk} d_{j\bar{\sigma}}^\dagger c_{k\chi\bar{\sigma}} d_{j\sigma}
 \end{aligned} \tag{A.75}$$

$$\begin{aligned}
 \sum_{j' \mathbf{k} \sigma' \chi} V_{j' \mathbf{k}}^* \left[n_{j \bar{\sigma}} d_{j \sigma}, c_{\mathbf{k} \chi \sigma'}^\dagger d_{j' \sigma'} \right] &= \sum_{j' \mathbf{k} \sigma' \chi} V_{j' \mathbf{k}}^* \left[d_{j \bar{\sigma}}^\dagger d_{j \bar{\sigma}} d_{j \sigma}, c_{\mathbf{k} \chi \sigma'}^\dagger d_{j' \sigma'} \right] \\
 &= \sum_{j' \mathbf{k} \sigma' \chi} V_{j' \mathbf{k}}^* \left(d_{j \bar{\sigma}}^\dagger d_{j \bar{\sigma}} d_{j \sigma} c_{\mathbf{k} \chi \sigma'}^\dagger d_{j' \sigma'} - c_{\mathbf{k} \chi \sigma'}^\dagger d_{j' \sigma'} d_{j \bar{\sigma}}^\dagger d_{j \bar{\sigma}} d_{j \sigma} \right) \\
 &= \sum_{j' \mathbf{k} \sigma' \chi} V_{j' \mathbf{k}}^* \left[\left(-c_{\mathbf{k} \chi \sigma'}^\dagger d_{j \bar{\sigma}}^\dagger d_{j \bar{\sigma}} d_{j \sigma} \right) d_{j' \sigma'} - c_{\mathbf{k} \chi \sigma'}^\dagger d_{j' \sigma'} d_{j \bar{\sigma}}^\dagger d_{j \bar{\sigma}} d_{j \sigma} \right] \\
 &= - \sum_{j' \mathbf{k} \sigma' \chi} V_{j' \mathbf{k}}^* c_{\mathbf{k} \chi \sigma'}^\dagger \left[d_{j \bar{\sigma}}^\dagger d_{j \bar{\sigma}} d_{j \sigma} d_{j' \sigma'} + d_{j' \sigma'} d_{j \bar{\sigma}}^\dagger d_{j \bar{\sigma}} d_{j \sigma} \right] \\
 &= - \sum_{j' \mathbf{k} \sigma' \chi} V_{j' \mathbf{k}}^* c_{\mathbf{k} \chi \sigma'}^\dagger \left[d_{j \bar{\sigma}}^\dagger d_{j \bar{\sigma}} (-d_{j' \sigma'} d_{j \sigma}) + d_{j' \sigma'} d_{j \bar{\sigma}}^\dagger d_{j \bar{\sigma}} d_{j \sigma} \right] \\
 &= - \sum_{j' \mathbf{k} \sigma' \chi} V_{j' \mathbf{k}}^* c_{\mathbf{k} \chi \sigma'}^\dagger \left[-d_{j \bar{\sigma}}^\dagger (-d_{j' \sigma'} d_{j \bar{\sigma}}) d_{j \sigma} + d_{j' \sigma'} d_{j \bar{\sigma}}^\dagger d_{j \bar{\sigma}} d_{j \sigma} \right] \\
 &= - \sum_{j' \mathbf{k} \sigma' \chi} V_{j' \mathbf{k}}^* c_{\mathbf{k} \chi \sigma'}^\dagger \left(d_{j \bar{\sigma}}^\dagger d_{j' \sigma'} d_{j \bar{\sigma}} + d_{j' \sigma'} d_{j \bar{\sigma}}^\dagger d_{j \bar{\sigma}} \right) d_{j \sigma} \\
 &= - \sum_{j' \mathbf{k} \sigma' \chi} V_{j' \mathbf{k}}^* c_{\mathbf{k} \chi \sigma'}^\dagger \left(d_{j \bar{\sigma}}^\dagger d_{j' \sigma'} + d_{j' \sigma'} d_{j \bar{\sigma}}^\dagger \right) d_{j \bar{\sigma}} d_{j \sigma} \\
 &= - \sum_{j' \mathbf{k} \sigma' \chi} V_{j' \mathbf{k}}^* c_{\mathbf{k} \chi \sigma'}^\dagger \left[d_{j \bar{\sigma}}^\dagger, d_{j' \sigma'} \right]_+ d_{j \bar{\sigma}} d_{j \sigma} \\
 &= - \sum_{j' \mathbf{k} \sigma' \chi} V_{j' \mathbf{k}}^* c_{\mathbf{k} \chi \sigma'}^\dagger \delta_{j j'} \delta_{\bar{\sigma} \sigma'} d_{j \bar{\sigma}} d_{j \sigma} \\
 &= - \sum_{\mathbf{k} \chi} \sum_{j'=j} \sum_{\sigma'=\bar{\sigma}} V_{j \mathbf{k}}^* c_{\mathbf{k} \chi \bar{\sigma}}^\dagger \delta_{j j} \delta_{\bar{\sigma} \bar{\sigma}} d_{j \bar{\sigma}} d_{j \sigma} \\
 &= - \sum_{\mathbf{k} \chi} V_{j \mathbf{k}}^* c_{\mathbf{k} \chi \bar{\sigma}}^\dagger d_{j \bar{\sigma}} d_{j \sigma}
 \end{aligned} \tag{A.76}$$

Now for the term with $U_{j'}$ we first are going to calculate some properties for the particle number operator $n_{j \sigma}$

$$\begin{aligned}
 n_{j \sigma} n_{j' \sigma'} &= d_{j \sigma}^\dagger d_{j \sigma} d_{j' \sigma'}^\dagger d_{j' \sigma'} \\
 &= d_{j \sigma}^\dagger \left(\delta_{j j'} \delta_{\sigma \sigma'} - d_{j' \sigma'}^\dagger d_{j \sigma} \right) d_{j' \sigma'} \\
 &= \delta_{j j'} \delta_{\sigma \sigma'} d_{j \sigma}^\dagger d_{j' \sigma'} - d_{j \sigma}^\dagger d_{j' \sigma'}^\dagger d_{j \sigma} d_{j' \sigma'} \\
 &= \delta_{j j'} \delta_{\sigma \sigma'} d_{j \sigma}^\dagger d_{j' \sigma'} - \left(-d_{j' \sigma'}^\dagger d_{j \sigma}^\dagger \right) (-d_{j' \sigma'} d_{j \sigma}) \\
 &= \delta_{j j'} \delta_{\sigma \sigma'} d_{j \sigma}^\dagger d_{j' \sigma'} - d_{j' \sigma'}^\dagger d_{j \sigma}^\dagger d_{j' \sigma'} d_{j \sigma} \\
 &= \delta_{j j'} \delta_{\sigma \sigma'} d_{j \sigma}^\dagger d_{j' \sigma'} - d_{j' \sigma'}^\dagger \left(\delta_{j j'} \delta_{\sigma \sigma'} - d_{j' \sigma'} d_{j \sigma}^\dagger \right) d_{j \sigma} \\
 &= \delta_{j j'} \delta_{\sigma \sigma'} d_{j \sigma}^\dagger d_{j' \sigma'} - \delta_{j j'} \delta_{\sigma \sigma'} d_{j' \sigma'}^\dagger d_{j \sigma} + d_{j' \sigma'}^\dagger d_{j' \sigma'} d_{j \sigma}^\dagger d_{j \sigma} \\
 &= \delta_{j j'} \delta_{\sigma \sigma'} \left(d_{j \sigma}^\dagger d_{j' \sigma'} - d_{j' \sigma'}^\dagger d_{j \sigma} \right) + n_{j' \sigma'} n_{j \sigma}
 \end{aligned} \tag{A.77}$$

$$[n_{j \sigma}, n_{j' \sigma'}] = \delta_{j j'} \delta_{\sigma \sigma'} \left(d_{j \sigma}^\dagger d_{j' \sigma'} - d_{j' \sigma'}^\dagger d_{j \sigma} \right) \tag{A.78}$$

$$\begin{aligned}
 n_{j\sigma}d_{j'\sigma'} &= d_{j\sigma}^\dagger d_{j\sigma} d_{j'\sigma'} \\
 &= d_{j\sigma}^\dagger (-d_{j'\sigma'} d_{j\sigma}) \\
 &= -d_{j\sigma}^\dagger d_{j'\sigma'} d_{j\sigma} \\
 &= -\left(\delta_{jj'}\delta_{\sigma\sigma'} - d_{j'\sigma'} d_{j\sigma}^\dagger\right) d_{j\sigma} \\
 &= -\delta_{jj'}\delta_{\sigma\sigma'} d_{j\sigma} + d_{j'\sigma'} d_{j\sigma}^\dagger d_{j\sigma} \\
 &= d_{j'\sigma'} n_{j\sigma} - \delta_{jj'}\delta_{\sigma\sigma'} d_{j\sigma} \\
 [n_{j\sigma}, d_{j'\sigma'}] &= -\delta_{jj'}\delta_{\sigma\sigma'} d_{j\sigma} \tag{A.79}
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 n_{j\sigma}d_{j'\sigma'}^\dagger &= d_{j\sigma}^\dagger d_{j\sigma} d_{j'\sigma'}^\dagger \\
 &= d_{j\sigma}^\dagger \left(\delta_{jj'}\delta_{\sigma\sigma'} - d_{j'\sigma'}^\dagger d_{j\sigma}\right) \\
 &= \delta_{jj'}\delta_{\sigma\sigma'} d_{j\sigma}^\dagger - d_{j\sigma}^\dagger d_{j'\sigma'}^\dagger d_{j\sigma} \\
 &= \delta_{jj'}\delta_{\sigma\sigma'} d_{j\sigma}^\dagger - \left(-d_{j'\sigma'}^\dagger d_{j\sigma}^\dagger\right) d_{j\sigma} \\
 &= \delta_{jj'}\delta_{\sigma\sigma'} d_{j\sigma}^\dagger + d_{j'\sigma'}^\dagger d_{j\sigma}^\dagger d_{j\sigma} \\
 &= \delta_{jj'}\delta_{\sigma\sigma'} d_{j\sigma}^\dagger + d_{j'\sigma'}^\dagger n_{j\sigma} \tag{A.80}
 \end{aligned}$$

$$[n_{j\sigma}, d_{j'\sigma'}^\dagger] = \delta_{jj'}\delta_{\sigma\sigma'} d_{j\sigma}^\dagger \tag{A.81}$$

Continuing,

$$\begin{aligned}
 \sum_{j'} U_{j'} \left[n_{j\bar{\sigma}} d_{j\sigma}, d_{j'\uparrow}^\dagger d_{j'\uparrow} d_{j'\downarrow}^\dagger d_{j'\downarrow} \right] &= \sum_{j'} U_{j'} [n_{j\bar{\sigma}} d_{j\sigma}, n_{j'\uparrow} n_{j'\downarrow}] \\
 &= \sum_{j'} U_{j'} (\mathbf{n}_{j\bar{\sigma}} \mathbf{d}_{j\sigma} n_{j'\uparrow} n_{j'\downarrow} - n_{j'\uparrow} n_{j'\downarrow} \mathbf{n}_{j\bar{\sigma}} \mathbf{d}_{j\sigma}) \\
 &= \sum_{j'} U_{j'} \left\{ \left[-\delta_{jj} \delta_{\bar{\sigma}\bar{\sigma}} \overset{0}{d_{j\bar{\sigma}}} + d_{j\sigma} n_{j\bar{\sigma}} \right] n_{j'\uparrow} n_{j'\downarrow} - n_{j'\uparrow} n_{j'\downarrow} \left[-\delta_{jj} \delta_{\bar{\sigma}\bar{\sigma}} \overset{0}{d_{j\bar{\sigma}}} + d_{j\sigma} n_{j\bar{\sigma}} \right] \right\} \\
 &= \sum_{j'} U_{j'} \{ d_{j\sigma} \mathbf{n}_{j\bar{\sigma}} \mathbf{n}_{j'\uparrow} n_{j'\downarrow} - n_{j'\uparrow} \mathbf{n}_{j'\downarrow} \mathbf{d}_{j\sigma} n_{j\bar{\sigma}} \} \\
 &= \sum_{j'} U_{j'} \left\{ d_{j\sigma} \left[\delta_{jj'} \delta_{\bar{\sigma}\uparrow} \left(d_{j\bar{\sigma}}^\dagger d_{j'\uparrow} - d_{j'\uparrow}^\dagger d_{j\bar{\sigma}} \right) + n_{j'\uparrow} n_{j\bar{\sigma}} \right] n_{j'\downarrow} \right\} \\
 &+ \sum_{j'} U_{j'} \{ -n_{j'\uparrow} [-\delta_{jj'} \delta_{\sigma\downarrow} d_{j\downarrow} + d_{j\sigma} n_{j'\downarrow}] n_{j\bar{\sigma}} \} \\
 &= \sum_{j'} U_{j'} \left\{ \delta_{jj'} \delta_{\bar{\sigma}\uparrow} d_{j\sigma} \left(d_{j\bar{\sigma}}^\dagger d_{j'\uparrow} - d_{j'\uparrow}^\dagger d_{j\bar{\sigma}} \right) n_{j'\downarrow} + d_{j\sigma} n_{j'\uparrow} n_{j\bar{\sigma}} n_{j'\downarrow} \right\} \\
 &+ \sum_{j'} U_{j'} \{ \delta_{jj'} \delta_{\sigma\downarrow} n_{j'\uparrow} d_{j\downarrow} n_{j\bar{\sigma}} - n_{j'\uparrow} d_{j\sigma} n_{j'\downarrow} n_{j\bar{\sigma}} \} \\
 &= \sum_{j'} U_{j'} \delta_{jj'} \left\{ \delta_{\bar{\sigma}\uparrow} d_{j\sigma} \left(d_{j\bar{\sigma}}^\dagger d_{j'\uparrow} - d_{j'\uparrow}^\dagger d_{j\bar{\sigma}} \right) n_{j'\downarrow} + \delta_{\sigma\downarrow} n_{j'\uparrow} d_{j\downarrow} n_{j\bar{\sigma}} \right\} \\
 &+ \sum_{j'} U_{j'} \{ d_{j\sigma} n_{j'\uparrow} \mathbf{n}_{j\bar{\sigma}} \mathbf{n}_{j'\downarrow} - \mathbf{n}_{j'\uparrow} \mathbf{d}_{j\sigma} n_{j'\downarrow} n_{j\bar{\sigma}} \} \\
 &= \sum_{j'} U_{j'} \delta_{jj'} \left\{ \delta_{\bar{\sigma}\uparrow} d_{j\sigma} \left(d_{j\bar{\sigma}}^\dagger d_{j'\uparrow} - d_{j'\uparrow}^\dagger d_{j\bar{\sigma}} \right) n_{j'\downarrow} + \delta_{\sigma\downarrow} n_{j'\uparrow} d_{j\downarrow} n_{j\bar{\sigma}} \right\} \\
 &+ \sum_{j'} U_{j'} \left\{ d_{j\sigma} n_{j'\uparrow} \left[\delta_{jj'} \delta_{\bar{\sigma}\downarrow} \left(d_{j\bar{\sigma}}^\dagger d_{j'\downarrow} - d_{j'\downarrow}^\dagger d_{j\bar{\sigma}} \right) + n_{j'\downarrow} n_{j\bar{\sigma}} \right] \right\} \\
 &+ \sum_{j'} U_{j'} \{ -[d_{j\sigma} n_{j'\uparrow} - \delta_{jj'} \delta_{\sigma\uparrow} d_{j'\uparrow}] n_{j'\downarrow} n_{j\bar{\sigma}} \} \\
 &= \sum_{j'} U_{j'} \delta_{jj'} \left\{ \delta_{\bar{\sigma}\uparrow} d_{j\sigma} \left(d_{j\bar{\sigma}}^\dagger d_{j'\uparrow} - d_{j'\uparrow}^\dagger d_{j\bar{\sigma}} \right) n_{j'\downarrow} + \delta_{\sigma\downarrow} n_{j'\uparrow} d_{j\downarrow} n_{j\bar{\sigma}} \right\} \\
 &+ \sum_{j'} U_{j'} \left\{ \delta_{jj'} \delta_{\bar{\sigma}\downarrow} d_{j\sigma} n_{j'\uparrow} \left(d_{j\bar{\sigma}}^\dagger d_{j'\downarrow} - d_{j'\downarrow}^\dagger d_{j\bar{\sigma}} \right) + \overline{d_{j\sigma} n_{j'\uparrow} n_{j'\downarrow} n_{j\bar{\sigma}}} \right\} \\
 &+ \sum_{j'} U_{j'} \left\{ -\overline{d_{j\sigma} n_{j'\uparrow} n_{j'\downarrow} n_{j\bar{\sigma}}} + \delta_{jj'} \delta_{\sigma\uparrow} d_{j'\uparrow} n_{j'\downarrow} n_{j\bar{\sigma}} \right\} \\
 &= \sum_{j'} U_{j'} \delta_{jj'} \left\{ \delta_{\bar{\sigma}\uparrow} d_{j\sigma} \left(d_{j\bar{\sigma}}^\dagger d_{j'\uparrow} - d_{j'\uparrow}^\dagger d_{j\bar{\sigma}} \right) n_{j'\downarrow} + \delta_{\sigma\downarrow} n_{j'\uparrow} d_{j\downarrow} n_{j\bar{\sigma}} \right\} \\
 &+ \sum_{j'} U_{j'} \delta_{jj'} \left\{ \delta_{\bar{\sigma}\downarrow} d_{j\sigma} n_{j'\uparrow} \left(d_{j\bar{\sigma}}^\dagger d_{j'\downarrow} - d_{j'\downarrow}^\dagger d_{j\bar{\sigma}} \right) + \delta_{\sigma\uparrow} d_{j'\uparrow} n_{j'\downarrow} n_{j\bar{\sigma}} \right\} \\
 &= \sum_{j'=j} U_j \delta_{jj} \left\{ \delta_{\bar{\sigma}\uparrow} d_{j\sigma} \left(d_{j\bar{\sigma}}^\dagger d_{j\uparrow} - d_{j\uparrow}^\dagger d_{j\bar{\sigma}} \right) n_{j\downarrow} + \delta_{\sigma\downarrow} n_{j\uparrow} d_{j\downarrow} n_{j\bar{\sigma}} \right\} \\
 &+ \sum_{j'=j} U_j \delta_{jj} \left\{ \delta_{\bar{\sigma}\downarrow} d_{j\sigma} n_{j\uparrow} \left(d_{j\bar{\sigma}}^\dagger d_{j\downarrow} - d_{j\downarrow}^\dagger d_{j\bar{\sigma}} \right) + \delta_{\sigma\uparrow} d_{j\uparrow} n_{j\downarrow} n_{j\bar{\sigma}} \right\} \\
 &= U_j \left\{ \delta_{\bar{\sigma}\uparrow} d_{j\sigma} \left(d_{j\bar{\sigma}}^\dagger d_{j\uparrow} - d_{j\uparrow}^\dagger d_{j\bar{\sigma}} \right) n_{j\downarrow} + \delta_{\sigma\downarrow} n_{j\uparrow} d_{j\downarrow} n_{j\bar{\sigma}} \right\} \\
 &+ U_j \left\{ \delta_{\bar{\sigma}\downarrow} d_{j\sigma} n_{j\uparrow} \left(d_{j\bar{\sigma}}^\dagger d_{j\downarrow} - d_{j\downarrow}^\dagger d_{j\bar{\sigma}} \right) + \delta_{\sigma\uparrow} d_{j\uparrow} n_{j\downarrow} n_{j\bar{\sigma}} \right\}
 \end{aligned} \tag{A.82}$$

and

$$\begin{aligned}
 &= U_j \left\{ \delta_{\bar{\sigma}\uparrow} d_{j\sigma} d_{j\bar{\sigma}}^\dagger d_{j\uparrow} n_{j\downarrow} - \delta_{\bar{\sigma}\uparrow} d_{j\sigma} d_{j\uparrow}^\dagger d_{j\bar{\sigma}} n_{j\downarrow} + \delta_{\sigma\downarrow} n_{j\uparrow} d_{j\downarrow} n_{j\bar{\sigma}} \right\} \\
 &+ U_j \left\{ \delta_{\bar{\sigma}\downarrow} d_{j\sigma} n_{j\uparrow} d_{j\bar{\sigma}}^\dagger d_{j\downarrow} - \delta_{\bar{\sigma}\downarrow} d_{j\sigma} n_{j\uparrow} d_{j\downarrow}^\dagger d_{j\bar{\sigma}} + \delta_{\sigma\uparrow} d_{j\uparrow} n_{j\downarrow} n_{j\bar{\sigma}} \right\} \\
 &= U_j \left\{ \delta_{\bar{\sigma}\uparrow} d_{j\sigma} d_{j\bar{\sigma}}^\dagger d_{j\uparrow} n_{j\downarrow} - \delta_{\bar{\sigma}\uparrow} d_{j\sigma} d_{j\uparrow}^\dagger d_{j\bar{\sigma}} n_{j\downarrow} + \delta_{\sigma\downarrow} n_{j\uparrow} d_{j\downarrow} n_{j\bar{\sigma}} \right\} \\
 &+ U_j \left\{ \delta_{\bar{\sigma}\downarrow} d_{j\sigma} n_{j\uparrow} d_{j\bar{\sigma}}^\dagger d_{j\downarrow} - \delta_{\bar{\sigma}\downarrow} d_{j\sigma} n_{j\uparrow} d_{j\downarrow}^\dagger d_{j\bar{\sigma}} + \delta_{\sigma\uparrow} (-\delta_{jj} \delta_{\downarrow\downarrow} d_{j\downarrow} + n_{j\downarrow} d_{j\uparrow}) n_{j\bar{\sigma}} \right\} \\
 &= U_j \left\{ \delta_{\bar{\sigma}\uparrow} d_{j\sigma} d_{j\bar{\sigma}}^\dagger d_{j\uparrow} n_{j\downarrow} - \delta_{\bar{\sigma}\uparrow} d_{j\sigma} d_{j\uparrow}^\dagger d_{j\bar{\sigma}} n_{j\downarrow} + \delta_{\sigma\downarrow} n_{j\uparrow} d_{j\downarrow} n_{j\bar{\sigma}} \right\} \\
 &+ U_j \left\{ \delta_{\bar{\sigma}\downarrow} d_{j\sigma} n_{j\uparrow} d_{j\bar{\sigma}}^\dagger d_{j\downarrow} - \delta_{\bar{\sigma}\downarrow} d_{j\sigma} n_{j\uparrow} d_{j\downarrow}^\dagger d_{j\bar{\sigma}} + \delta_{\sigma\uparrow} n_{j\downarrow} d_{j\uparrow} n_{j\bar{\sigma}} \right\} \\
 &= U_j \left\{ \delta_{\bar{\sigma}\uparrow} d_{j\sigma} d_{j\bar{\sigma}}^\dagger d_{j\uparrow} n_{j\downarrow} - \delta_{\bar{\sigma}\uparrow} d_{j\sigma} d_{j\uparrow}^\dagger d_{j\bar{\sigma}} n_{j\downarrow} \right\} \\
 &+ U_j \left\{ \delta_{\bar{\sigma}\downarrow} d_{j\sigma} n_{j\uparrow} d_{j\bar{\sigma}}^\dagger d_{j\downarrow} - \delta_{\bar{\sigma}\downarrow} d_{j\sigma} n_{j\uparrow} d_{j\downarrow}^\dagger d_{j\bar{\sigma}} \right\} \\
 &+ U_j \left\{ (\delta_{\sigma\uparrow} n_{j\downarrow} d_{j\uparrow} + \delta_{\sigma\downarrow} n_{j\uparrow} d_{j\downarrow}) n_{j\bar{\sigma}} \right\}
 \end{aligned} \tag{A.83}$$

Let us analyze the two cases

For $\sigma = \uparrow$	For $\sigma = \downarrow$
$= U_j \left\{ \delta_{\bar{\sigma}\uparrow} d_{j\sigma} d_{j\bar{\sigma}}^\dagger d_{j\uparrow} n_{j\downarrow} - \delta_{\bar{\sigma}\uparrow} d_{j\sigma} d_{j\uparrow}^\dagger d_{j\bar{\sigma}} n_{j\downarrow} \right\}$	$= U_j \left\{ \delta_{\bar{\sigma}\uparrow} d_{j\sigma} d_{j\bar{\sigma}}^\dagger d_{j\uparrow} n_{j\downarrow} - \delta_{\bar{\sigma}\uparrow} d_{j\sigma} d_{j\uparrow}^\dagger d_{j\bar{\sigma}} n_{j\downarrow} \right\}$
$+ U_j \left\{ \delta_{\bar{\sigma}\downarrow} d_{j\sigma} n_{j\uparrow} d_{j\bar{\sigma}}^\dagger d_{j\downarrow} - \delta_{\bar{\sigma}\downarrow} d_{j\sigma} n_{j\uparrow} d_{j\downarrow}^\dagger d_{j\bar{\sigma}} \right\}$	$+ U_j \left\{ \delta_{\bar{\sigma}\downarrow} d_{j\sigma} n_{j\uparrow} d_{j\bar{\sigma}}^\dagger d_{j\downarrow} - \delta_{\bar{\sigma}\downarrow} d_{j\sigma} n_{j\uparrow} d_{j\downarrow}^\dagger d_{j\bar{\sigma}} \right\}$
$+ U_j \left\{ (\delta_{\sigma\uparrow} n_{j\downarrow} d_{j\uparrow} + \delta_{\sigma\downarrow} n_{j\uparrow} d_{j\downarrow}) n_{j\bar{\sigma}} \right\}$	$+ U_j \left\{ (\delta_{\sigma\uparrow} n_{j\downarrow} d_{j\uparrow} + \delta_{\sigma\downarrow} n_{j\uparrow} d_{j\downarrow}) n_{j\bar{\sigma}} \right\}$
$= U_j \left\{ \delta_{\bar{\sigma}\sigma} d_{j\sigma} d_{j\bar{\sigma}}^\dagger d_{j\sigma} n_{j\bar{\sigma}} - \delta_{\bar{\sigma}\sigma} d_{j\sigma} d_{j\sigma}^\dagger d_{j\bar{\sigma}} n_{j\bar{\sigma}} \right\}$	$= U_j \left\{ \delta_{\bar{\sigma}\sigma} d_{j\sigma} d_{j\bar{\sigma}}^\dagger d_{j\sigma} n_{j\bar{\sigma}} - \delta_{\bar{\sigma}\sigma} d_{j\sigma} d_{j\sigma}^\dagger d_{j\bar{\sigma}} n_{j\bar{\sigma}} \right\}$
$+ U_j \left\{ \delta_{\bar{\sigma}\bar{\sigma}} d_{j\sigma} n_{j\bar{\sigma}} d_{j\bar{\sigma}}^\dagger d_{j\bar{\sigma}} - \delta_{\bar{\sigma}\bar{\sigma}} d_{j\sigma} n_{j\bar{\sigma}} d_{j\bar{\sigma}}^\dagger d_{j\bar{\sigma}} \right\}$	$+ U_j \left\{ \delta_{\bar{\sigma}\bar{\sigma}} d_{j\sigma} n_{j\bar{\sigma}} d_{j\bar{\sigma}}^\dagger d_{j\bar{\sigma}} - \delta_{\bar{\sigma}\bar{\sigma}} d_{j\sigma} n_{j\bar{\sigma}} d_{j\bar{\sigma}}^\dagger d_{j\bar{\sigma}} \right\}$
$+ U_j \left\{ (\delta_{\sigma\sigma} n_{j\bar{\sigma}} d_{j\bar{\sigma}} + \delta_{\bar{\sigma}\bar{\sigma}} n_{j\sigma} d_{j\bar{\sigma}}) n_{j\bar{\sigma}} \right\}$	$+ U_j \left\{ (\delta_{\bar{\sigma}\bar{\sigma}} n_{j\sigma} d_{j\bar{\sigma}} + \delta_{\sigma\sigma} n_{j\bar{\sigma}} d_{j\bar{\sigma}}) n_{j\bar{\sigma}} \right\}$
$= U_j n_{j\bar{\sigma}} d_{j\sigma} n_{j\bar{\sigma}}$	$= U_j n_{j\bar{\sigma}} d_{j\sigma} n_{j\bar{\sigma}}$
$= U_j d_{j\sigma} n_{j\bar{\sigma}} n_{j\bar{\sigma}}$	$= U_j d_{j\sigma} n_{j\bar{\sigma}} n_{j\bar{\sigma}}$
$= U_j d_{j\sigma} n_{j\bar{\sigma}}$	$= U_j d_{j\sigma} n_{j\bar{\sigma}}$

Therefore, no matter what is the value of σ the result will be the same

$$\sum_{j'} U_{j'} \left[n_{j\bar{\sigma}} d_{j\sigma}, d_{j'\uparrow}^\dagger d_{j'\uparrow} d_{j'\downarrow}^\dagger d_{j'\downarrow} \right] = U_j d_{j\sigma} n_{j\bar{\sigma}} \tag{A.84}$$

Substituting them in Eq. (A.72)

$$\begin{aligned}
 i\hbar \frac{\partial}{\partial \tau} n_{j\bar{\sigma}} d_{j\sigma}(\tau) &= -t \left(n_{j\bar{\sigma}} d_{j\bar{\sigma}} - d_{j\bar{\sigma}}^\dagger d_{j\bar{\sigma}} d_{j\sigma} + d_{j\bar{\sigma}}^\dagger d_{j\bar{\sigma}} d_{j\sigma} \right) + \varepsilon_{j\sigma} n_{j\bar{\sigma}} d_{j\sigma} + \sum_{\mathbf{k}\chi} V_{j\mathbf{k}} n_{j\bar{\sigma}} c_{\mathbf{k}\chi\sigma} \\
 &+ \sum_{\mathbf{k}\chi} V_{j'\mathbf{k}} d_{j\bar{\sigma}}^\dagger c_{\mathbf{k}\chi\bar{\sigma}} d_{j\sigma} - \sum_{\mathbf{k}\chi} V_{j\mathbf{k}}^* c_{\mathbf{k}\chi\bar{\sigma}}^\dagger d_{j\bar{\sigma}} d_{j\sigma} + U_j d_{j\sigma} n_{j\bar{\sigma}} \\
 \frac{\partial}{\partial \tau} n_{j\bar{\sigma}} d_{j\sigma}(\tau) &= \frac{i}{\hbar} t n_{j\bar{\sigma}} d_{j\bar{\sigma}} - \frac{i}{\hbar} t d_{j\bar{\sigma}}^\dagger d_{j\bar{\sigma}} d_{j\sigma} + \frac{i}{\hbar} t d_{j\bar{\sigma}}^\dagger d_{j\bar{\sigma}} d_{j\sigma} - \frac{i}{\hbar} \varepsilon_{j\sigma} n_{j\bar{\sigma}} d_{j\sigma} - \frac{i}{\hbar} \sum_{\mathbf{k}\chi} V_{j\mathbf{k}} n_{j\bar{\sigma}} c_{\mathbf{k}\chi\sigma} \\
 &+ \left(-\frac{i}{\hbar} \right) \sum_{\mathbf{k}\chi} V_{j\mathbf{k}} d_{j\bar{\sigma}}^\dagger c_{\mathbf{k}\chi\bar{\sigma}} d_{j\sigma} + \frac{i}{\hbar} \sum_{\mathbf{k}\chi} V_{j\mathbf{k}}^* c_{\mathbf{k}\chi\bar{\sigma}}^\dagger d_{j\bar{\sigma}} d_{j\sigma} - \frac{i}{\hbar} U_j d_{j\sigma} n_{j\bar{\sigma}}
 \end{aligned} \tag{A.85}$$

Substituting Eq. (A.85) in Eq. (A.71)

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial}{\partial \tau} \mathcal{G}_{n_{j\bar{\sigma}} d_{j\sigma} d_{l\sigma'}}(\tau) &= -\frac{i}{\hbar} \delta(\tau) Z_e^{-1} \sum_n e^{-\beta E_n} \langle n | [n_{j\bar{\sigma}} d_{j\sigma}, d_{l\sigma'}^\dagger]_+ | n \rangle \\
 &+ \left(-\frac{i}{\hbar}\right) \theta(\tau) Z_e^{-1} \sum_n e^{-\beta E_n} \langle n | \left[\frac{\partial}{\partial \tau} n_{j\bar{\sigma}} d_{j\sigma}, d_{l\sigma'}^\dagger \right]_+ | n \rangle \\
 &= -\frac{i}{\hbar} \delta(\tau) Z_e^{-1} \sum_n e^{-\beta E_n} \langle n | [n_{j\bar{\sigma}} d_{j\sigma}, d_{l\sigma'}^\dagger]_+ | n \rangle \\
 &+ \left(-\frac{i}{\hbar}\right) \theta(\tau) Z_e^{-1} \sum_n e^{-\beta E_n} \langle n | \left[\left\{ \frac{i}{\hbar} t n_{j\bar{\sigma}} d_{j\sigma} \right\}, d_{l\sigma'}^\dagger \right]_+ | n \rangle \\
 &+ \left(-\frac{i}{\hbar}\right) \theta(\tau) Z_e^{-1} \sum_n e^{-\beta E_n} \langle n | \left[\left\{ -\frac{i}{\hbar} t d_{j\bar{\sigma}}^\dagger d_{j\sigma} d_{j\sigma} \right\}, d_{l\sigma'}^\dagger \right]_+ | n \rangle \\
 &+ \left(-\frac{i}{\hbar}\right) \theta(\tau) Z_e^{-1} \sum_n e^{-\beta E_n} \langle n | \left[\left\{ +\frac{i}{\hbar} t d_{j\bar{\sigma}}^\dagger d_{j\bar{\sigma}} d_{j\sigma} \right\}, d_{l\sigma'}^\dagger \right]_+ | n \rangle \\
 &+ \left(-\frac{i}{\hbar}\right) \theta(\tau) Z_e^{-1} \sum_n e^{-\beta E_n} \langle n | \left[\left\{ -\frac{i}{\hbar} \varepsilon_{j\sigma} n_{j\bar{\sigma}} d_{j\sigma} \right\}, d_{l\sigma'}^\dagger \right]_+ | n \rangle \\
 &+ \left(-\frac{i}{\hbar}\right) \theta(\tau) Z_e^{-1} \sum_n e^{-\beta E_n} \langle n | \left[\left\{ -\frac{i}{\hbar} \sum_{\mathbf{k}\chi} V_{j\mathbf{k}} n_{j\bar{\sigma}} c_{\mathbf{k}\chi\sigma} \right\}, d_{l\sigma'}^\dagger \right]_+ | n \rangle \\
 &+ \left(-\frac{i}{\hbar}\right) \theta(\tau) Z_e^{-1} \sum_n e^{-\beta E_n} \langle n | \left[\left\{ -\frac{i}{\hbar} \sum_{\mathbf{k}\chi} V_{j\mathbf{k}} d_{j\bar{\sigma}}^\dagger c_{\mathbf{k}\chi\bar{\sigma}} d_{j\sigma} \right\}, d_{l\sigma'}^\dagger \right]_+ | n \rangle \\
 &+ \left(-\frac{i}{\hbar}\right) \theta(\tau) Z_e^{-1} \sum_n e^{-\beta E_n} \langle n | \left[\left\{ \frac{i}{\hbar} \sum_{\mathbf{k}\chi} V_{j\mathbf{k}}^* c_{\mathbf{k}\chi\bar{\sigma}}^\dagger d_{j\bar{\sigma}} d_{j\sigma} \right\}, d_{l\sigma'}^\dagger \right]_+ | n \rangle \\
 &+ \left(-\frac{i}{\hbar}\right) \theta(\tau) Z_e^{-1} \sum_n e^{-\beta E_n} \langle n | \left[\left\{ -\frac{i}{\hbar} U_j d_{j\sigma} n_{j\bar{\sigma}} \right\}, d_{l\sigma'}^\dagger \right]_+ | n \rangle \\
 &= -\frac{i}{\hbar} \delta(\tau) Z_e^{-1} \sum_n e^{-\beta E_n} \langle n | [n_{j\bar{\sigma}} d_{j\sigma}, d_{l\sigma'}^\dagger]_+ | n \rangle \\
 &+ \frac{i}{\hbar} t \left\{ -\frac{i}{\hbar} \theta(\tau) Z_e^{-1} \sum_n e^{-\beta E_n} \langle n | [n_{j\bar{\sigma}} d_{j\sigma}, d_{l\sigma'}^\dagger]_+ | n \rangle \right\} \\
 &+ \left(-\frac{i}{\hbar}\right) t \left\{ -\frac{i}{\hbar} \theta(\tau) Z_e^{-1} \sum_n e^{-\beta E_n} \langle n | [d_{j\bar{\sigma}}^\dagger d_{j\sigma} d_{j\sigma}, d_{l\sigma'}^\dagger]_+ | n \rangle \right\} \\
 &+ \frac{i}{\hbar} t \left\{ -\frac{i}{\hbar} \theta(\tau) Z_e^{-1} \sum_n e^{-\beta E_n} \langle n | [d_{j\bar{\sigma}}^\dagger d_{j\bar{\sigma}} d_{j\sigma}, d_{l\sigma'}^\dagger]_+ | n \rangle \right\} \\
 &+ \left(-\frac{i}{\hbar}\right) \varepsilon_{j\sigma} \left\{ -\frac{i}{\hbar} \theta(\tau) Z_e^{-1} \sum_n e^{-\beta E_n} \langle n | [n_{j\bar{\sigma}} d_{j\sigma}, d_{l\sigma'}^\dagger]_+ | n \rangle \right\} \\
 &+ \left(-\frac{i}{\hbar}\right) \sum_{\mathbf{k}\chi} V_{j\mathbf{k}} \left\{ -\frac{i}{\hbar} \theta(\tau) Z_e^{-1} \sum_n e^{-\beta E_n} \langle n | [n_{j\bar{\sigma}} c_{\mathbf{k}\chi\sigma}, d_{l\sigma'}^\dagger]_+ | n \rangle \right\} \\
 &+ \left(-\frac{i}{\hbar}\right) \sum_{\mathbf{k}\chi} V_{j\mathbf{k}} \left\{ -\frac{i}{\hbar} \theta(\tau) Z_e^{-1} \sum_n e^{-\beta E_n} \langle n | [d_{j\bar{\sigma}}^\dagger c_{\mathbf{k}\chi\bar{\sigma}} d_{j\sigma}, d_{l\sigma'}^\dagger]_+ | n \rangle \right\} \\
 &+ \frac{i}{\hbar} \sum_{\mathbf{k}\chi} V_{j\mathbf{k}}^* \left\{ -\frac{i}{\hbar} \theta(\tau) Z_e^{-1} \sum_n e^{-\beta E_n} \langle n | [c_{\mathbf{k}\chi\bar{\sigma}}^\dagger d_{j\bar{\sigma}} d_{j\sigma}, d_{l\sigma'}^\dagger]_+ | n \rangle \right\} \\
 &+ \left(-\frac{i}{\hbar}\right) U_j \left\{ -\frac{i}{\hbar} \theta(\tau) Z_e^{-1} \sum_n e^{-\beta E_n} \langle n | [n_{j\bar{\sigma}} d_{j\sigma}, d_{l\sigma'}^\dagger]_+ | n \rangle \right\}
 \end{aligned} \tag{A.86}$$

Therefore,

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial}{\partial \tau} \mathcal{G}_{n_{j\bar{\sigma}} d_{j\sigma} d_{l\sigma'}}(\tau) &= -\frac{i}{\hbar} \delta(\tau) Z_e^{-1} \sum_n e^{-\beta E_n} \langle n | \left[n_{j\bar{\sigma}}(\tau) d_{j\sigma}(\tau), d_{l\sigma'}^\dagger(0) \right]_+ | n \rangle \\
 &+ \frac{i}{\hbar} t \mathcal{G}_{n_{j\bar{\sigma}} d_{j\sigma} d_{l\sigma'}}(\tau) - \frac{i}{\hbar} t \mathcal{G}_{d_{j\bar{\sigma}}^\dagger d_{j\sigma} d_{j\sigma} d_{l\sigma'}}(\tau) + \frac{i}{\hbar} t \mathcal{G}_{d_{j\bar{\sigma}}^\dagger d_{j\bar{\sigma}} d_{j\sigma} d_{l\sigma'}}(\tau) - \frac{i}{\hbar} \varepsilon_{j\sigma} \mathcal{G}_{n_{j\bar{\sigma}} d_{j\sigma} d_{l\sigma'}}(\tau) \\
 &+ \left(-\frac{i}{\hbar} \right) \sum_{\mathbf{k}\chi} V_{j\mathbf{k}} \mathcal{G}_{n_{j\bar{\sigma}} c_{\mathbf{k}\chi\sigma} d_{l\sigma'}}(\tau) - \frac{i}{\hbar} \sum_{\mathbf{k}\chi} V_{j\mathbf{k}} \mathcal{G}_{d_{j\bar{\sigma}}^\dagger c_{\mathbf{k}\chi\bar{\sigma}} d_{j\sigma} d_{l\sigma'}}(\tau) \\
 &+ \frac{i}{\hbar} \sum_{\mathbf{k}\chi} V_{j\mathbf{k}}^* \mathcal{G}_{c_{\mathbf{k}\chi\bar{\sigma}}^\dagger d_{j\bar{\sigma}} d_{j\sigma} d_{l\sigma'}}(\tau) - \frac{i}{\hbar} U_j \mathcal{G}_{d_{j\sigma} n_{j\bar{\sigma}} d_{l\sigma'}}(\tau)
 \end{aligned} \tag{A.87}$$

Integrating and multiplying both sides of Eq. (A.87) by $e^{\frac{i}{\hbar}(\varepsilon+i\eta)t}$,

$$\begin{aligned}
 \int_{-\infty}^{+\infty} dt \frac{\partial}{\partial \tau} \mathcal{G}_{n_{j\bar{\sigma}} d_{j\sigma} d_{l\sigma'}}(\tau) \cdot e^{\frac{i}{\hbar}(\varepsilon+i\eta)t} &= \int_{-\infty}^{+\infty} dt \left\{ -\frac{i}{\hbar} \delta(\tau) Z_e^{-1} \sum_n e^{-\beta E_n} \langle n | \left[n_{j\bar{\sigma}}(\tau) d_{j\sigma}(\tau), d_{l\sigma'}^\dagger(0) \right]_+ | n \rangle \right. \\
 &+ \frac{i}{\hbar} t \mathcal{G}_{n_{j\bar{\sigma}} d_{j\sigma} d_{l\sigma'}}(\tau) - \frac{i}{\hbar} t \mathcal{G}_{d_{j\bar{\sigma}}^\dagger d_{j\sigma} d_{j\sigma} d_{l\sigma'}}(\tau) + \frac{i}{\hbar} t \mathcal{G}_{d_{j\bar{\sigma}}^\dagger d_{j\bar{\sigma}} d_{j\sigma} d_{l\sigma'}}(\tau) \\
 &+ \left(-\frac{i}{\hbar} \right) \varepsilon_{j\sigma} \mathcal{G}_{n_{j\bar{\sigma}} d_{j\sigma} d_{l\sigma'}}(\tau) - \frac{i}{\hbar} \sum_{\mathbf{k}\chi} V_{j\mathbf{k}} \mathcal{G}_{n_{j\bar{\sigma}} c_{\mathbf{k}\chi\sigma} d_{l\sigma'}}(\tau) - \frac{i}{\hbar} \sum_{\mathbf{k}\chi} V_{j\mathbf{k}} \mathcal{G}_{d_{j\bar{\sigma}}^\dagger c_{\mathbf{k}\chi\bar{\sigma}} d_{j\sigma} d_{l\sigma'}}(\tau) \\
 &+ \left. \frac{i}{\hbar} \sum_{\mathbf{k}\chi} V_{j\mathbf{k}}^* \mathcal{G}_{c_{\mathbf{k}\chi\bar{\sigma}}^\dagger d_{j\bar{\sigma}} d_{j\sigma} d_{l\sigma'}}(\tau) - \frac{i}{\hbar} U_j \mathcal{G}_{n_{j\bar{\sigma}} d_{j\sigma} d_{l\sigma'}}(\tau) \right\} \cdot e^{\frac{i}{\hbar}(\varepsilon+i\eta)t} \\
 &= -\frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} dt \left\{ \delta(\tau) Z_e^{-1} \sum_n e^{-\beta E_n} \langle n | \left[n_{j\bar{\sigma}}(\tau) d_{j\sigma}(\tau), d_{l\sigma'}^\dagger(0) \right]_+ | n \rangle \right\} \cdot e^{\frac{i}{\hbar}(\varepsilon+i\eta)t} \\
 &+ \frac{i}{\hbar} t \tilde{\mathcal{G}}_{n_{j\bar{\sigma}} d_{j\sigma} d_{l\sigma'}}(\varepsilon) - \frac{i}{\hbar} t \tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\bar{\sigma}}^\dagger d_{j\sigma} d_{j\sigma} d_{l\sigma'}}(\varepsilon) + \frac{i}{\hbar} t \tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\bar{\sigma}}^\dagger d_{j\bar{\sigma}} d_{j\sigma} d_{l\sigma'}}(\varepsilon) \\
 &+ \left(-\frac{i}{\hbar} \right) \varepsilon_{j\sigma} \tilde{\mathcal{G}}_{n_{j\bar{\sigma}} d_{j\sigma} d_{l\sigma'}}(\varepsilon) - \frac{i}{\hbar} \sum_{\mathbf{k}\chi} V_{j\mathbf{k}} \tilde{\mathcal{G}}_{n_{j\bar{\sigma}} c_{\mathbf{k}\chi\sigma} d_{l\sigma'}}(\varepsilon) - \frac{i}{\hbar} \sum_{\mathbf{k}\chi} V_{j\mathbf{k}} \tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\bar{\sigma}}^\dagger c_{\mathbf{k}\chi\bar{\sigma}} d_{j\sigma} d_{l\sigma'}}(\varepsilon) \\
 &+ \frac{i}{\hbar} \sum_{\mathbf{k}\chi} V_{j\mathbf{k}}^* \tilde{\mathcal{G}}_{c_{\mathbf{k}\chi\bar{\sigma}}^\dagger d_{j\bar{\sigma}} d_{j\sigma} d_{l\sigma'}}(\varepsilon) - \frac{i}{\hbar} U_j \tilde{\mathcal{G}}_{n_{j\bar{\sigma}} d_{j\sigma} d_{l\sigma'}}(\varepsilon)
 \end{aligned} \tag{A.88}$$

Now,

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dt \frac{\partial}{\partial \tau} \mathcal{G}_{n_{j\bar{\sigma}} d_{j\sigma} d_{l\sigma'}}(\tau) \cdot e^{\frac{i}{\hbar}(\varepsilon+i\eta)t} = -\frac{i}{\hbar} (\varepsilon + i\eta) \tilde{\mathcal{G}}_{n_{j\bar{\sigma}} d_{j\sigma} d_{l\sigma'}}(\varepsilon) \tag{A.89}$$

$$\begin{aligned}
 \int_{-\infty}^{+\infty} dt \left\{ \delta(\tau) Z_e^{-1} \sum_n \dots \right\} \cdot e^{\frac{i}{\hbar}(\varepsilon+i\eta)t} &= \langle n | \left[n_{j\bar{\sigma}}(0) d_{j\sigma}(0), d_{l\sigma'}^\dagger(0) \right]_+ | n \rangle \\
 &= \langle n | \left[d_{j\sigma} n_{j\bar{\sigma}}, d_{l\sigma'}^\dagger \right]_+ | n \rangle \\
 &= \langle n | \left\{ d_{j\sigma} n_{j\bar{\sigma}} d_{l\sigma'}^\dagger + d_{l\sigma'}^\dagger d_{j\sigma} n_{j\bar{\sigma}} \right\} | n \rangle \\
 &= \langle n | \left\{ d_{j\sigma} \left(\delta_{jl} \delta_{\bar{\sigma}\sigma'} d_{j\sigma}^\dagger + d_{l\sigma'}^\dagger n_{j\bar{\sigma}} \right) + \left(\delta_{jl} \delta_{\sigma\sigma'} - d_{j\sigma} d_{l\sigma'}^\dagger \right) n_{j\bar{\sigma}} \right\} | n \rangle \\
 &= \langle n | \left\{ \delta_{jl} \delta_{\bar{\sigma}\sigma'} d_{j\sigma} d_{j\sigma}^\dagger + \delta_{jl} \delta_{\sigma\sigma'} n_{j\bar{\sigma}} \right\} | n \rangle \\
 &+ \langle n | \left\{ \cancel{d_{j\sigma} d_{l\sigma'}^\dagger n_{j\bar{\sigma}}} - \cancel{d_{j\sigma} d_{l\sigma'}^\dagger n_{j\bar{\sigma}}} \right\} | n \rangle \\
 &= \langle n | \left\{ \delta_{jl} \delta_{\bar{\sigma}\sigma'} d_{j\sigma} d_{j\sigma}^\dagger + \delta_{jl} \delta_{\sigma\sigma'} n_{j\bar{\sigma}} \right\} | n \rangle \\
 &= \langle n | \delta_{jl} \delta_{\bar{\sigma}\sigma'} d_{j\sigma} d_{j\sigma}^\dagger | n \rangle + \langle n | \delta_{jl} \delta_{\sigma\sigma'} n_{j\bar{\sigma}} | n \rangle \\
 &= \delta_{jl} \delta_{\bar{\sigma}\sigma'} \langle n | d_{j\sigma} d_{j\sigma}^\dagger | n \rangle + \delta_{jl} \delta_{\sigma\sigma'} \langle n | n_{j\bar{\sigma}} | n \rangle \\
 &= \delta_{jl} \delta_{\bar{\sigma}\sigma'} \langle d_{j\sigma} d_{j\sigma}^\dagger \rangle + \delta_{jl} \delta_{\sigma\sigma'} \langle n_{j\bar{\sigma}} \rangle
 \end{aligned} \tag{A.90}$$

Therefore, substituting in Eq. (A.88)

$$\begin{aligned}
 -\frac{i}{\hbar} (\varepsilon + i\eta) \tilde{\mathcal{G}}_{n_{j\bar{\sigma}} d_{j\sigma} d_{l\sigma'}} (\varepsilon) &= \delta_{jl} \delta_{\bar{\sigma}\sigma'} \langle d_{j\sigma} d_{j\sigma}^\dagger \rangle + \delta_{jl} \delta_{\sigma\sigma'} \langle n_{j\bar{\sigma}} \rangle - \frac{i}{\hbar} t \tilde{\mathcal{G}}_{n_{j\bar{\sigma}} d_{j\sigma} d_{l\sigma'}} (\varepsilon) + \frac{i}{\hbar} t \tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\bar{\sigma}}^\dagger d_{j\bar{\sigma}} d_{j\sigma} d_{l\sigma'}} (\varepsilon) \\
 &+ \frac{i}{\hbar} t \tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\bar{\sigma}}^\dagger d_{j\bar{\sigma}} d_{j\sigma} d_{l\sigma'}} (\varepsilon) - \frac{i}{\hbar} \varepsilon_{j\sigma} \tilde{\mathcal{G}}_{n_{j\bar{\sigma}} d_{j\sigma} d_{l\sigma'}} (\varepsilon) + \frac{i}{\hbar} \sum_{\mathbf{k}\chi} V_{j\mathbf{k}} \tilde{\mathcal{G}}_{n_{j\bar{\sigma}} c_{\mathbf{k}\chi\sigma} d_{l\sigma'}} (\varepsilon) \\
 &+ \left(-\frac{i}{\hbar} \right) \sum_{\mathbf{k}\chi} V_{j\mathbf{k}} \tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\bar{\sigma}}^\dagger c_{\mathbf{k}\chi\bar{\sigma}} d_{j\sigma} d_{l\sigma'}} (\varepsilon) + \frac{i}{\hbar} \sum_{\mathbf{k}\chi} V_{j\mathbf{k}}^* \tilde{\mathcal{G}}_{c_{\mathbf{k}\chi\bar{\sigma}}^\dagger d_{j\bar{\sigma}} d_{j\sigma} d_{l\sigma'}} (\varepsilon) \\
 &+ \left(-\frac{i}{\hbar} \right) U_j \tilde{\mathcal{G}}_{n_{j\bar{\sigma}} d_{j\sigma} d_{l\sigma'}} (\varepsilon) \\
 (\varepsilon + i\eta) \tilde{\mathcal{G}}_{n_{j\bar{\sigma}} d_{j\sigma} d_{l\sigma'}} (\varepsilon) &= \delta_{jl} \delta_{\bar{\sigma}\sigma'} \langle d_{j\sigma} d_{j\sigma}^\dagger \rangle + \delta_{jl} \delta_{\sigma\sigma'} \langle n_{j\bar{\sigma}} \rangle - t \tilde{\mathcal{G}}_{n_{j\bar{\sigma}} d_{j\sigma} d_{l\sigma'}} (\varepsilon) + t \tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\bar{\sigma}}^\dagger d_{j\bar{\sigma}} d_{j\sigma} d_{l\sigma'}} (\varepsilon) \\
 &- t \tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\bar{\sigma}}^\dagger d_{j\bar{\sigma}} d_{j\sigma} d_{l\sigma'}} (\varepsilon) + \varepsilon_{j\sigma} \tilde{\mathcal{G}}_{n_{j\bar{\sigma}} d_{j\sigma} d_{l\sigma'}} (\varepsilon) + \sum_{\mathbf{k}\chi} V_{j\mathbf{k}} \tilde{\mathcal{G}}_{n_{j\bar{\sigma}} c_{\mathbf{k}\chi\sigma} d_{l\sigma'}} (\varepsilon) \\
 &+ \sum_{\mathbf{k}\chi} V_{j\mathbf{k}} \tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\bar{\sigma}}^\dagger c_{\mathbf{k}\chi\bar{\sigma}} d_{j\sigma} d_{l\sigma'}} (\varepsilon) - \sum_{\mathbf{k}\chi} V_{j\mathbf{k}}^* \tilde{\mathcal{G}}_{c_{\mathbf{k}\chi\bar{\sigma}}^\dagger d_{j\bar{\sigma}} d_{j\sigma} d_{l\sigma'}} (\varepsilon) + U_j \tilde{\mathcal{G}}_{n_{j\bar{\sigma}} d_{j\sigma} d_{l\sigma'}} (\varepsilon) \\
 (\varepsilon + i\eta - \varepsilon_{j\sigma} - U_j) \tilde{\mathcal{G}}_{n_{j\bar{\sigma}} d_{j\sigma} d_{l\sigma'}} (\varepsilon) &= \delta_{jl} \delta_{\bar{\sigma}\sigma'} \langle d_{j\sigma} d_{j\sigma}^\dagger \rangle + \delta_{jl} \delta_{\sigma\sigma'} \langle n_{j\bar{\sigma}} \rangle - t \tilde{\mathcal{G}}_{n_{j\bar{\sigma}} d_{j\sigma} d_{l\sigma'}} (\varepsilon) \\
 &+ t \tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\bar{\sigma}}^\dagger d_{j\bar{\sigma}} d_{j\sigma} d_{l\sigma'}} (\varepsilon) - t \tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\bar{\sigma}}^\dagger d_{j\bar{\sigma}} d_{j\sigma} d_{l\sigma'}} (\varepsilon) + \sum_{\mathbf{k}\chi} V_{j\mathbf{k}} \tilde{\mathcal{G}}_{n_{j\bar{\sigma}} c_{\mathbf{k}\chi\sigma} d_{l\sigma'}} (\varepsilon) \\
 &+ \sum_{\mathbf{k}\chi} V_{j\mathbf{k}} \tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\bar{\sigma}}^\dagger c_{\mathbf{k}\chi\bar{\sigma}} d_{j\sigma} d_{l\sigma'}} (\varepsilon) - \sum_{\mathbf{k}\chi} V_{j\mathbf{k}}^* \tilde{\mathcal{G}}_{c_{\mathbf{k}\chi\bar{\sigma}}^\dagger d_{j\bar{\sigma}} d_{j\sigma} d_{l\sigma'}} (\varepsilon)
 \end{aligned} \tag{A.91}$$

Here, we can use the Hubbard I approximation, which consist in doing

$$\tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\bar{\sigma}}^\dagger d_{j\bar{\sigma}} d_{j\sigma} d_{l\sigma'}} (\varepsilon) = \left\langle d_{j\bar{\sigma}}^\dagger d_{j\bar{\sigma}} \right\rangle \tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\sigma} d_{l\sigma'}} (\varepsilon) \tag{A.92}$$

$$\tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\bar{\sigma}}^\dagger d_{j\bar{\sigma}} d_{j\sigma} d_{l\sigma'}} (\varepsilon) = \left\langle d_{j\bar{\sigma}}^\dagger d_{j\bar{\sigma}} \right\rangle \tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\sigma} d_{l\sigma'}} (\varepsilon) \tag{A.93}$$

$$V_{j\mathbf{k}} \tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\bar{\sigma}}^\dagger c_{\mathbf{k}\chi\bar{\sigma}} d_{j\sigma} d_{l\sigma'}} (\varepsilon) = \left\langle V_{j\mathbf{k}} d_{j\bar{\sigma}}^\dagger c_{\mathbf{k}\chi\bar{\sigma}} \right\rangle \tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\sigma} d_{l\sigma'}} (\varepsilon) \tag{A.94}$$

$$V_{j\mathbf{k}}^* \tilde{\mathcal{G}}_{c_{\mathbf{k}\chi\bar{\sigma}}^\dagger d_{j\bar{\sigma}} d_{j\sigma} d_{l\sigma'}} (\varepsilon) = \left\langle V_{j\mathbf{k}}^* c_{\mathbf{k}\chi\bar{\sigma}}^\dagger d_{j\bar{\sigma}} \right\rangle \tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\sigma} d_{l\sigma'}} (\varepsilon) \tag{A.95}$$

According to [A4] (Eq. 81), $\langle d_{j\bar{\sigma}}^\dagger V_{j\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}\chi\bar{\sigma}} \rangle \tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\sigma} d_{l\sigma'}} (\varepsilon) = \langle d_{j\bar{\sigma}}^\dagger V_{j\mathbf{k}}^* c_{\mathbf{k}\chi\bar{\sigma}}^\dagger \rangle \tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\sigma} d_{l\sigma'}} (\varepsilon)$, and also $\langle d_{j\bar{\sigma}}^\dagger d_{j\bar{\sigma}} \rangle \tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\sigma} d_{l\sigma'}} (\varepsilon) = \langle d_{j\bar{\sigma}}^\dagger d_{j\bar{\sigma}} \rangle \tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\sigma} d_{l\sigma'}} (\varepsilon)$.

Thus, substituting

$$\begin{aligned}
 (\varepsilon + i\eta - \varepsilon_{j\sigma} - U_j) \tilde{\mathcal{G}}_{n_{j\bar{\sigma}} d_{j\sigma} d_{l\sigma'}}(\varepsilon) &= \delta_{jl} \delta_{\bar{\sigma}\sigma'} \langle d_{j\sigma} d_{j\sigma}^\dagger \rangle + \delta_{jl} \delta_{\sigma\sigma'} \langle n_{j\bar{\sigma}} \rangle - t \tilde{\mathcal{G}}_{n_{j\bar{\sigma}} d_{j\sigma} d_{l\sigma'}}(\varepsilon) \\
 &+ t \langle d_{j\bar{\sigma}}^\dagger d_{j\bar{\sigma}} \rangle \tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\sigma} d_{l\sigma}}(\varepsilon) - t \langle d_{j\bar{\sigma}}^\dagger d_{j\bar{\sigma}} \rangle \tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\sigma} d_{l\sigma}}(\varepsilon) + \sum_{\mathbf{k}\chi} V_{j\mathbf{k}} \tilde{\mathcal{G}}_{n_{j\bar{\sigma}} c_{\mathbf{k}\chi\sigma} d_{l\sigma'}}(\varepsilon) \\
 &+ \sum_{\mathbf{k}\chi} \langle d_{j\bar{\sigma}}^\dagger V_{j\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}\chi\sigma} \rangle \tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\sigma} d_{l\sigma}}(\varepsilon) - \sum_{\mathbf{k}\chi} \langle V_{j\mathbf{k}}^* c_{\mathbf{k}\chi\sigma}^\dagger d_{j\bar{\sigma}} \rangle \tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\sigma} d_{l\sigma}}(\varepsilon) \\
 &= \langle n | \delta_{jl} \delta_{\bar{\sigma}\sigma'} d_{j\sigma} d_{j\sigma}^\dagger | n \rangle + \langle n | \delta_{jl} \delta_{\sigma\sigma'} n_{j\bar{\sigma}} | n \rangle \\
 &+ t \tilde{\mathcal{G}}_{n_{j\bar{\sigma}} d_{j\sigma} d_{l\sigma'}}(\varepsilon) + \sum_{\mathbf{k}\chi} V_{j\mathbf{k}} \tilde{\mathcal{G}}_{n_{j\bar{\sigma}} c_{\mathbf{k}\chi\sigma} d_{l\sigma'}}(\varepsilon)
 \end{aligned} \tag{A.96}$$

Therefore,

$$\tilde{\mathcal{G}}_{n_{j\bar{\sigma}} d_{j\sigma} d_{l\sigma'}}(\varepsilon) = \frac{\delta_{\bar{\sigma}\sigma'} \langle d_{j\sigma} d_{j\sigma}^\dagger \rangle + \delta_{\sigma\sigma'} \langle n_{j\bar{\sigma}} \rangle}{\varepsilon + i\eta - \varepsilon_{j\sigma} - U_j} \delta_{jl} - \frac{t \tilde{\mathcal{G}}_{n_{j\bar{\sigma}} d_{j\sigma} d_{l\sigma'}}(\varepsilon)}{\varepsilon + i\eta - \varepsilon_{j\sigma} - U_j} + \frac{\sum_{\mathbf{k}\chi} V_{j\mathbf{k}} \tilde{\mathcal{G}}_{n_{j\bar{\sigma}} c_{\mathbf{k}\chi\sigma} d_{l\sigma'}}(\varepsilon)}{\varepsilon + i\eta - \varepsilon_{j\sigma} - U_j} \tag{A.97}$$

As we said before, and as we can see in Eq. (A.68) and Eq. (A.69), we just need GF with the same spin, in other words $\sigma = \sigma'$.

Thus

$$\tilde{\mathcal{G}}_{n_{j\bar{\sigma}} d_{j\sigma} d_{l\sigma}}(\varepsilon) = \frac{\langle n_{j\bar{\sigma}} \rangle \delta_{jl}}{\varepsilon + i\eta - \varepsilon_{j\sigma} - U_j} - \frac{t \tilde{\mathcal{G}}_{n_{j\bar{\sigma}} d_{j\sigma} d_{l\sigma}}(\varepsilon)}{\varepsilon + i\eta - \varepsilon_{j\sigma} - U_j} + \frac{\sum_{\mathbf{k}\chi} V_{j\mathbf{k}} \tilde{\mathcal{G}}_{n_{j\bar{\sigma}} c_{\mathbf{k}\chi\sigma} d_{l\sigma}}(\varepsilon)}{\varepsilon + i\eta - \varepsilon_{j\sigma} - U_j} \tag{A.98}$$

A.4.3 Calculation of $\tilde{\mathcal{G}}_{n_{j\bar{\sigma}} c_{\mathbf{k}\chi\sigma} d_{l\sigma'}}(\varepsilon)$

According to Eq. (A.86)

$$\mathcal{G}_{n_{j\bar{\sigma}} c_{\mathbf{k}\chi\sigma} d_{l\sigma'}}(\tau) = -\frac{i}{\hbar} \theta(\tau) Z_e^{-1} \sum_n e^{-\beta E_n} \langle n | \left[n_{j\bar{\sigma}}(\tau) c_{\mathbf{k}\chi\sigma}(\tau), d_{l\sigma'}^\dagger(0) \right]_+ | n \rangle \tag{A.99}$$

Deriving the Eq. (A.99)

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial}{\partial \tau} \mathcal{G}_{n_{j\bar{\sigma}} c_{\mathbf{k}\chi\sigma} d_{l\sigma'}}(\tau) &= \frac{\partial}{\partial \tau} \left\{ -\frac{i}{\hbar} \theta(\tau) Z_e^{-1} \sum_n e^{-\beta E_n} \langle n | \left[n_{j\bar{\sigma}}(\tau) c_{\mathbf{k}\chi\sigma}(\tau), d_{l\sigma'}^\dagger(0) \right]_+ | n \rangle \right\} \\
 &= -\frac{i}{\hbar} \delta(\tau) Z_e^{-1} \sum_n e^{-\beta E_n} \langle n | \left[n_{j\bar{\sigma}}(\tau) c_{\mathbf{k}\chi\sigma}(\tau), d_{l\sigma'}^\dagger(0) \right]_+ | n \rangle \\
 &+ \left(-\frac{i}{\hbar} \right) \theta(\tau) Z_e^{-1} \sum_n e^{-\beta E_n} \langle n | \left[\frac{\partial}{\partial \tau} \{ n_{j\bar{\sigma}}(\tau) c_{\mathbf{k}\chi\sigma}(\tau) \}, d_{l\sigma'}^\dagger(0) \right]_+ | n \rangle
 \end{aligned} \tag{A.100}$$

Using the Heisenberg equation to calculate $\frac{\partial}{\partial \tau} n_{j\bar{\sigma}}(\tau) c_{\mathbf{k}\chi\sigma}(\tau)$

$$\begin{aligned}
 i\hbar \frac{\partial}{\partial \tau} n_{j\bar{\sigma}}(\tau) c_{\mathbf{k}\chi\sigma}(\tau) &= [n_{j\bar{\sigma}} c_{\mathbf{k}\chi\sigma}, \mathcal{H}_{Wncs}] \\
 &= [n_{j\bar{\sigma}} c_{\mathbf{k}\chi\sigma}, \mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_{tun} + \mathcal{H}_{imp} + \mathcal{H}_{hyb} + \mathcal{H}_U] \\
 &= [n_{j\bar{\sigma}} c_{\mathbf{k}\chi\sigma}, \mathcal{H}_0] + [n_{j\bar{\sigma}} c_{\mathbf{k}\chi\sigma}, \mathcal{H}_{tun}] + [n_{j\bar{\sigma}} c_{\mathbf{k}\chi\sigma}, \mathcal{H}_{imp}] + [n_{j\bar{\sigma}} c_{\mathbf{k}\chi\sigma}, \mathcal{H}_{hyb}] + [n_{j\bar{\sigma}} c_{\mathbf{k}\chi\sigma}, \mathcal{H}_U] \\
 &= \left[n_{j\bar{\sigma}} c_{\mathbf{k}\chi\sigma}, \left\{ \sum_{\mathbf{q}\chi'} \chi' q_{z+}^\chi c_{\mathbf{q}\chi'\uparrow}^\dagger c_{\mathbf{q}\chi'\uparrow} + \sum_{\mathbf{q}\chi'} \chi' q_{z-}^\chi c_{\mathbf{q}\chi'\uparrow}^\dagger c_{\mathbf{q}\chi'\downarrow} + \sum_{\mathbf{q}\chi'} \chi' q_{z+}^\chi c_{\mathbf{q}\chi'\downarrow}^\dagger c_{\mathbf{q}\chi'\uparrow} - \sum_{\mathbf{q}\chi'} \chi' q_{z-}^\chi c_{\mathbf{q}\chi'\downarrow}^\dagger c_{\mathbf{q}\chi'\downarrow} \right\} \right] \\
 &+ \left[n_{j\bar{\sigma}} c_{\mathbf{k}\chi\sigma}, \left(- \sum_{j'\sigma'} t d_{j'\sigma'}^\dagger d_{j'\sigma'} \right) \right] + \left[n_{j\bar{\sigma}} c_{\mathbf{k}\chi\sigma}, \sum_{j'\sigma'} \varepsilon_{j'\sigma'} d_{j'\sigma'}^\dagger d_{j'\sigma'} \right] \\
 &+ \left[n_{j\bar{\sigma}} c_{\mathbf{k}\chi\sigma}, \sum_{j'\mathbf{q}\sigma'\chi'} \left(V_{j'\mathbf{q}} d_{j'\sigma'}^\dagger c_{\mathbf{q}\chi'\sigma'} + V_{j'\mathbf{k}}^* c_{\mathbf{q}\chi'\sigma'}^\dagger d_{j'\sigma'} \right) \right] + \left[n_{j\bar{\sigma}} c_{\mathbf{k}\chi\sigma}, \sum_{j'} U_j d_{j'\uparrow}^\dagger d_{j'\uparrow} d_{j'\downarrow}^\dagger d_{j'\downarrow} \right] \\
 &= \sum_{\mathbf{q}\chi'} \chi' q_{z+}^\chi \left[c_{\mathbf{k}\chi\sigma}, c_{\mathbf{q}\chi'\uparrow}^\dagger c_{\mathbf{q}\chi'\uparrow} \right] + \sum_{\mathbf{q}\chi'} \chi' q_{z-}^\chi \left[c_{\mathbf{k}\chi\sigma}, c_{\mathbf{q}\chi'\uparrow}^\dagger c_{\mathbf{q}\chi'\downarrow} \right] + \sum_{\mathbf{q}\chi'} \chi' q_{z+}^\chi \left[c_{\mathbf{k}\chi\sigma}, c_{\mathbf{q}\chi'\downarrow}^\dagger c_{\mathbf{q}\chi'\uparrow} \right] \\
 &+ (-1) \sum_{\mathbf{q}\chi'} \chi' q_{z-}^\chi \left[c_{\mathbf{k}\chi\sigma}, c_{\mathbf{q}\chi'\downarrow}^\dagger c_{\mathbf{q}\chi'\downarrow} \right] - \sum_{j'\sigma'} t \left[n_{j\bar{\sigma}} c_{\mathbf{k}\chi\sigma}, d_{j'\sigma'}^\dagger d_{j'\sigma'} \right] + \sum_{j'\sigma'} \varepsilon_{j'\sigma'} \left[n_{j\bar{\sigma}} c_{\mathbf{k}\chi\sigma}, d_{j'\sigma'}^\dagger d_{j'\sigma'} \right] \\
 &+ \sum_{j'\mathbf{q}\sigma'\chi'} V_{j'\mathbf{q}} \left[n_{j\bar{\sigma}} c_{\mathbf{k}\chi\sigma}, d_{j'\sigma'}^\dagger c_{\mathbf{q}\chi'\sigma'} \right] + \sum_{j'\mathbf{q}\sigma'\chi'} V_{j'\mathbf{q}}^* \left[n_{j\bar{\sigma}} c_{\mathbf{k}\chi\sigma}, c_{\mathbf{q}\chi'\sigma'}^\dagger d_{j'\sigma'} \right] \\
 &+ \sum_{j'} U_j \left[n_{j\bar{\sigma}} c_{\mathbf{k}\chi\sigma}, d_{j'\uparrow}^\dagger d_{j'\uparrow} d_{j'\downarrow}^\dagger d_{j'\downarrow} \right] \tag{A.101}
 \end{aligned}$$

Now, we are going to solve term by term separately using Eq. (A.78-A.81) when it is convenient. Let us start by the terms come from \mathcal{H}_0 .

Observe that the first four terms in Eq. (A.101) can be rewrite in a general way as $\sum_{\mathbf{q}\chi'} \gamma_{\mathbf{q}\chi'} \left[n_{j\bar{\sigma}} c_{\mathbf{k}\chi\sigma}, c_{\mathbf{q}\chi'\sigma_A}^\dagger c_{\mathbf{q}\chi'\sigma_B} \right]$, which ($\gamma_{\mathbf{q}\chi'} = \chi' q_{z+}^\chi, \chi' q_{z-}^\chi, \chi' q_{z+}^\chi$ or $\chi' q_{z-}^\chi$), ($\sigma_A = \uparrow$ or \downarrow) and ($\sigma_B = \uparrow$ or \downarrow). So to make it easy to solve the Heisenberg equation above, we are going to solve a general term $\sum_{\mathbf{q}\chi'} \gamma_{\mathbf{q}\chi'} \left[n_{j\bar{\sigma}} c_{\mathbf{k}\chi\sigma}, c_{\mathbf{q}\chi'\sigma_A}^\dagger c_{\mathbf{q}\chi'\sigma_B} \right]$

$$\begin{aligned}
 \sum_{\mathbf{q}\chi'} \gamma_{\mathbf{q}\chi'} \left[n_{j\bar{\sigma}} c_{\mathbf{k}\chi\sigma}, c_{\mathbf{q}\chi'\sigma_A}^\dagger c_{\mathbf{q}\chi'\sigma_B} \right] &= \sum_{\mathbf{q}\chi'} \gamma_{\mathbf{q}\chi'} \left(n_{j\bar{\sigma}} c_{\mathbf{k}\chi\sigma} c_{\mathbf{q}\chi'\sigma_A}^\dagger c_{\mathbf{q}\chi'\sigma_B} - c_{\mathbf{q}\chi'\sigma_A}^\dagger c_{\mathbf{q}\chi'\sigma_B} n_{j\bar{\sigma}} c_{\mathbf{k}\chi\sigma} \right) \\
 &= \sum_{\mathbf{q}\chi'} \gamma_{\mathbf{q}\chi'} \left(n_{j\bar{\sigma}} c_{\mathbf{k}\chi\sigma} c_{\mathbf{q}\chi'\sigma_A}^\dagger c_{\mathbf{q}\chi'\sigma_B} - n_{j\bar{\sigma}} c_{\mathbf{q}\chi'\sigma_A}^\dagger c_{\mathbf{q}\chi'\sigma_B} c_{\mathbf{k}\chi\sigma} \right) \\
 &= \sum_{\mathbf{q}\chi'} \gamma_{\mathbf{q}\chi'} n_{j\bar{\sigma}} \left[\left(\delta_{\mathbf{k}\mathbf{q}} \delta_{\chi\chi'} \delta_{\sigma\sigma_A} - c_{\mathbf{q}\chi'\sigma_A}^\dagger c_{\mathbf{k}\chi\sigma} \right) c_{\mathbf{q}\chi'\sigma_B} - c_{\mathbf{q}\chi'\sigma_A}^\dagger c_{\mathbf{q}\chi'\sigma_B} c_{\mathbf{k}\chi\sigma} \right] \\
 &= \sum_{\mathbf{q}\chi'} \gamma_{\mathbf{q}\chi'} n_{j\bar{\sigma}} \left\{ \delta_{\mathbf{k}\mathbf{q}} \delta_{\chi\chi'} \delta_{\sigma\sigma_A} c_{\mathbf{q}\chi'\sigma_B} - c_{\mathbf{q}\chi'\sigma_A}^\dagger (c_{\mathbf{k}\chi\sigma} c_{\mathbf{q}\chi'\sigma_B} + c_{\mathbf{q}\chi'\sigma_B} c_{\mathbf{k}\chi\sigma}) \right\} \\
 &= \sum_{\mathbf{q}\chi'} \gamma_{\mathbf{q}\chi'} n_{j\bar{\sigma}} \left\{ \delta_{\mathbf{k}\mathbf{q}} \delta_{\chi\chi'} \delta_{\sigma\sigma_A} c_{\mathbf{q}\chi'\sigma_B} - c_{\mathbf{q}\chi'\sigma_A}^\dagger [c_{\mathbf{k}\chi\sigma}, c_{\mathbf{q}\chi'\sigma_B}]_+ \right\} \\
 &= \sum_{\mathbf{q}\chi'} \gamma_{\mathbf{q}\chi'} n_{j\bar{\sigma}} \left\{ \delta_{\mathbf{k}\mathbf{q}} \delta_{\chi\chi'} \delta_{\sigma\sigma_A} c_{\mathbf{q}\chi'\sigma_B} - c_{\mathbf{q}\chi'\sigma_A}^\dagger \cdot 0 \right\} \\
 &= \sum_{\mathbf{q}\chi'} \gamma_{\mathbf{q}\chi'} n_{j\bar{\sigma}} \delta_{\mathbf{k}\mathbf{q}} \delta_{\chi\chi'} \delta_{\sigma\sigma_A} c_{\mathbf{q}\chi'\sigma_B} \\
 &= \sum_{\mathbf{q}=\mathbf{k}} \sum_{\chi'=\chi} \gamma_{\mathbf{k}\chi} n_{j\bar{\sigma}} \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}} \delta_{\chi\chi} \delta_{\sigma\sigma_A} c_{\mathbf{k}\chi\sigma_B} \\
 &= \gamma_{\mathbf{k}\chi} \delta_{\sigma\sigma_A} n_{j\bar{\sigma}} c_{\mathbf{k}\chi\sigma_B} \tag{A.102}
 \end{aligned}$$

Therefore,

$$\sum_{\mathbf{k}'\chi} \chi' q_{z+}^{\chi} \left[n_{j\bar{\sigma}} c_{\mathbf{k}\chi\sigma}, c_{\mathbf{k}'\chi\uparrow}^{\dagger} c_{\mathbf{k}'\chi\uparrow} \right] = \chi k_{z+}^{\chi} \delta_{\sigma\uparrow} n_{j\bar{\sigma}} c_{\mathbf{k}\chi\uparrow} \quad (\text{A.103})$$

$$\sum_{\mathbf{k}'\chi} \chi' q_{-}^{\chi} \left[n_{j\bar{\sigma}} c_{\mathbf{k}\chi\sigma}, c_{\mathbf{k}'\chi\uparrow}^{\dagger} c_{\mathbf{k}'\chi\downarrow} \right] = \chi k_{-}^{\chi} \delta_{\sigma\uparrow} n_{j\bar{\sigma}} c_{\mathbf{k}\chi\downarrow} \quad (\text{A.104})$$

$$\sum_{\mathbf{k}'\chi} \chi' q_{+}^{\chi} \left[n_{j\bar{\sigma}} c_{\mathbf{k}\chi\sigma}, c_{\mathbf{k}'\chi\downarrow}^{\dagger} c_{\mathbf{k}'\chi\uparrow} \right] = \chi k_{+}^{\chi} \delta_{\sigma\downarrow} n_{j\bar{\sigma}} c_{\mathbf{k}\chi\uparrow} \quad (\text{A.105})$$

$$\sum_{\mathbf{k}'\chi} \chi' q_{z-}^{\chi} \left[n_{j\bar{\sigma}} c_{\mathbf{k}\chi\sigma}, c_{\mathbf{k}'\chi\downarrow}^{\dagger} c_{\mathbf{k}'\chi\downarrow} \right] = \chi k_{z-}^{\chi} \delta_{\sigma\downarrow} n_{j\bar{\sigma}} c_{\mathbf{k}\chi\downarrow} \quad (\text{A.106})$$

Now, for the term with t

$$\begin{aligned} \sum_{j'\sigma'} t \left[n_{j\bar{\sigma}} c_{\mathbf{k}\chi\sigma}, d_{j'\sigma'}^{\dagger}, d_{\bar{j}'\sigma'} \right] &= \sum_{j'\sigma'} t \left(n_{j\bar{\sigma}} c_{\mathbf{k}\chi\sigma} d_{j'\sigma'}^{\dagger} d_{\bar{j}'\sigma'} - d_{j'\sigma'}^{\dagger} d_{\bar{j}'\sigma'} n_{j\bar{\sigma}} c_{\mathbf{k}\chi\sigma} \right) \\ &= \sum_{j'\sigma'} t \left\{ n_{j\bar{\sigma}} d_{j'\sigma'}^{\dagger} d_{\bar{j}'\sigma'} c_{\mathbf{k}\chi\sigma} - d_{j'\sigma'}^{\dagger} (n_{j\bar{\sigma}} d_{\bar{j}'\sigma'} + \delta_{j\bar{j}'} \delta_{\bar{\sigma}\sigma'} d_{j\bar{\sigma}}) c_{\mathbf{k}\chi\sigma} \right\} \\ &= \sum_{j'\sigma'} t \left\{ n_{j\bar{\sigma}} d_{j'\sigma'}^{\dagger} d_{\bar{j}'\sigma'} c_{\mathbf{k}\chi\sigma} - d_{j'\sigma'}^{\dagger} n_{j\bar{\sigma}} d_{\bar{j}'\sigma'} c_{\mathbf{k}\chi\sigma} - \delta_{j\bar{j}'} \delta_{\bar{\sigma}\sigma'} d_{j'\sigma'}^{\dagger} d_{j\bar{\sigma}} c_{\mathbf{k}\chi\sigma} \right\} \\ &= \sum_{j'\sigma'} t \left\{ (n_{j\bar{\sigma}} d_{j'\sigma'}^{\dagger} - d_{j'\sigma'}^{\dagger} n_{j\bar{\sigma}}) d_{\bar{j}'\sigma'} c_{\mathbf{k}\chi\sigma} - \delta_{j\bar{j}'} \delta_{\bar{\sigma}\sigma'} d_{j'\sigma'}^{\dagger} d_{j\bar{\sigma}} c_{\mathbf{k}\chi\sigma} \right\} \\ &= \sum_{j'\sigma'} t \left\{ [n_{j\bar{\sigma}}, d_{j'\sigma'}^{\dagger}] d_{\bar{j}'\sigma'} c_{\mathbf{k}\chi\sigma} - \delta_{j\bar{j}'} \delta_{\bar{\sigma}\sigma'} d_{j'\sigma'}^{\dagger} d_{j\bar{\sigma}} c_{\mathbf{k}\chi\sigma} \right\} \\ &= \sum_{j'\sigma'} t \left\{ \delta_{j\bar{j}'} \delta_{\bar{\sigma}\sigma'} d_{j\bar{\sigma}}^{\dagger} d_{\bar{j}'\sigma'} c_{\mathbf{k}\chi\sigma} - \delta_{j\bar{j}'} \delta_{\bar{\sigma}\sigma'} d_{j'\sigma'}^{\dagger} d_{j\bar{\sigma}} c_{\mathbf{k}\chi\sigma} \right\} \\ &= \sum_{j'=j} \sum_{\sigma'=\bar{\sigma}} t \delta_{j\bar{j}} \delta_{\bar{\sigma}\sigma} d_{j\bar{\sigma}}^{\dagger} d_{\bar{j}\bar{\sigma}} c_{\mathbf{k}\chi\sigma} - \sum_{j'=\bar{j}} \sum_{\sigma'=\bar{\sigma}} t \delta_{j\bar{j}} \delta_{\bar{\sigma}\sigma} d_{j\bar{\sigma}}^{\dagger} d_{j\bar{\sigma}} c_{\mathbf{k}\chi\sigma} \\ &= t d_{j\bar{\sigma}}^{\dagger} d_{\bar{j}\bar{\sigma}} c_{\mathbf{k}\chi\sigma} - t d_{j\bar{\sigma}}^{\dagger} d_{j\bar{\sigma}} c_{\mathbf{k}\chi\sigma} \\ &= t \left(c_{\mathbf{k}\chi\sigma} d_{j\bar{\sigma}}^{\dagger} d_{\bar{j}\bar{\sigma}} - c_{\mathbf{k}\chi\sigma} d_{j\bar{\sigma}}^{\dagger} d_{j\bar{\sigma}} \right) \end{aligned} \quad (\text{A.107})$$

Now, for the term with $\varepsilon_{j'\sigma'}$

$$\begin{aligned}
 \sum_{j'\sigma'} \varepsilon_{j'\sigma'} \left[n_{j\bar{\sigma}} c_{\mathbf{k}\chi\sigma}, d_{j'\sigma'}^\dagger, d_{j'\sigma'} \right] &= \sum_{j'\sigma'} \varepsilon_{j'\sigma'} \left(n_{j\bar{\sigma}} c_{\mathbf{k}\chi\sigma} d_{j'\sigma'}^\dagger d_{j'\sigma'} - d_{j'\sigma'}^\dagger d_{j'\sigma'} n_{j\bar{\sigma}} c_{\mathbf{k}\chi\sigma} \right) \\
 &= \sum_{j'\sigma'} \varepsilon_{j'\sigma'} \left(n_{j\bar{\sigma}} d_{j'\sigma'}^\dagger d_{j'\sigma'} c_{\mathbf{k}\chi\sigma} - d_{j'\sigma'}^\dagger d_{j'\sigma'} n_{j\bar{\sigma}} c_{\mathbf{k}\chi\sigma} \right) \\
 &= \sum_{j'\sigma'} \varepsilon_{j'\sigma'} \left\{ n_{j\bar{\sigma}} d_{j'\sigma'}^\dagger d_{j'\sigma'} - d_{j'\sigma'}^\dagger (\delta_{jj'} \delta_{\bar{\sigma}\sigma'} d_{j\bar{\sigma}} + n_{j\bar{\sigma}} d_{j'\sigma'}) \right\} c_{\mathbf{k}\chi\sigma} \\
 &= - \sum_{j'\sigma'} \varepsilon_{j'\sigma'} \delta_{jj'} \delta_{\bar{\sigma}\sigma'} d_{j'\sigma'}^\dagger d_{j\bar{\sigma}} c_{\mathbf{k}\chi\sigma} \\
 &+ \sum_{j'\sigma'} \varepsilon_{j'\sigma'} \left\{ n_{j\bar{\sigma}} d_{j'\sigma'}^\dagger - d_{j'\sigma'}^\dagger n_{j\bar{\sigma}} \right\} d_{j'\sigma'} c_{\mathbf{k}\chi\sigma} \\
 &= - \sum_{j'\sigma'} \varepsilon_{j'\sigma'} \delta_{jj'} \delta_{\bar{\sigma}\sigma'} d_{j'\sigma'}^\dagger d_{j\bar{\sigma}} c_{\mathbf{k}\chi\sigma} \\
 &+ \sum_{j'\sigma'} \varepsilon_{j'\sigma'} \left[n_{j\bar{\sigma}}, d_{j'\sigma'}^\dagger \right] d_{j'\sigma'} c_{\mathbf{k}\chi\sigma} \\
 &= - \sum_{j'\sigma'} \varepsilon_{j'\sigma'} \delta_{jj'} \delta_{\bar{\sigma}\sigma'} d_{j'\sigma'}^\dagger d_{j\bar{\sigma}} c_{\mathbf{k}\chi\sigma} \\
 &+ \sum_{j'\sigma'} \varepsilon_{j'\sigma'} \delta_{jj'} \delta_{\bar{\sigma}\sigma'} d_{j'\sigma'}^\dagger d_{j\bar{\sigma}} c_{\mathbf{k}\chi\sigma} \\
 &= \sum_{j'\sigma'} \varepsilon_{j'\sigma'} \delta_{jj'} \delta_{\bar{\sigma}\sigma'} \left(-d_{j'\sigma'}^\dagger d_{j\bar{\sigma}} + d_{j\bar{\sigma}}^\dagger d_{j'\sigma'} \right) c_{\mathbf{k}\chi\sigma} \\
 &= \sum_{j'=j} \sum_{\sigma'=\bar{\sigma}} \varepsilon_{j\bar{\sigma}} \delta_{jj} \delta_{\bar{\sigma}\bar{\sigma}} \left(-\cancel{d_{j\bar{\sigma}}^\dagger d_{j\bar{\sigma}}} + \cancel{d_{j\bar{\sigma}}^\dagger d_{j\bar{\sigma}}} \right) c_{\mathbf{k}\chi\sigma} \\
 &= 0
 \end{aligned} \tag{A.108}$$

Now, solving the two terms with $V_{j\mathbf{k}'}$ in Eq. (A.101)

$$\begin{aligned}
 \sum_{j'q\sigma'\chi'} V_{j'q} \left[n_{j\bar{\sigma}} c_{\mathbf{k}\chi\sigma}, d_{j'\sigma'}^\dagger, c_{q\chi'\sigma'} \right] &= \sum_{j'q\sigma'\chi'} V_{j'q} \left(n_{j\bar{\sigma}} c_{\mathbf{k}\chi\sigma} d_{j'\sigma'}^\dagger c_{q\chi'\sigma'} - d_{j'\sigma'}^\dagger c_{q\chi'\sigma'} n_{j\bar{\sigma}} c_{\mathbf{k}\chi\sigma} \right) \\
 &= \sum_{j'q\sigma'\chi'} V_{j'q} \left\{ n_{j\bar{\sigma}} \left(-d_{j'\sigma'}^\dagger c_{\mathbf{k}\chi\sigma} \right) c_{q\chi'\sigma'} - d_{j'\sigma'}^\dagger n_{j\bar{\sigma}} c_{q\chi'\sigma'} c_{\mathbf{k}\chi\sigma} \right\} \\
 &= \sum_{j'q\sigma'\chi'} V_{j'q} \left\{ -n_{j\bar{\sigma}} d_{j'\sigma'}^\dagger c_{\mathbf{k}\chi\sigma} c_{q\chi'\sigma'} - d_{j'\sigma'}^\dagger n_{j\bar{\sigma}} \left(-c_{\mathbf{k}\chi\sigma} c_{q\chi'\sigma'} \right) \right\} \\
 &= \sum_{j'q\sigma'\chi'} V_{j'q} \left\{ -n_{j\bar{\sigma}} d_{j'\sigma'}^\dagger c_{\mathbf{k}\chi\sigma} c_{q\chi'\sigma'} - d_{j'\sigma'}^\dagger n_{j\bar{\sigma}} \left(-c_{\mathbf{k}\chi\sigma} c_{q\chi'\sigma'} \right) \right\} \\
 &= \sum_{j'q\sigma'\chi'} V_{j'q} \left\{ -n_{j\bar{\sigma}} d_{j'\sigma'}^\dagger + d_{j'\sigma'}^\dagger n_{j\bar{\sigma}} \right\} c_{\mathbf{k}\chi\sigma} c_{q\chi'\sigma'} \\
 &= \sum_{j'q\sigma'\chi'} V_{j'q} \left[d_{j'\sigma'}^\dagger, n_{j\bar{\sigma}} \right] c_{\mathbf{k}\chi\sigma} c_{q\chi'\sigma'} \\
 &= \sum_{j'q\sigma'\chi'} V_{j'q} \left(-\delta_{jj'} \delta_{\bar{\sigma}\sigma'} d_{j\bar{\sigma}}^\dagger \right) c_{\mathbf{k}\chi\sigma} c_{q\chi'\sigma'} \\
 &= - \sum_{q\chi'} \sum_{j'=j} \sum_{\sigma'=\bar{\sigma}} V_{jq} \delta_{jj} \delta_{\bar{\sigma}\bar{\sigma}} d_{j\bar{\sigma}}^\dagger c_{\mathbf{k}\chi\sigma} c_{q\chi'\bar{\sigma}} \\
 &= - \sum_{q\chi'} V_{jq} d_{j\bar{\sigma}}^\dagger c_{\mathbf{k}\chi\sigma} c_{q\chi'\bar{\sigma}} \\
 &= \sum_{q\chi'} V_{jq} d_{j\bar{\sigma}}^\dagger c_{q\chi'\bar{\sigma}} c_{\mathbf{k}\chi\sigma}
 \end{aligned} \tag{A.109}$$

$$\begin{aligned}
 \sum_{j'q\sigma'\chi'} V_{j'q}^* \left[n_{j\bar{\sigma}} c_{\mathbf{k}\chi\sigma}, c_{\mathbf{q}\chi'\sigma'}^\dagger d_{j'\sigma'} \right] &= \sum_{j'q\sigma'\chi'} V_{j'q}^* \left(n_{j\bar{\sigma}} c_{\mathbf{k}\chi\sigma} c_{\mathbf{q}\chi'\sigma'}^\dagger d_{j'\sigma'} - c_{\mathbf{q}\chi'\sigma'}^\dagger d_{j'\sigma'} n_{j\bar{\sigma}} c_{\mathbf{k}\chi\sigma} \right) \\
 &= \sum_{j'q\sigma'\chi'} V_{j'q}^* \left\{ c_{\mathbf{k}\chi\sigma} c_{\mathbf{q}\chi'\sigma'}^\dagger n_{j\bar{\sigma}} d_{j'\sigma'} - c_{\mathbf{q}\chi'\sigma'}^\dagger (-c_{\mathbf{k}\chi\sigma} d_{j'\sigma'} n_{j\bar{\sigma}}) \right\} \\
 &= \sum_{j'q\sigma'\chi'} V_{j'q}^* \left\{ \left(\delta_{\mathbf{k}\mathbf{q}} \delta_{\chi\chi'} \delta_{\sigma\sigma'} - c_{\mathbf{q}\chi'\sigma'}^\dagger c_{\mathbf{k}\chi\sigma} \right) n_{j\bar{\sigma}} d_{j'\sigma'} + c_{\mathbf{q}\chi'\sigma'}^\dagger c_{\mathbf{k}\chi\sigma} d_{j'\sigma'} n_{j\bar{\sigma}} \right\} \\
 &= \sum_{j'q\sigma'\chi'} V_{j'q}^* \delta_{\mathbf{k}\mathbf{q}} \delta_{\chi\chi'} \delta_{\sigma\sigma'} n_{j\bar{\sigma}} d_{j'\sigma'} \\
 &+ \sum_{j'q\sigma'\chi'} V_{j'q}^* \left\{ -c_{\mathbf{q}\chi'\sigma'}^\dagger c_{\mathbf{k}\chi\sigma} n_{j\bar{\sigma}} d_{j'\sigma'} + c_{\mathbf{q}\chi'\sigma'}^\dagger c_{\mathbf{k}\chi\sigma} d_{j'\sigma'} n_{j\bar{\sigma}} \right\} \\
 &= \sum_{j'q\sigma'\chi'} V_{j'q}^* \delta_{\mathbf{k}\mathbf{q}} \delta_{\chi\chi'} \delta_{\sigma\sigma'} n_{j\bar{\sigma}} d_{j'\sigma'} \\
 &+ \sum_{j'q\sigma'\chi'} V_{j'q}^* c_{\mathbf{q}\chi'\sigma'}^\dagger c_{\mathbf{k}\chi\sigma} (-n_{j\bar{\sigma}} d_{j'\sigma'} + d_{j'\sigma'} n_{j\bar{\sigma}}) \\
 &= \sum_{j'q\sigma'\chi'} V_{j'q}^* \delta_{\mathbf{k}\mathbf{q}} \delta_{\chi\chi'} \delta_{\sigma\sigma'} n_{j\bar{\sigma}} d_{j'\sigma'} \\
 &+ \sum_{j'q\sigma'\chi'} V_{j'q}^* c_{\mathbf{q}\chi'\sigma'}^\dagger c_{\mathbf{k}\chi\sigma} [d_{j'\sigma'}, n_{j\bar{\sigma}}] \\
 &= \sum_{j'q\sigma'\chi'} V_{j'q}^* \delta_{\mathbf{k}\mathbf{q}} \delta_{\chi\chi'} \delta_{\sigma\sigma'} n_{j\bar{\sigma}} d_{j'\sigma'} \\
 &+ \sum_{j'q\sigma'\chi'} V_{j'q}^* c_{\mathbf{q}\chi'\sigma'}^\dagger c_{\mathbf{k}\chi\sigma} \delta_{jj'} \delta_{\bar{\sigma}\sigma'} d_{j\bar{\sigma}} \\
 &= \sum_{j'} \sum_{\mathbf{q}=\mathbf{k}} \sum_{\sigma'=\sigma} \sum_{\chi'=\chi} V_{j'q}^* \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}} \delta_{\chi\chi} \delta_{\sigma\sigma} n_{j\bar{\sigma}} d_{j'\sigma} \\
 &+ \sum_{\mathbf{q}\chi'} \sum_{j'=j} \sum_{\sigma'=\bar{\sigma}} V_{j'q}^* \delta_{jj} \delta_{\bar{\sigma}\bar{\sigma}} c_{\mathbf{q}\chi'\bar{\sigma}}^\dagger c_{\mathbf{k}\chi\sigma} d_{j\bar{\sigma}} \\
 &= \sum_{j'} V_{j'k}^* n_{j\bar{\sigma}} d_{j'\sigma} + \sum_{\mathbf{q}\chi'} V_{j'q}^* c_{\mathbf{q}\chi'\bar{\sigma}}^\dagger c_{\mathbf{k}\chi\sigma} d_{j\bar{\sigma}}
 \end{aligned} \tag{A.110}$$

Now for the term with $U_{j'}$

$$\begin{aligned}
 \sum_{j'} U_{j'} \left[n_{j\bar{\sigma}} c_{\mathbf{k}\chi\sigma}, d_{j'\uparrow}^\dagger d_{j'\uparrow} d_{j'\downarrow}^\dagger d_{j'\downarrow} \right] &= \sum_{j'} U_{j'} [n_{j\bar{\sigma}} c_{\mathbf{k}\chi\sigma}, n_{j'\uparrow} n_{j'\downarrow}] \\
 &= \sum_{j'} U_{j'} \{ n_{j\bar{\sigma}} c_{\mathbf{k}\chi\sigma} n_{j'\uparrow} n_{j'\downarrow} - n_{j'\uparrow} n_{j'\downarrow} n_{j\bar{\sigma}} c_{\mathbf{k}\chi\sigma} \} \\
 &= \sum_{j'} U_{j'} \{ n_{j\bar{\sigma}} n_{j'\uparrow} n_{j'\downarrow} c_{\mathbf{k}\chi\sigma} - n_{j'\uparrow} n_{j'\downarrow} n_{j\bar{\sigma}} c_{\mathbf{k}\chi\sigma} \} \\
 &= \sum_{j'} U_{j'} \{ n_{j\bar{\sigma}} n_{j'\uparrow} n_{j'\downarrow} - n_{j'\uparrow} n_{j'\downarrow} n_{j\bar{\sigma}} \} c_{\mathbf{k}\chi\sigma} \\
 &= \sum_{j'} U_{j'} \left\{ n_{j\bar{\sigma}} n_{j'\uparrow} n_{j'\downarrow} - n_{j'\uparrow} \left[\delta_{jj'} \delta_{\downarrow\bar{\sigma}} \left(d_{j'\downarrow}^\dagger d_{j\bar{\sigma}} - d_{j\bar{\sigma}}^\dagger d_{j'\downarrow} \right) + n_{j\bar{\sigma}} n_{j'\downarrow} \right] \right\} c_{\mathbf{k}\chi\sigma} \\
 &= - \sum_{j'} U_{j'} \delta_{jj'} \delta_{\downarrow\bar{\sigma}} n_{j'\uparrow} \left(d_{j'\downarrow}^\dagger d_{j\bar{\sigma}} - d_{j\bar{\sigma}}^\dagger d_{j'\downarrow} \right) c_{\mathbf{k}\chi\sigma} \\
 &+ \sum_{j'} U_{j'} \{ n_{j\bar{\sigma}} n_{j'\uparrow} n_{j'\downarrow} - n_{j'\uparrow} n_{j\bar{\sigma}} n_{j'\downarrow} \} c_{\mathbf{k}\chi\sigma} \\
 &= - \sum_{j'} U_{j'} \delta_{jj'} \delta_{\downarrow\bar{\sigma}} n_{j'\uparrow} \left(d_{j'\downarrow}^\dagger d_{j\bar{\sigma}} - d_{j\bar{\sigma}}^\dagger d_{j'\downarrow} \right) c_{\mathbf{k}\chi\sigma} \\
 &+ \sum_{j'} U_{j'} \{ n_{j\bar{\sigma}} n_{j'\uparrow} - n_{j'\uparrow} n_{j\bar{\sigma}} \} n_{j'\downarrow} c_{\mathbf{k}\chi\sigma} \\
 &= - \sum_{j'} U_{j'} \delta_{jj'} \delta_{\downarrow\bar{\sigma}} n_{j'\uparrow} \left(d_{j'\downarrow}^\dagger d_{j\bar{\sigma}} - d_{j\bar{\sigma}}^\dagger d_{j'\downarrow} \right) c_{\mathbf{k}\chi\sigma} \\
 &+ \sum_{j'} U_{j'} [n_{j\bar{\sigma}}, n_{j'\uparrow}] n_{j'\downarrow} c_{\mathbf{k}\chi\sigma} \\
 &= - \sum_{j'} U_{j'} \delta_{jj'} \delta_{\downarrow\bar{\sigma}} n_{j'\uparrow} \left(d_{j'\downarrow}^\dagger d_{j\bar{\sigma}} - d_{j\bar{\sigma}}^\dagger d_{j'\downarrow} \right) c_{\mathbf{k}\chi\sigma} \\
 &+ \sum_{j'} U_{j'} \delta_{jj'} \delta_{\bar{\sigma}\uparrow} \left(d_{j\bar{\sigma}}^\dagger d_{j'\uparrow} - d_{j'\uparrow}^\dagger d_{j\bar{\sigma}} \right) n_{j'\downarrow} c_{\mathbf{k}\chi\sigma} \\
 &= - \sum_{j'=j} U_j \delta_{jj} \delta_{\downarrow\bar{\sigma}} n_{j\uparrow} \left(d_{j\downarrow}^\dagger d_{j\bar{\sigma}} - d_{j\bar{\sigma}}^\dagger d_{j\downarrow} \right) c_{\mathbf{k}\chi\sigma} \\
 &+ \sum_{j'=j} U_j \delta_{jj} \delta_{\bar{\sigma}\uparrow} \left(d_{j\bar{\sigma}}^\dagger d_{j\uparrow} - d_{j\uparrow}^\dagger d_{j\bar{\sigma}} \right) n_{j\downarrow} c_{\mathbf{k}\chi\sigma} \\
 &= -U_j \delta_{\downarrow\bar{\sigma}} n_{j\uparrow} \left(d_{j\downarrow}^\dagger d_{j\bar{\sigma}} - d_{j\bar{\sigma}}^\dagger d_{j\downarrow} \right) c_{\mathbf{k}\chi\sigma} \\
 &+ U_j \delta_{\bar{\sigma}\uparrow} \left(d_{j\bar{\sigma}}^\dagger d_{j\uparrow} - d_{j\uparrow}^\dagger d_{j\bar{\sigma}} \right) n_{j\downarrow} c_{\mathbf{k}\chi\sigma}
 \end{aligned} \tag{A.111}$$

Let us analyze the two cases

$$\begin{array}{l|l}
 \text{For } \sigma = \uparrow & \text{For } \sigma = \downarrow \\
 = -U_j \delta_{\downarrow\bar{\sigma}} n_{j\uparrow} \left(d_{j\downarrow}^\dagger d_{j\bar{\sigma}} - d_{j\bar{\sigma}}^\dagger d_{j\downarrow} \right) c_{\mathbf{k}\chi\sigma} & = -U_j \delta_{\downarrow\bar{\sigma}} n_{j\uparrow} \left(d_{j\downarrow}^\dagger d_{j\bar{\sigma}} - d_{j\bar{\sigma}}^\dagger d_{j\downarrow} \right) c_{\mathbf{k}\chi\sigma} \\
 + U_j \delta_{\bar{\sigma}\uparrow} \left(d_{j\bar{\sigma}}^\dagger d_{j\uparrow} - d_{j\uparrow}^\dagger d_{j\bar{\sigma}} \right) n_{j\downarrow} c_{\mathbf{k}\chi\sigma} & + U_j \delta_{\bar{\sigma}\uparrow} \left(d_{j\bar{\sigma}}^\dagger d_{j\uparrow} - d_{j\uparrow}^\dagger d_{j\bar{\sigma}} \right) n_{j\downarrow} c_{\mathbf{k}\chi\sigma} \\
 = -U_j \delta_{\bar{\sigma}\bar{\sigma}} n_{j\sigma} \left(d_{j\bar{\sigma}}^\dagger d_{j\bar{\sigma}} - d_{j\bar{\sigma}}^\dagger d_{j\bar{\sigma}} \right) c_{\mathbf{k}\chi\sigma} & = -U_j \delta_{\bar{\sigma}\bar{\sigma}} n_{j\bar{\sigma}} \left(d_{j\sigma}^\dagger d_{j\bar{\sigma}} - d_{j\bar{\sigma}}^\dagger d_{j\sigma} \right) c_{\mathbf{k}\chi\sigma} \\
 + U_j \delta_{\bar{\sigma}\bar{\sigma}} \left(d_{j\bar{\sigma}}^\dagger d_{j\sigma} - d_{j\sigma}^\dagger d_{j\bar{\sigma}} \right) n_{j'\bar{\sigma}} c_{\mathbf{k}\chi\sigma} & + U_j \delta_{\bar{\sigma}\bar{\sigma}} \left(d_{j\bar{\sigma}}^\dagger d_{j\sigma} - d_{j\sigma}^\dagger d_{j\bar{\sigma}} \right) n_{j'\sigma} c_{\mathbf{k}\chi\sigma} \\
 = & =
 \end{array}$$

Therefore, no matter what is the value of σ the result will be the same

$$\sum_{j'} U_{j'} \left[n_{j\bar{\sigma}} c_{\mathbf{k}\chi\sigma}, d_{j'\uparrow}^\dagger d_{j'\uparrow} d_{j'\downarrow}^\dagger d_{j'\downarrow} \right] = 0 \tag{A.112}$$

Substituting them in Eq. (A.101)

$$\begin{aligned}
 i\hbar \frac{\partial}{\partial \tau} n_{j\bar{\sigma}}(\tau) c_{\mathbf{k}\chi\sigma}(\tau) &= \chi k_{z+}^{\chi} \delta_{\sigma\uparrow} n_{j\bar{\sigma}} c_{\mathbf{k}\chi\uparrow} + \chi k_{z-}^{\chi} \delta_{\sigma\uparrow} n_{j\bar{\sigma}} c_{\mathbf{k}\chi\downarrow} + \chi k_{z+}^{\chi} \delta_{\sigma\downarrow} n_{j\bar{\sigma}} c_{\mathbf{k}\chi\uparrow} - \chi k_{z-}^{\chi} \delta_{\sigma\downarrow} n_{j\bar{\sigma}} c_{\mathbf{k}\chi\downarrow} \\
 &- t \left(c_{\mathbf{k}\chi\sigma} d_{j\bar{\sigma}}^{\dagger} d_{j\bar{\sigma}} - c_{\mathbf{k}\chi\sigma} d_{j\bar{\sigma}}^{\dagger} d_{j\bar{\sigma}} \right) + \sum_{\mathbf{q}\chi'} V_{j\mathbf{q}} d_{j\bar{\sigma}}^{\dagger} c_{\mathbf{q}\chi'\bar{\sigma}} c_{\mathbf{k}\chi\sigma} + \sum_{j'} V_{j'\mathbf{k}} n_{j\bar{\sigma}} d_{j'\sigma} \\
 &+ \sum_{\mathbf{q}\chi'} V_{j\mathbf{q}}^* c_{\mathbf{q}\chi'\bar{\sigma}}^{\dagger} c_{\mathbf{k}\chi\sigma} d_{j\bar{\sigma}} \\
 \frac{\partial}{\partial \tau} n_{j\bar{\sigma}}(\tau) c_{\mathbf{k}\chi\sigma}(\tau) &= -\frac{i}{\hbar} \chi k_{z+}^{\chi} \delta_{\sigma\uparrow} n_{j\bar{\sigma}} c_{\mathbf{k}\chi\uparrow} - \frac{i}{\hbar} \chi k_{z-}^{\chi} \delta_{\sigma\uparrow} n_{j\bar{\sigma}} c_{\mathbf{k}\chi\downarrow} - \frac{i}{\hbar} \chi k_{z+}^{\chi} \delta_{\sigma\downarrow} n_{j\bar{\sigma}} c_{\mathbf{k}\chi\uparrow} + \frac{i}{\hbar} \chi k_{z-}^{\chi} \delta_{\sigma\downarrow} n_{j\bar{\sigma}} c_{\mathbf{k}\chi\downarrow} \\
 &+ \frac{i}{\hbar} t c_{\mathbf{k}\chi\sigma} d_{j\bar{\sigma}}^{\dagger} d_{j\bar{\sigma}} - \frac{i}{\hbar} t c_{\mathbf{k}\chi\sigma} d_{j\bar{\sigma}}^{\dagger} d_{j\bar{\sigma}} - \frac{i}{\hbar} \sum_{\mathbf{q}\chi'} V_{j\mathbf{q}} d_{j\bar{\sigma}}^{\dagger} c_{\mathbf{q}\chi'\bar{\sigma}} c_{\mathbf{k}\chi\sigma} - \frac{i}{\hbar} \sum_{j'} V_{j'\mathbf{k}} n_{j\bar{\sigma}} d_{j'\sigma} \\
 &+ \left(-\frac{i}{\hbar} \right) \sum_{\mathbf{q}\chi'} V_{j\mathbf{q}}^* c_{\mathbf{q}\chi'\bar{\sigma}}^{\dagger} c_{\mathbf{k}\chi\sigma} d_{j\bar{\sigma}}
 \end{aligned} \tag{A.113}$$

Substituting Eq. (A.113) in Eq. (A.100)

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial}{\partial \tau} \mathcal{G}_{n_{j\bar{\sigma}} c_{\mathbf{k}\chi\sigma} d_{l\sigma'}}(\tau) &= -\frac{i}{\hbar} \delta(\tau) Z_e^{-1} \sum_n e^{-\beta E_n} \langle n | \left[n_{j\bar{\sigma}}(\tau) c_{\mathbf{k}\chi\sigma}(\tau), d_{l\sigma'}^{\dagger}(0) \right]_+ | n \rangle \\
 &+ \left(-\frac{i}{\hbar} \right) \theta(\tau) Z_e^{-1} \sum_n e^{-\beta E_n} \langle n | \left[\frac{\partial}{\partial \tau} \{ n_{j\bar{\sigma}}(\tau) c_{\mathbf{k}\chi\sigma}(\tau) \}, d_{l\sigma'}^{\dagger}(0) \right]_+ | n \rangle \\
 &= -\frac{i}{\hbar} \delta(\tau) Z_e^{-1} \sum_n e^{-\beta E_n} \langle n | \left[n_{j\bar{\sigma}}(\tau) c_{\mathbf{k}\chi\sigma}(\tau), d_{l\sigma'}^{\dagger}(0) \right]_+ | n \rangle \\
 &+ \left(-\frac{i}{\hbar} \right) \theta(\tau) Z_e^{-1} \sum_n e^{-\beta E_n} \langle n | \left[\left\{ -\frac{i}{\hbar} \chi k_{z+}^{\chi} \delta_{\sigma\uparrow} n_{j\bar{\sigma}} c_{\mathbf{k}\chi\uparrow} \right\}, d_{l\sigma'}^{\dagger}(0) \right]_+ | n \rangle \\
 &+ \left(-\frac{i}{\hbar} \right) \theta(\tau) Z_e^{-1} \sum_n e^{-\beta E_n} \langle n | \left[\left\{ -\frac{i}{\hbar} \chi k_{z-}^{\chi} \delta_{\sigma\uparrow} n_{j\bar{\sigma}} c_{\mathbf{k}\chi\downarrow} \right\}, d_{l\sigma'}^{\dagger}(0) \right]_+ | n \rangle \\
 &+ \left(-\frac{i}{\hbar} \right) \theta(\tau) Z_e^{-1} \sum_n e^{-\beta E_n} \langle n | \left[\left\{ -\frac{i}{\hbar} \chi k_{z+}^{\chi} \delta_{\sigma\downarrow} n_{j\bar{\sigma}} c_{\mathbf{k}\chi\uparrow} \right\}, d_{l\sigma'}^{\dagger}(0) \right]_+ | n \rangle \\
 &+ \left(-\frac{i}{\hbar} \right) \theta(\tau) Z_e^{-1} \sum_n e^{-\beta E_n} \langle n | \left[\left\{ \frac{i}{\hbar} \chi k_{z-}^{\chi} \delta_{\sigma\downarrow} n_{j\bar{\sigma}} c_{\mathbf{k}\chi\downarrow} \right\}, d_{l\sigma'}^{\dagger}(0) \right]_+ | n \rangle \\
 &+ \left(-\frac{i}{\hbar} \right) \theta(\tau) Z_e^{-1} \sum_n e^{-\beta E_n} \langle n | \left[\left\{ \frac{i}{\hbar} t c_{\mathbf{k}\chi\sigma} d_{j\bar{\sigma}}^{\dagger} d_{j\bar{\sigma}} \right\}, d_{l\sigma'}^{\dagger}(0) \right]_+ | n \rangle \\
 &+ \left(-\frac{i}{\hbar} \right) \theta(\tau) Z_e^{-1} \sum_n e^{-\beta E_n} \langle n | \left[\left\{ -\frac{i}{\hbar} t c_{\mathbf{k}\chi\sigma} d_{j\bar{\sigma}}^{\dagger} d_{j\bar{\sigma}} \right\}, d_{l\sigma'}^{\dagger}(0) \right]_+ | n \rangle \\
 &+ \left(-\frac{i}{\hbar} \right) \theta(\tau) Z_e^{-1} \sum_n e^{-\beta E_n} \langle n | \left[\left\{ -\frac{i}{\hbar} \sum_{\mathbf{q}\chi'} V_{j\mathbf{q}} d_{j\bar{\sigma}}^{\dagger} c_{\mathbf{q}\chi'\bar{\sigma}} c_{\mathbf{k}\chi\sigma} \right\}, d_{l\sigma'}^{\dagger}(0) \right]_+ | n \rangle \\
 &+ \left(-\frac{i}{\hbar} \right) \theta(\tau) Z_e^{-1} \sum_n e^{-\beta E_n} \langle n | \left[\left\{ -\frac{i}{\hbar} \sum_{j'} V_{j'\mathbf{k}} n_{j\bar{\sigma}} d_{j'\sigma} \right\}, d_{l\sigma'}^{\dagger}(0) \right]_+ | n \rangle \\
 &+ \left(-\frac{i}{\hbar} \right) \theta(\tau) Z_e^{-1} \sum_n e^{-\beta E_n} \langle n | \left[\left\{ -\frac{i}{\hbar} \sum_{\mathbf{q}\chi'} V_{j\mathbf{q}}^* c_{\mathbf{q}\chi'\bar{\sigma}}^{\dagger} c_{\mathbf{k}\chi\sigma} d_{j\bar{\sigma}} \right\}, d_{l\sigma'}^{\dagger}(0) \right]_+ | n \rangle
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 &= -\frac{i}{\hbar}\delta(\tau)Z_e^{-1}\sum_n e^{-\beta E_n}\langle n|\left[n_{j\bar{\sigma}}(\tau)c_{\mathbf{k}\chi\sigma}(\tau),d_{l\sigma'}^\dagger(0)\right]_+|n\rangle \\
 &+ \left(-\frac{i}{\hbar}\right)\chi k_{z+}^X\delta_{\sigma\uparrow}\left\{-\frac{i}{\hbar}\theta(\tau)Z_e^{-1}\sum_n e^{-\beta E_n}\langle n|\left[n_{j\bar{\sigma}}c_{\mathbf{k}\chi\uparrow},d_{l\sigma'}^\dagger(0)\right]_+|n\rangle\right\} \\
 &+ \left(-\frac{i}{\hbar}\right)\chi k_{z-}^X\delta_{\sigma\uparrow}\left\{-\frac{i}{\hbar}\theta(\tau)Z_e^{-1}\sum_n e^{-\beta E_n}\langle n|\left[n_{j\bar{\sigma}}c_{\mathbf{k}\chi\downarrow},d_{l\sigma'}^\dagger(0)\right]_+|n\rangle\right\} \\
 &+ \left(-\frac{i}{\hbar}\right)\chi k_{z+}^X\delta_{\sigma\downarrow}\left\{-\frac{i}{\hbar}\theta(\tau)Z_e^{-1}\sum_n e^{-\beta E_n}\langle n|\left[n_{j\bar{\sigma}}c_{\mathbf{k}\chi\uparrow},d_{l\sigma'}^\dagger(0)\right]_+|n\rangle\right\} \\
 &+ \frac{i}{\hbar}\chi k_{z-}^X\delta_{\sigma\downarrow}\left\{-\frac{i}{\hbar}\theta(\tau)Z_e^{-1}\sum_n e^{-\beta E_n}\langle n|\left[n_{j\bar{\sigma}}c_{\mathbf{k}\chi\downarrow},d_{l\sigma'}^\dagger(0)\right]_+|n\rangle\right\} \\
 &+ \frac{i}{\hbar}t\left\{-\frac{i}{\hbar}\theta(\tau)Z_e^{-1}\sum_n e^{-\beta E_n}\langle n|\left[c_{\mathbf{k}\chi\sigma}d_{j\bar{\sigma}}^\dagger d_{j\bar{\sigma}},d_{l\sigma'}^\dagger(0)\right]_+|n\rangle\right\} \\
 &+ \left(-\frac{i}{\hbar}\right)t\left\{-\frac{i}{\hbar}\theta(\tau)Z_e^{-1}\sum_n e^{-\beta E_n}\langle n|\left[c_{\mathbf{k}\chi\sigma}d_{j\bar{\sigma}}^\dagger d_{j\bar{\sigma}},d_{l\sigma'}^\dagger(0)\right]_+|n\rangle\right\} \\
 &+ \left(-\frac{i}{\hbar}\right)\sum_{\mathbf{q}\chi'} V_{j\mathbf{q}}\left\{-\frac{i}{\hbar}\theta(\tau)Z_e^{-1}\sum_n e^{-\beta E_n}\langle n|\left[d_{j\bar{\sigma}}^\dagger c_{\mathbf{q}\chi'\bar{\sigma}}c_{\mathbf{k}\chi\sigma},d_{l\sigma'}^\dagger(0)\right]_+|n\rangle\right\} \\
 &+ \left(-\frac{i}{\hbar}\right)\sum_{j'} V_{j'\mathbf{k}}^*\left\{-\frac{i}{\hbar}\theta(\tau)Z_e^{-1}\sum_n e^{-\beta E_n}\langle n|\left[n_{j\bar{\sigma}}d_{j'\sigma},d_{l\sigma'}^\dagger(0)\right]_+|n\rangle\right\} \\
 &+ \left(-\frac{i}{\hbar}\right)\sum_{\mathbf{q}\chi'} V_{j\mathbf{q}}^*\left\{-\frac{i}{\hbar}\theta(\tau)Z_e^{-1}\sum_n e^{-\beta E_n}\langle n|\left[c_{\mathbf{q}\chi'\bar{\sigma}}^\dagger c_{\mathbf{k}\chi\sigma}d_{j\bar{\sigma}},d_{l\sigma'}^\dagger(0)\right]_+|n\rangle\right\} \\
 &= -\frac{i}{\hbar}\delta(\tau)Z_e^{-1}\sum_n e^{-\beta E_n}\langle n|\left[n_{j\bar{\sigma}}(\tau)c_{\mathbf{k}\chi\sigma}(\tau),d_{l\sigma'}^\dagger(0)\right]_+|n\rangle \\
 &+ \left(-\frac{i}{\hbar}\right)\chi k_{z+}^X\delta_{\sigma\uparrow}\mathcal{G}_{n_{j\bar{\sigma}}c_{\mathbf{k}\chi\uparrow}d_{l\sigma'}}(\tau) - \frac{i}{\hbar}\chi k_{z-}^X\delta_{\sigma\uparrow}\mathcal{G}_{n_{j\bar{\sigma}}c_{\mathbf{k}\chi\downarrow}d_{l\sigma'}}(\tau) - \frac{i}{\hbar}\chi k_{z+}^X\delta_{\sigma\downarrow}\mathcal{G}_{n_{j\bar{\sigma}}c_{\mathbf{k}\chi\uparrow}d_{l\sigma'}}(\tau) \\
 &+ \frac{i}{\hbar}\chi k_{z-}^X\delta_{\sigma\downarrow}\mathcal{G}_{n_{j\bar{\sigma}}c_{\mathbf{k}\chi\downarrow}d_{l\sigma'}}(\tau) + \frac{i}{\hbar}t\mathcal{G}_{c_{\mathbf{k}\chi\sigma}d_{j\bar{\sigma}}^\dagger d_{j\bar{\sigma}}d_{l\sigma'}}(\tau) - \frac{i}{\hbar}t\mathcal{G}_{c_{\mathbf{k}\chi\sigma}d_{j\bar{\sigma}}^\dagger d_{j\bar{\sigma}}d_{l\sigma'}}(\tau) \\
 &+ \left(-\frac{i}{\hbar}\right)\sum_{\mathbf{q}\chi'} V_{j\mathbf{q}}\mathcal{G}_{d_{j\bar{\sigma}}^\dagger c_{\mathbf{q}\chi'\bar{\sigma}}c_{\mathbf{k}\chi\sigma}d_{l\sigma'}}(\tau) - \frac{i}{\hbar}\sum_{j'} V_{j'\mathbf{k}}^*\mathcal{G}_{n_{j\bar{\sigma}}d_{j'\sigma}d_{l\sigma'}}(\tau) - \frac{i}{\hbar}\sum_{\mathbf{q}\chi'} V_{j\mathbf{q}}\mathcal{G}_{c_{\mathbf{q}\chi'\bar{\sigma}}^\dagger c_{\mathbf{k}\chi\sigma}d_{j\bar{\sigma}}d_{l\sigma'}}(\tau) \quad (\text{A.114})
 \end{aligned}$$

Therefore,

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial}{\partial\tau}\mathcal{G}_{n_{j\bar{\sigma}}c_{\mathbf{k}\chi\sigma}d_{l\sigma'}}(\tau) &= -\frac{i}{\hbar}\delta(\tau)Z_e^{-1}\sum_n e^{-\beta E_n}\langle n|\left[n_{j\bar{\sigma}}(\tau)c_{\mathbf{k}\chi\sigma}(\tau),d_{l\sigma'}^\dagger(0)\right]_+|n\rangle \\
 &+ \left(-\frac{i}{\hbar}\right)\chi(k_{z+}^X\delta_{\sigma\downarrow} + k_{z-}^X\delta_{\sigma\uparrow})\mathcal{G}_{n_{j\bar{\sigma}}c_{\mathbf{k}\chi\uparrow}d_{l\sigma'}}(\tau) \\
 &+ \left(-\frac{i}{\hbar}\right)\chi(k_{z-}^X\delta_{\sigma\uparrow} - k_{z+}^X\delta_{\sigma\downarrow})\mathcal{G}_{n_{j\bar{\sigma}}c_{\mathbf{k}\chi\downarrow}d_{l\sigma'}}(\tau) \\
 &+ \frac{i}{\hbar}t\mathcal{G}_{c_{\mathbf{k}\chi\sigma}d_{j\bar{\sigma}}^\dagger d_{j\bar{\sigma}}d_{l\sigma'}}(\tau) - \frac{i}{\hbar}t\mathcal{G}_{c_{\mathbf{k}\chi\sigma}d_{j\bar{\sigma}}^\dagger d_{j\bar{\sigma}}d_{l\sigma'}}(\tau) - \frac{i}{\hbar}\sum_{\mathbf{q}\chi'} V_{j\mathbf{q}}\mathcal{G}_{d_{j\bar{\sigma}}^\dagger c_{\mathbf{q}\chi'\bar{\sigma}}c_{\mathbf{k}\chi\sigma}d_{l\sigma'}}(\tau) \\
 &+ \left(-\frac{i}{\hbar}\right)\sum_{j'} V_{j'\mathbf{k}}^*\mathcal{G}_{n_{j\bar{\sigma}}d_{j'\sigma}d_{l\sigma'}}(\tau) - \frac{i}{\hbar}\sum_{\mathbf{q}\chi'} V_{j\mathbf{q}}\mathcal{G}_{c_{\mathbf{q}\chi'\bar{\sigma}}^\dagger c_{\mathbf{k}\chi\sigma}d_{j\bar{\sigma}}d_{l\sigma'}}(\tau) \quad (\text{A.115})
 \end{aligned}$$

Integrating and multiplying both sides of Eq. (A.115) by $e^{\frac{i}{\hbar}(\varepsilon+i\eta)t}$,

$$\begin{aligned}
 \int_{-\infty}^{+\infty} dt \frac{\partial}{\partial \tau} \mathcal{G}_{n_{j\bar{\sigma}} c_{\mathbf{k}\chi\sigma} d_{l\sigma'}}(\tau) \cdot e^{\frac{i}{\hbar}(\varepsilon+i\eta)t} &= \int_{-\infty}^{+\infty} dt \left\{ -\frac{i}{\hbar} \delta(\tau) Z_e^{-1} \sum_n e^{-\beta E_n} \langle n | \left[n_{j\bar{\sigma}}(\tau) c_{\mathbf{k}\chi\sigma}(\tau), d_{l\sigma'}^\dagger(0) \right]_+ | n \rangle \right. \\
 &+ \left(-\frac{i}{\hbar} \right) \chi \left(k_+^X \delta_{\sigma\downarrow} + k_{z+}^X \delta_{\sigma\uparrow} \right) \mathcal{G}_{n_{j\bar{\sigma}} c_{\mathbf{k}\chi\uparrow} d_{l\sigma'}}(\tau) \\
 &+ \left(-\frac{i}{\hbar} \right) \chi \left(k_-^X \delta_{\sigma\uparrow} - k_{z-}^X \delta_{\sigma\downarrow} \right) \mathcal{G}_{n_{j\bar{\sigma}} c_{\mathbf{k}\chi\downarrow} d_{l\sigma'}}(\tau) \\
 &+ \frac{i}{\hbar} t \mathcal{G}_{c_{\mathbf{k}\chi\sigma} d_{j\bar{\sigma}}^\dagger d_{j\bar{\sigma}} d_{l\sigma'}}(\tau) - \frac{i}{\hbar} t \mathcal{G}_{c_{\mathbf{k}\chi\sigma} d_{j\bar{\sigma}}^\dagger d_{j\bar{\sigma}} d_{l\sigma'}}(\tau) - \frac{i}{\hbar} \sum_{\mathbf{q}\chi'} V_{j\mathbf{q}} \mathcal{G}_{d_{j\bar{\sigma}}^\dagger c_{\mathbf{q}\chi'\bar{\sigma}} c_{\mathbf{k}\chi\sigma} d_{l\sigma'}}(\tau) \\
 &+ \left. \left(-\frac{i}{\hbar} \right) \sum_{j'} V_{j'\mathbf{k}}^* \mathcal{G}_{n_{j\bar{\sigma}} d_{j'\sigma} d_{l\sigma'}}(\tau) - \frac{i}{\hbar} \sum_{\mathbf{q}\chi'} V_{j\mathbf{q}}^* \mathcal{G}_{c_{\mathbf{q}\chi'\bar{\sigma}} c_{\mathbf{k}\chi\sigma} d_{j\bar{\sigma}} d_{l\sigma'}}(\tau) \right\} \cdot e^{\frac{i}{\hbar}(\varepsilon+i\eta)t} \\
 &= -\frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} dt \left\{ \delta(\tau) Z_e^{-1} \sum_n e^{-\beta E_n} \langle n | \left[n_{j\bar{\sigma}}(\tau) c_{\mathbf{k}\chi\sigma}(\tau), d_{l\sigma'}^\dagger(0) \right]_+ | n \rangle \right\} \cdot e^{\frac{i}{\hbar}(\varepsilon+i\eta)t} \\
 &+ \left(-\frac{i}{\hbar} \right) \chi \left(k_+^X \delta_{\sigma\downarrow} + k_{z+}^X \delta_{\sigma\uparrow} \right) \tilde{\mathcal{G}}_{n_{j\bar{\sigma}} c_{\mathbf{k}\chi\uparrow} d_{l\sigma'}}(\varepsilon) \\
 &+ \left(-\frac{i}{\hbar} \right) \chi \left(k_-^X \delta_{\sigma\uparrow} - k_{z-}^X \delta_{\sigma\downarrow} \right) \tilde{\mathcal{G}}_{n_{j\bar{\sigma}} c_{\mathbf{k}\chi\downarrow} d_{l\sigma'}}(\varepsilon) \\
 &+ \frac{i}{\hbar} t \tilde{\mathcal{G}}_{c_{\mathbf{k}\chi\sigma} d_{j\bar{\sigma}}^\dagger d_{j\bar{\sigma}} d_{l\sigma'}}(\varepsilon) - \frac{i}{\hbar} t \tilde{\mathcal{G}}_{c_{\mathbf{k}\chi\sigma} d_{j\bar{\sigma}}^\dagger d_{j\bar{\sigma}} d_{l\sigma'}}(\varepsilon) - \frac{i}{\hbar} \sum_{\mathbf{q}\chi'} V_{j\mathbf{q}} \tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\bar{\sigma}}^\dagger c_{\mathbf{q}\chi'\bar{\sigma}} c_{\mathbf{k}\chi\sigma} d_{l\sigma'}}(\varepsilon) \\
 &+ \left. \left(-\frac{i}{\hbar} \right) \sum_{j'} V_{j'\mathbf{k}}^* \tilde{\mathcal{G}}_{n_{j\bar{\sigma}} d_{j'\sigma} d_{l\sigma'}}(\varepsilon) - \frac{i}{\hbar} \sum_{\mathbf{q}\chi'} V_{j\mathbf{q}}^* \tilde{\mathcal{G}}_{c_{\mathbf{q}\chi'\bar{\sigma}} c_{\mathbf{k}\chi\sigma} d_{j\bar{\sigma}} d_{l\sigma'}}(\varepsilon) \right\} \tag{A.116}
 \end{aligned}$$

Now,

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dt \frac{\partial}{\partial \tau} \mathcal{G}_{n_{j\bar{\sigma}} c_{\mathbf{k}\chi\sigma} d_{j'\sigma'}}(\tau) \cdot e^{\frac{i}{\hbar}(\varepsilon+i\eta)t} = -\frac{i}{\hbar} (\varepsilon + i\eta) \tilde{\mathcal{G}}_{n_{j\bar{\sigma}} c_{\mathbf{k}\chi\sigma} d_{j'\sigma'}}(\varepsilon) \tag{A.117}$$

$$\begin{aligned}
 \int_{-\infty}^{+\infty} dt \left\{ \delta(\tau) Z_e^{-1} \sum_n \dots \right\} \cdot e^{\frac{i}{\hbar}(\varepsilon+i\eta)t} &= \langle n | \left[n_{j\bar{\sigma}}(0) c_{\mathbf{k}\chi\sigma}(0), d_{j'\sigma'}^\dagger(0) \right]_+ | n \rangle \\
 &= \langle n | \left[n_{j\bar{\sigma}} c_{\mathbf{k}\chi\sigma}, d_{j'\sigma'}^\dagger \right]_+ | n \rangle \\
 &= \langle n | \left(n_{j\bar{\sigma}} c_{\mathbf{k}\chi\sigma} d_{j'\sigma'}^\dagger + d_{j'\sigma'}^\dagger n_{j\bar{\sigma}} c_{\mathbf{k}\chi\sigma} \right) | n \rangle \\
 &= \langle n | \left\{ n_{j\bar{\sigma}} \left(-d_{j'\sigma'}^\dagger c_{\mathbf{k}\chi\sigma} \right) + d_{j'\sigma'}^\dagger n_{j\bar{\sigma}} c_{\mathbf{k}\chi\sigma} \right\} | n \rangle \\
 &= \langle n | \left\{ -n_{j\bar{\sigma}} d_{j'\sigma'}^\dagger c_{\mathbf{k}\chi\sigma} + d_{j'\sigma'}^\dagger n_{j\bar{\sigma}} c_{\mathbf{k}\chi\sigma} \right\} | n \rangle \\
 &= \langle n | \left\{ -n_{j\bar{\sigma}} d_{j'\sigma'}^\dagger + d_{j'\sigma'}^\dagger n_{j\bar{\sigma}} \right\} c_{\mathbf{k}\chi\sigma} | n \rangle \\
 &= \langle n | \left[d_{j'\sigma'}^\dagger, n_{j\bar{\sigma}} \right] c_{\mathbf{k}\chi\sigma} | n \rangle \\
 &= \langle n | -\delta_{jj'} \delta_{\bar{\sigma}\sigma'} d_{j\bar{\sigma}}^\dagger c_{\mathbf{k}\chi\sigma} | n \rangle \\
 &= -\delta_{jj'} \delta_{\bar{\sigma}\sigma'} \langle n | d_{j\bar{\sigma}}^\dagger c_{\mathbf{k}\chi\sigma} | n \rangle \\
 &= -\left\langle d_{j\bar{\sigma}}^\dagger c_{\mathbf{k}\chi\sigma} \right\rangle \delta_{jj'} \delta_{\bar{\sigma}\sigma'} \tag{A.118}
 \end{aligned}$$

Therefore,

$$\begin{aligned}
 (\varepsilon + i\eta) \tilde{\mathcal{G}}_{n_j \bar{\sigma} c_{\mathbf{k}\chi\sigma} d_{l\sigma'}}(\varepsilon) &= \langle c_{\mathbf{k}\chi\sigma} d_{j\bar{\sigma}}^\dagger \rangle \delta_{jl} \delta_{\bar{\sigma}\sigma'} \\
 &+ \chi (k_+^X \delta_{\sigma\downarrow} + k_{z+}^X \delta_{\sigma\uparrow}) \tilde{\mathcal{G}}_{n_j \bar{\sigma} c_{\mathbf{k}\chi\uparrow} d_{l\sigma'}}(\varepsilon) \\
 &+ \chi (k_-^X \delta_{\sigma\uparrow} - k_{z-}^X \delta_{\sigma\downarrow}) \tilde{\mathcal{G}}_{n_j \bar{\sigma} c_{\mathbf{k}\chi\downarrow} d_{l\sigma'}}(\varepsilon) \\
 &+ \sum_{j'} V_{j'\mathbf{k}}^* \tilde{\mathcal{G}}_{n_j \bar{\sigma} d_{j'\sigma} d_{l\sigma'}}(\varepsilon)
 \end{aligned} \tag{A.125}$$

The $\tilde{\mathcal{G}}_{n_j \bar{\sigma} c_{\mathbf{k}\chi\sigma} d_{l\sigma}}(\varepsilon)$ is a general GF for spins σ . So, according to Eq. (A.125), the equation for $\tilde{\mathcal{G}}_{n_j \bar{\sigma} c_{\mathbf{k}\chi\uparrow} d_{l\sigma}}(\varepsilon)$ and $\tilde{\mathcal{G}}_{n_j \bar{\sigma} c_{\mathbf{k}\chi\downarrow} d_{l\sigma}}(\varepsilon)$ is similar to Eq. (A.125) but with $\sigma = \uparrow$ for $\tilde{\mathcal{G}}_{n_j \bar{\sigma} c_{\mathbf{k}\chi\uparrow} d_{l\sigma}}(\varepsilon)$ and $\sigma = \downarrow$ for $\tilde{\mathcal{G}}_{n_j \bar{\sigma} c_{\mathbf{k}\chi\downarrow} d_{l\sigma}}(\varepsilon)$.

For $\sigma = \uparrow$ and $\sigma' = \uparrow$

$$\begin{aligned}
 (\varepsilon + i\eta) \tilde{\mathcal{G}}_{n_j \downarrow c_{\mathbf{k}\chi\uparrow} d_{l\sigma'}}(\varepsilon) &= \langle c_{\mathbf{k}\chi\uparrow} d_{j\downarrow}^\dagger \rangle \delta_{jl} \delta_{\downarrow\sigma'} \\
 &+ [\chi (k_+^X \delta_{\uparrow\downarrow} + k_{z+}^X \delta_{\uparrow\uparrow})] \tilde{\mathcal{G}}_{n_j \downarrow c_{\mathbf{k}\chi\uparrow} d_{l\sigma'}}(\varepsilon) \\
 &+ [\chi (k_-^X \delta_{\uparrow\uparrow} - k_{z-}^X \delta_{\uparrow\downarrow})] \tilde{\mathcal{G}}_{n_j \downarrow c_{\mathbf{k}\chi\downarrow} d_{l\sigma'}}(\varepsilon) \\
 &+ \sum_{j'} V_{j'\mathbf{k}}^* \tilde{\mathcal{G}}_{n_j \downarrow d_{j'\uparrow} d_{l\sigma'}}(\varepsilon) \\
 &= \langle c_{\mathbf{k}\chi\uparrow} d_{j\downarrow}^\dagger \rangle \delta_{jl} \delta_{\downarrow\sigma'} + k_{z+}^X \tilde{\mathcal{G}}_{n_j \downarrow c_{\mathbf{k}\chi\uparrow} d_{l\sigma'}}(\varepsilon) + \chi k_-^X \tilde{\mathcal{G}}_{n_j \downarrow c_{\mathbf{k}\chi\downarrow} d_{l\sigma'}}(\varepsilon) \\
 &+ \sum_{j'} V_{j'\mathbf{k}}^* \tilde{\mathcal{G}}_{n_j \downarrow d_{j'\uparrow} d_{l\sigma'}}(\varepsilon) \\
 (\varepsilon + i\eta - \chi k_{z+}^X) \tilde{\mathcal{G}}_{n_j \downarrow c_{\mathbf{k}\chi\uparrow} d_{l\sigma'}}(\varepsilon) &= \langle c_{\mathbf{k}\chi\uparrow} d_{j\downarrow}^\dagger \rangle \delta_{jl} \delta_{\downarrow\sigma'} + \chi k_-^X \tilde{\mathcal{G}}_{n_j \downarrow c_{\mathbf{k}\chi\downarrow} d_{l\sigma'}}(\varepsilon) + \sum_{j'} V_{j'\mathbf{k}}^* \tilde{\mathcal{G}}_{n_j \downarrow d_{j'\uparrow} d_{l\sigma'}}(\varepsilon)
 \end{aligned} \tag{A.126}$$

Therefore $\tilde{\mathcal{G}}_{n_j \downarrow c_{\mathbf{k}\chi\uparrow} d_{l\sigma}}(\varepsilon)$ is described by

$$\tilde{\mathcal{G}}_{n_j \downarrow c_{\mathbf{k}\chi\uparrow} d_{l\sigma'}}(\varepsilon) = \frac{\langle c_{\mathbf{k}\chi\uparrow} d_{j\downarrow}^\dagger \rangle \delta_{jl} \delta_{\downarrow\sigma'}}{(\varepsilon + i\eta - \chi k_{z+}^X)} + \frac{\chi k_-^X \tilde{\mathcal{G}}_{n_j \downarrow c_{\mathbf{k}\chi\downarrow} d_{l\sigma'}}(\varepsilon)}{(\varepsilon + i\eta - \chi k_{z+}^X)} + \frac{\sum_{j'} V_{j'\mathbf{k}}^* \tilde{\mathcal{G}}_{n_j \downarrow d_{j'\uparrow} d_{l\sigma'}}(\varepsilon)}{(\varepsilon + i\eta - \chi k_{z+}^X)} \tag{A.127}$$

For $\sigma = \downarrow$ in Eq. (A.125)

$$\begin{aligned}
 (\varepsilon + i\eta) \tilde{\mathcal{G}}_{n_j \uparrow c_{\mathbf{k}\chi\downarrow} d_{l\sigma'}}(\varepsilon) &= \langle c_{\mathbf{k}\chi\downarrow} d_{j\uparrow}^\dagger \rangle \delta_{jl} \delta_{\uparrow\sigma'} \\
 &+ \chi (k_+^X \delta_{\downarrow\downarrow} + k_{z+}^X \delta_{\downarrow\uparrow}) \tilde{\mathcal{G}}_{n_j \uparrow c_{\mathbf{k}\chi\uparrow} d_{l\sigma'}}(\varepsilon) \\
 &+ \chi (k_-^X \delta_{\downarrow\uparrow} - k_{z-}^X \delta_{\downarrow\downarrow}) \tilde{\mathcal{G}}_{n_j \uparrow c_{\mathbf{k}\chi\downarrow} d_{l\sigma'}}(\varepsilon) \\
 &+ \sum_{j'} V_{j'\mathbf{k}}^* \tilde{\mathcal{G}}_{n_j \uparrow d_{j'\downarrow} d_{l\sigma'}}(\varepsilon) \\
 &= \langle c_{\mathbf{k}\chi\downarrow} d_{j\uparrow}^\dagger \rangle \delta_{jl} \delta_{\uparrow\sigma'} + \chi k_+^X \tilde{\mathcal{G}}_{n_j \uparrow c_{\mathbf{k}\chi\uparrow} d_{l\sigma'}}(\varepsilon) - \chi k_{z-}^X \tilde{\mathcal{G}}_{n_j \uparrow c_{\mathbf{k}\chi\downarrow} d_{l\sigma'}}(\varepsilon) + \sum_{j'} V_{j'\mathbf{k}}^* \tilde{\mathcal{G}}_{n_j \uparrow d_{j'\downarrow} d_{l\sigma'}}(\varepsilon) \\
 (\varepsilon + i\eta + \chi k_{z-}^X) \tilde{\mathcal{G}}_{n_j \uparrow c_{\mathbf{k}\chi\downarrow} d_{l\sigma'}}(\varepsilon) &= \langle c_{\mathbf{k}\chi\downarrow} d_{j\uparrow}^\dagger \rangle \delta_{jl} \delta_{\uparrow\sigma'} + \chi k_+^X \tilde{\mathcal{G}}_{n_j \uparrow c_{\mathbf{k}\chi\uparrow} d_{l\sigma'}}(\varepsilon) + \sum_{j'} V_{j'\mathbf{k}}^* \tilde{\mathcal{G}}_{n_j \uparrow d_{j'\downarrow} d_{l\sigma'}}(\varepsilon)
 \end{aligned} \tag{A.128}$$

Therefore $\tilde{\mathcal{G}}_{n_j \uparrow c_{\mathbf{k}\chi\downarrow} d_{l\sigma}}(\varepsilon)$ is described by

$$\tilde{\mathcal{G}}_{n_j \uparrow c_{\mathbf{k}\chi\downarrow} d_{l\sigma'}}(\varepsilon) = \frac{\langle c_{\mathbf{k}\chi\downarrow} d_{j\uparrow}^\dagger \rangle \delta_{jl} \delta_{\uparrow\sigma'}}{(\varepsilon + i\eta + \chi k_{z-}^X)} + \frac{\chi k_+^X \tilde{\mathcal{G}}_{n_j \uparrow c_{\mathbf{k}\chi\uparrow} d_{l\sigma'}}(\varepsilon)}{(\varepsilon + i\eta + \chi k_{z-}^X)} + \frac{\sum_{j'} V_{j'\mathbf{k}}^* \tilde{\mathcal{G}}_{n_j \uparrow d_{j'\downarrow} d_{l\sigma'}}(\varepsilon)}{(\varepsilon + i\eta + \chi k_{z-}^X)} \tag{A.129}$$

Let us take a look in the two GFs

$$\tilde{\mathcal{G}}_{n_{j\downarrow}c_{\mathbf{k}\chi\uparrow}d_{l\sigma'}}(\varepsilon) = \frac{\langle c_{\mathbf{k}\chi\uparrow}d_{j\downarrow}^\dagger \rangle \delta_{jl}\delta_{\downarrow\sigma'}}{(\varepsilon + i\eta - \chi k_{z+}^\chi)} + \frac{\chi k_{z+}^\chi \tilde{\mathcal{G}}_{n_{j\downarrow}c_{\mathbf{k}\chi\downarrow}d_{l\sigma'}}(\varepsilon)}{(\varepsilon + i\eta - \chi k_{z+}^\chi)} + \frac{\sum_{j'} V_{j'\mathbf{k}}^* \tilde{\mathcal{G}}_{n_{j\downarrow}d_{j'\uparrow}d_{l\sigma'}}(\varepsilon)}{(\varepsilon + i\eta - \chi k_{z+}^\chi)} \quad (\text{A.130})$$

$$\tilde{\mathcal{G}}_{n_{j\uparrow}c_{\mathbf{k}\chi\downarrow}d_{l\sigma'}}(\varepsilon) = \frac{\langle c_{\mathbf{k}\chi\downarrow}d_{j\uparrow}^\dagger \rangle \delta_{jl}\delta_{\uparrow\sigma'}}{(\varepsilon + i\eta + \chi k_{z-}^\chi)} + \frac{\chi k_{z-}^\chi \tilde{\mathcal{G}}_{n_{j\uparrow}c_{\mathbf{k}\chi\uparrow}d_{l\sigma'}}(\varepsilon)}{(\varepsilon + i\eta + \chi k_{z-}^\chi)} + \frac{\sum_{j'} V_{j'\mathbf{k}}^* \tilde{\mathcal{G}}_{n_{j\uparrow}d_{j'\downarrow}d_{l\sigma'}}(\varepsilon)}{(\varepsilon + i\eta + \chi k_{z-}^\chi)} \quad (\text{A.131})$$

As we can see in Eq. (A.98) we just need GF with the same spin, in other words $\sigma' = \sigma$. Thus

$$\tilde{\mathcal{G}}_{n_{j\downarrow}c_{\mathbf{k}\chi\uparrow}d_{l\uparrow}}(\varepsilon) = \frac{\langle c_{\mathbf{k}\chi\uparrow}d_{j\downarrow}^\dagger \rangle \delta_{jl}\delta_{\downarrow\uparrow}}{(\varepsilon + i\eta - \chi k_{z+}^\chi)} + \frac{\chi k_{z+}^\chi \tilde{\mathcal{G}}_{n_{j\downarrow}c_{\mathbf{k}\chi\downarrow}d_{l\uparrow}}(\varepsilon)}{(\varepsilon + i\eta - \chi k_{z+}^\chi)} + \frac{\sum_{j'} V_{j'\mathbf{k}}^* \tilde{\mathcal{G}}_{n_{j\downarrow}d_{j'\uparrow}d_{l\uparrow}}(\varepsilon)}{(\varepsilon + i\eta - \chi k_{z+}^\chi)} \quad (\text{A.132})$$

$$\tilde{\mathcal{G}}_{n_{j\uparrow}c_{\mathbf{k}\chi\downarrow}d_{l\downarrow}}(\varepsilon) = \frac{\langle c_{\mathbf{k}\chi\downarrow}d_{j\uparrow}^\dagger \rangle \delta_{jl}\delta_{\uparrow\downarrow}}{(\varepsilon + i\eta + \chi k_{z-}^\chi)} + \frac{\chi k_{z-}^\chi \tilde{\mathcal{G}}_{n_{j\uparrow}c_{\mathbf{k}\chi\uparrow}d_{l\downarrow}}(\varepsilon)}{(\varepsilon + i\eta + \chi k_{z-}^\chi)} + \frac{\sum_{j'} V_{j'\mathbf{k}}^* \tilde{\mathcal{G}}_{n_{j\uparrow}d_{j'\downarrow}d_{l\downarrow}}(\varepsilon)}{(\varepsilon + i\eta + \chi k_{z-}^\chi)} \quad (\text{A.133})$$

Therefore,

$$\tilde{\mathcal{G}}_{n_{j\downarrow}c_{\mathbf{k}\chi\uparrow}d_{l\uparrow}}(\varepsilon) = \frac{\chi k_{z+}^\chi \tilde{\mathcal{G}}_{n_{j\downarrow}c_{\mathbf{k}\chi\downarrow}d_{l\uparrow}}(\varepsilon)}{(\varepsilon + i\eta - \chi k_{z+}^\chi)} + \frac{\sum_{j'} V_{j'\mathbf{k}}^* \tilde{\mathcal{G}}_{n_{j\downarrow}d_{j'\uparrow}d_{l\uparrow}}(\varepsilon)}{(\varepsilon + i\eta - \chi k_{z+}^\chi)} \quad (\text{A.134})$$

$$\tilde{\mathcal{G}}_{n_{j\uparrow}c_{\mathbf{k}\chi\downarrow}d_{l\downarrow}}(\varepsilon) = \frac{\chi k_{z-}^\chi \tilde{\mathcal{G}}_{n_{j\uparrow}c_{\mathbf{k}\chi\uparrow}d_{l\downarrow}}(\varepsilon)}{(\varepsilon + i\eta + \chi k_{z-}^\chi)} + \frac{\sum_{j'} V_{j'\mathbf{k}}^* \tilde{\mathcal{G}}_{n_{j\uparrow}d_{j'\downarrow}d_{l\downarrow}}(\varepsilon)}{(\varepsilon + i\eta + \chi k_{z-}^\chi)} \quad (\text{A.135})$$

Observe that it is impossible to make substitutions between these two GFs. For this reason, we are not going to calculate $\tilde{\mathcal{G}}_{n_{j\sigma}c_{\mathbf{k}\chi\sigma}d_{l\sigma'}}(\varepsilon)$ as well.

A.4.3.1 Calculation of $\tilde{\mathcal{G}}_{n_{j\sigma}c_{\mathbf{k}\chi\sigma}d_{l\sigma'}}(\varepsilon)$

According to Eq. (A.86)

$$\mathcal{G}_{n_{j\sigma}c_{\mathbf{k}\chi\sigma}d_{l\sigma'}}(\tau) = -\frac{i}{\hbar}\theta(\tau)Z_e^{-1}\sum_n e^{-\beta E_n}\langle n|\left[n_{j\sigma}(\tau)c_{\mathbf{k}\chi\sigma}(\tau),d_{l\sigma'}^\dagger(0)\right]_+|n\rangle \quad (\text{A.136})$$

Deriving the Eq. (A.136)

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial\tau}\mathcal{G}_{n_{j\sigma}c_{\mathbf{k}\chi\sigma}d_{l\sigma'}}(\tau) &= \frac{\partial}{\partial\tau}\left\{-\frac{i}{\hbar}\theta(\tau)Z_e^{-1}\sum_n e^{-\beta E_n}\langle n|\left[n_{j\sigma}(\tau)c_{\mathbf{k}\chi\sigma}(\tau),d_{l\sigma'}^\dagger(0)\right]_+|n\rangle\right\} \\ &= -\frac{i}{\hbar}\delta(\tau)Z_e^{-1}\sum_n e^{-\beta E_n}\langle n|\left[n_{j\sigma}(\tau)c_{\mathbf{k}\chi\sigma}(\tau),d_{l\sigma'}^\dagger(0)\right]_+|n\rangle \\ &+ \left(-\frac{i}{\hbar}\right)\theta(\tau)Z_e^{-1}\sum_n e^{-\beta E_n}\langle n|\left[\frac{\partial}{\partial\tau}\{n_{j\sigma}(\tau)c_{\mathbf{k}\chi\sigma}(\tau)\},d_{l\sigma'}^\dagger(0)\right]_+|n\rangle \end{aligned} \quad (\text{A.137})$$

Using the Heisenberg equation to calculate $\frac{\partial}{\partial \tau} n_{j\sigma}(\tau) c_{\mathbf{k}\chi\sigma}(\tau)$

$$\begin{aligned}
 i\hbar \frac{\partial}{\partial \tau} n_{j\sigma}(\tau) c_{\mathbf{k}\chi\sigma}(\tau) &= [n_{j\sigma} c_{\mathbf{k}\chi\sigma}, \mathcal{H}_{Wncs}] \\
 &= [n_{j\sigma} c_{\mathbf{k}\chi\sigma}, \mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_{tun} + \mathcal{H}_{imp} + \mathcal{H}_{hyb} + \mathcal{H}_U] \\
 &= [n_{j\sigma} c_{\mathbf{k}\chi\sigma}, \mathcal{H}_0] + [n_{j\sigma} c_{\mathbf{k}\chi\sigma}, \mathcal{H}_{tun}] + [n_{j\sigma} c_{\mathbf{k}\chi\sigma}, \mathcal{H}_{imp}] + [n_{j\sigma} c_{\mathbf{k}\chi\sigma}, \mathcal{H}_{hyb}] + [n_{j\sigma} c_{\mathbf{k}\chi\sigma}, \mathcal{H}_U] \\
 &= \left[n_{j\sigma} c_{\mathbf{k}\chi\sigma}, \left\{ \sum_{\mathbf{q}\chi'} \chi' q_{z+}^\chi c_{\mathbf{q}\chi'\uparrow}^\dagger c_{\mathbf{q}\chi'\uparrow} + \sum_{\mathbf{q}\chi'} \chi' q_{z-}^\chi c_{\mathbf{q}\chi'\uparrow}^\dagger c_{\mathbf{q}\chi'\downarrow} + \sum_{\mathbf{q}\chi'} \chi' q_{z+}^\chi c_{\mathbf{q}\chi'\downarrow}^\dagger c_{\mathbf{q}\chi'\uparrow} - \sum_{\mathbf{q}\chi'} \chi' q_{z-}^\chi c_{\mathbf{q}\chi'\downarrow}^\dagger c_{\mathbf{q}\chi'\downarrow} \right\} \right] \\
 &+ \left[n_{j\sigma} c_{\mathbf{k}\chi\sigma}, \left(- \sum_{j'\sigma'} t d_{j'\sigma'}^\dagger d_{j'\sigma'} \right) \right] + \left[n_{j\sigma} c_{\mathbf{k}\chi\sigma}, \sum_{j'\sigma'} \varepsilon_{j'\sigma'} d_{j'\sigma'}^\dagger d_{j'\sigma'} \right] \\
 &+ \left[n_{j\sigma} c_{\mathbf{k}\chi\sigma}, \sum_{j'\mathbf{q}\sigma'\chi'} \left(V_{j'\mathbf{q}} d_{j'\sigma'}^\dagger c_{\mathbf{q}\chi'\sigma'} + V_{j'\mathbf{k}}^* c_{\mathbf{q}\chi'\sigma'}^\dagger d_{j'\sigma'} \right) \right] + \left[n_{j\sigma} c_{\mathbf{k}\chi\sigma}, \sum_{j'} U_j d_{j'\uparrow}^\dagger d_{j'\uparrow} d_{j'\downarrow}^\dagger d_{j'\downarrow} \right] \\
 &= \sum_{\mathbf{q}\chi'} \chi' q_{z+}^\chi \left[c_{\mathbf{k}\chi\sigma}, c_{\mathbf{q}\chi'\uparrow}^\dagger c_{\mathbf{q}\chi'\uparrow} \right] + \sum_{\mathbf{q}\chi'} \chi' q_{z-}^\chi \left[c_{\mathbf{k}\chi\sigma}, c_{\mathbf{q}\chi'\uparrow}^\dagger c_{\mathbf{q}\chi'\downarrow} \right] + \sum_{\mathbf{q}\chi'} \chi' q_{z+}^\chi \left[c_{\mathbf{k}\chi\sigma}, c_{\mathbf{q}\chi'\downarrow}^\dagger c_{\mathbf{q}\chi'\uparrow} \right] \\
 &+ (-1) \sum_{\mathbf{q}\chi'} \chi' q_{z-}^\chi \left[c_{\mathbf{k}\chi\sigma}, c_{\mathbf{q}\chi'\downarrow}^\dagger c_{\mathbf{q}\chi'\downarrow} \right] - \sum_{j'\sigma'} t \left[n_{j\sigma} c_{\mathbf{k}\chi\sigma}, d_{j'\sigma'}^\dagger d_{j'\sigma'} \right] + \sum_{j'\sigma'} \varepsilon_{j'\sigma'} \left[n_{j\sigma} c_{\mathbf{k}\chi\sigma}, d_{j'\sigma'}^\dagger d_{j'\sigma'} \right] \\
 &+ \sum_{j'\mathbf{q}\sigma'\chi'} V_{j'\mathbf{q}} \left[n_{j\sigma} c_{\mathbf{k}\chi\sigma}, d_{j'\sigma'}^\dagger c_{\mathbf{q}\chi'\sigma'} \right] + \sum_{j'\mathbf{q}\sigma'\chi'} V_{j'\mathbf{q}}^* \left[n_{j\sigma} c_{\mathbf{k}\chi\sigma}, c_{\mathbf{q}\chi'\sigma'}^\dagger d_{j'\sigma'} \right] \\
 &+ \sum_{j'} U_j \left[n_{j\sigma} c_{\mathbf{k}\chi\sigma}, d_{j'\uparrow}^\dagger d_{j'\uparrow} d_{j'\downarrow}^\dagger d_{j'\downarrow} \right] \tag{A.138}
 \end{aligned}$$

Now, we are going to solve term by term separately using Eq. (A.78-A.81) when it is convenient. Let us start by the terms come from \mathcal{H}_0 .

Observe that the first four terms in Eq. (A.138) can be rewrite in a general way as $\sum_{\mathbf{q}\chi'} \gamma_{\mathbf{q}\chi'} \left[n_{j\sigma} c_{\mathbf{k}\chi\sigma}, c_{\mathbf{q}\chi'\sigma_A}^\dagger c_{\mathbf{q}\chi'\sigma_B} \right]$, which ($\gamma_{\mathbf{q}\chi'} = \chi' q_{z+}^\chi, \chi' q_{z-}^\chi, \chi' q_{z+}^\chi$ or $\chi' q_{z-}^\chi$), ($\sigma_A = \uparrow$ or \downarrow) and ($\sigma_B = \uparrow$ or \downarrow). So to make it easy to solve the Heisenberg equation above, we are going to solve a general term $\sum_{\mathbf{q}\chi'} \gamma_{\mathbf{q}\chi'} \left[n_{j\sigma} c_{\mathbf{k}\chi\sigma}, c_{\mathbf{q}\chi'\sigma_A}^\dagger c_{\mathbf{q}\chi'\sigma_B} \right]$

$$\begin{aligned}
 \sum_{\mathbf{q}\chi'} \gamma_{\mathbf{q}\chi'} \left[n_{j\sigma} c_{\mathbf{k}\chi\sigma}, c_{\mathbf{q}\chi'\sigma_A}^\dagger c_{\mathbf{q}\chi'\sigma_B} \right] &= \sum_{\mathbf{q}\chi'} \gamma_{\mathbf{q}\chi'} \left(n_{j\sigma} c_{\mathbf{k}\chi\sigma} c_{\mathbf{q}\chi'\sigma_A}^\dagger c_{\mathbf{q}\chi'\sigma_B} - c_{\mathbf{q}\chi'\sigma_A}^\dagger c_{\mathbf{q}\chi'\sigma_B} n_{j\sigma} c_{\mathbf{k}\chi\sigma} \right) \\
 &= \sum_{\mathbf{q}\chi'} \gamma_{\mathbf{q}\chi'} \left(n_{j\sigma} c_{\mathbf{k}\chi\sigma} c_{\mathbf{q}\chi'\sigma_A}^\dagger c_{\mathbf{q}\chi'\sigma_B} - n_{j\sigma} c_{\mathbf{q}\chi'\sigma_A}^\dagger c_{\mathbf{q}\chi'\sigma_B} c_{\mathbf{k}\chi\sigma} \right) \\
 &= \sum_{\mathbf{q}\chi'} \gamma_{\mathbf{q}\chi'} n_{j\sigma} \left[\left(\delta_{\mathbf{k}\mathbf{q}} \delta_{\chi\chi'} \delta_{\sigma\sigma_A} - c_{\mathbf{q}\chi'\sigma_A}^\dagger c_{\mathbf{k}\chi\sigma} \right) c_{\mathbf{q}\chi'\sigma_B} - c_{\mathbf{q}\chi'\sigma_A}^\dagger c_{\mathbf{q}\chi'\sigma_B} c_{\mathbf{k}\chi\sigma} \right] \\
 &= \sum_{\mathbf{q}\chi'} \gamma_{\mathbf{q}\chi'} n_{j\sigma} \left\{ \delta_{\mathbf{k}\mathbf{q}} \delta_{\chi\chi'} \delta_{\sigma\sigma_A} c_{\mathbf{q}\chi'\sigma_B} - c_{\mathbf{q}\chi'\sigma_A}^\dagger (c_{\mathbf{k}\chi\sigma} c_{\mathbf{q}\chi'\sigma_B} + c_{\mathbf{q}\chi'\sigma_B} c_{\mathbf{k}\chi\sigma}) \right\} \\
 &= \sum_{\mathbf{q}\chi'} \gamma_{\mathbf{q}\chi'} n_{j\sigma} \left\{ \delta_{\mathbf{k}\mathbf{q}} \delta_{\chi\chi'} \delta_{\sigma\sigma_A} c_{\mathbf{q}\chi'\sigma_B} - c_{\mathbf{q}\chi'\sigma_A}^\dagger [c_{\mathbf{k}\chi\sigma}, c_{\mathbf{q}\chi'\sigma_B}]_+ \right\} \\
 &= \sum_{\mathbf{q}\chi'} \gamma_{\mathbf{q}\chi'} n_{j\sigma} \left\{ \delta_{\mathbf{k}\mathbf{q}} \delta_{\chi\chi'} \delta_{\sigma\sigma_A} c_{\mathbf{q}\chi'\sigma_B} - c_{\mathbf{q}\chi'\sigma_A}^\dagger \cdot 0 \right\} \\
 &= \sum_{\mathbf{q}\chi'} \gamma_{\mathbf{q}\chi'} n_{j\sigma} \delta_{\mathbf{k}\mathbf{q}} \delta_{\chi\chi'} \delta_{\sigma\sigma_A} c_{\mathbf{q}\chi'\sigma_B} \\
 &= \sum_{\mathbf{k}'=\mathbf{k}} \sum_{\chi'=\chi} \gamma_{\mathbf{k}\chi} n_{j\sigma} \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}} \delta_{\chi\chi} \delta_{\sigma\sigma_A} c_{\mathbf{k}\chi\sigma_B} \\
 &= \gamma_{\mathbf{k}\chi} \delta_{\sigma\sigma_A} n_{j\sigma} c_{\mathbf{k}\chi\sigma_B} \tag{A.139}
 \end{aligned}$$

Therefore,

$$\sum_{\mathbf{k}'\chi} \chi' q_{z+}^{\chi} \left[n_{j\sigma} c_{\mathbf{k}\chi\sigma}, c_{\mathbf{k}'\chi\uparrow}^{\dagger} c_{\mathbf{k}'\chi\uparrow} \right] = \chi k_{z+}^{\chi} \delta_{\sigma\uparrow} n_{j\sigma} c_{\mathbf{k}\chi\uparrow} \quad (\text{A.140})$$

$$\sum_{\mathbf{k}'\chi} \chi' q_{-}^{\chi} \left[n_{j\sigma} c_{\mathbf{k}\chi\sigma}, c_{\mathbf{k}'\chi\uparrow}^{\dagger} c_{\mathbf{k}'\chi\downarrow} \right] = \chi k_{-}^{\chi} \delta_{\sigma\uparrow} n_{j\sigma} c_{\mathbf{k}\chi\downarrow} \quad (\text{A.141})$$

$$\sum_{\mathbf{k}'\chi} \chi' q_{+}^{\chi} \left[n_{j\sigma} c_{\mathbf{k}\chi\sigma}, c_{\mathbf{k}'\chi\downarrow}^{\dagger} c_{\mathbf{k}'\chi\uparrow} \right] = \chi k_{+}^{\chi} \delta_{\sigma\downarrow} n_{j\sigma} c_{\mathbf{k}\chi\uparrow} \quad (\text{A.142})$$

$$\sum_{\mathbf{k}'\chi} \chi' q_{z-}^{\chi} \left[n_{j\sigma} c_{\mathbf{k}\chi\sigma}, c_{\mathbf{k}'\chi\downarrow}^{\dagger} c_{\mathbf{k}'\chi\downarrow} \right] = \chi k_{z-}^{\chi} \delta_{\sigma\downarrow} n_{j\sigma} c_{\mathbf{k}\chi\downarrow} \quad (\text{A.143})$$

Now, for the term with t (using the properties used in eq. [A.78-A.81])

$$\begin{aligned} \sum_{j'\sigma'} t \left[n_{j\sigma} c_{\mathbf{k}\chi\sigma}, d_{j'\sigma'}^{\dagger} d_{\bar{j}'\sigma'} \right] &= \sum_{j'\sigma'} t \left(n_{j\sigma} c_{\mathbf{k}\chi\sigma} d_{j'\sigma'}^{\dagger} d_{\bar{j}'\sigma'} - d_{j'\sigma'}^{\dagger} d_{\bar{j}'\sigma'} n_{j\sigma} c_{\mathbf{k}\chi\sigma} \right) \\ &= \sum_{j'\sigma'} t \left\{ n_{j\sigma} d_{j'\sigma'}^{\dagger} d_{\bar{j}'\sigma'} c_{\mathbf{k}\chi\sigma} - d_{j'\sigma'}^{\dagger} (n_{j\sigma} d_{\bar{j}'\sigma'} + \delta_{j\bar{j}} \delta_{\sigma\sigma'} d_{j\sigma}) c_{\mathbf{k}\chi\sigma} \right\} \\ &= \sum_{j'\sigma'} t \left\{ n_{j\sigma} d_{j'\sigma'}^{\dagger} d_{\bar{j}'\sigma'} c_{\mathbf{k}\chi\sigma} - d_{j'\sigma'}^{\dagger} n_{j\sigma} d_{\bar{j}'\sigma'} c_{\mathbf{k}\chi\sigma} - \delta_{j\bar{j}} \delta_{\sigma\sigma'} d_{j'\sigma'}^{\dagger} d_{j\sigma} c_{\mathbf{k}\chi\sigma} \right\} \\ &= \sum_{j'\sigma'} t \left\{ (n_{j\sigma} d_{j'\sigma'}^{\dagger} - d_{j'\sigma'}^{\dagger} n_{j\sigma}) d_{\bar{j}'\sigma'} c_{\mathbf{k}\chi\sigma} - \delta_{j\bar{j}} \delta_{\sigma\sigma'} d_{j'\sigma'}^{\dagger} d_{j\sigma} c_{\mathbf{k}\chi\sigma} \right\} \\ &= \sum_{j'\sigma'} t \left\{ [n_{j\sigma}, d_{j'\sigma'}^{\dagger}] d_{\bar{j}'\sigma'} c_{\mathbf{k}\chi\sigma} - \delta_{j\bar{j}} \delta_{\sigma\sigma'} d_{j'\sigma'}^{\dagger} d_{j\sigma} c_{\mathbf{k}\chi\sigma} \right\} \\ &= \sum_{j'\sigma'} t \left\{ \delta_{j\bar{j}} \delta_{\sigma\sigma'} d_{j\sigma}^{\dagger} d_{\bar{j}'\sigma'} c_{\mathbf{k}\chi\sigma} - \delta_{j\bar{j}} \delta_{\sigma\sigma'} d_{j'\sigma'}^{\dagger} d_{j\sigma} c_{\mathbf{k}\chi\sigma} \right\} \\ &= \sum_{j'=j} \sum_{\sigma'=\sigma} t \delta_{j\bar{j}} \delta_{\sigma\sigma} d_{j\sigma}^{\dagger} d_{\bar{j}\sigma} c_{\mathbf{k}\chi\sigma} - \sum_{j'=\bar{j}} \sum_{\sigma'=\sigma} t \delta_{j\bar{j}} \delta_{\sigma\sigma} d_{j\sigma}^{\dagger} d_{j\sigma} c_{\mathbf{k}\chi\sigma} \\ &= t d_{j\sigma}^{\dagger} d_{\bar{j}\sigma} c_{\mathbf{k}\chi\sigma} - t d_{j\sigma}^{\dagger} d_{j\sigma} c_{\mathbf{k}\chi\sigma} \\ &= t \left(c_{\mathbf{k}\chi\sigma} d_{j\sigma}^{\dagger} d_{\bar{j}\sigma} - c_{\mathbf{k}\chi\sigma} d_{j\sigma}^{\dagger} d_{j\sigma} \right) \end{aligned} \quad (\text{A.144})$$

Now, for the term with $\varepsilon_{j'\sigma'}$

$$\begin{aligned}
 \sum_{j'\sigma'} \varepsilon_{j'\sigma'} \left[n_{j\sigma} c_{\mathbf{k}\chi\sigma}, d_{j'\sigma'}^\dagger, d_{j'\sigma'} \right] &= \sum_{j'\sigma'} \varepsilon_{j'\sigma'} \left(n_{j\sigma} c_{\mathbf{k}\chi\sigma} d_{j'\sigma'}^\dagger d_{j'\sigma'} - d_{j'\sigma'}^\dagger d_{j'\sigma'} n_{j\sigma} c_{\mathbf{k}\chi\sigma} \right) \\
 &= \sum_{j'\sigma'} \varepsilon_{j'\sigma'} \left(n_{j\sigma} d_{j'\sigma'}^\dagger d_{j'\sigma'} c_{\mathbf{k}\chi\sigma} - d_{j'\sigma'}^\dagger d_{j'\sigma'} n_{j\sigma} c_{\mathbf{k}\chi\sigma} \right) \\
 &= \sum_{j'\sigma'} \varepsilon_{j'\sigma'} \left\{ n_{j\sigma} d_{j'\sigma'}^\dagger d_{j'\sigma'} - d_{j'\sigma'}^\dagger (\delta_{jj'} \delta_{\sigma\sigma'} d_{j\sigma} + n_{j\sigma} d_{j'\sigma'}) \right\} c_{\mathbf{k}\chi\sigma} \\
 &= - \sum_{j'\sigma'} \varepsilon_{j'\sigma'} \delta_{jj'} \delta_{\sigma\sigma'} d_{j'\sigma'}^\dagger d_{j\sigma} c_{\mathbf{k}\chi\sigma} \\
 &+ \sum_{j'\sigma'} \varepsilon_{j'\sigma'} \left\{ n_{j\sigma} d_{j'\sigma'}^\dagger - d_{j'\sigma'}^\dagger n_{j\sigma} \right\} d_{j'\sigma'} c_{\mathbf{k}\chi\sigma} \\
 &= - \sum_{j'\sigma'} \varepsilon_{j'\sigma'} \delta_{jj'} \delta_{\sigma\sigma'} d_{j'\sigma'}^\dagger d_{j\sigma} c_{\mathbf{k}\chi\sigma} \\
 &+ \sum_{j'\sigma'} \varepsilon_{j'\sigma'} \left[n_{j\sigma}, d_{j'\sigma'}^\dagger \right] d_{j'\sigma'} c_{\mathbf{k}\chi\sigma} \\
 &= - \sum_{j'\sigma'} \varepsilon_{j'\sigma'} \delta_{jj'} \delta_{\sigma\sigma'} d_{j'\sigma'}^\dagger d_{j\sigma} c_{\mathbf{k}\chi\sigma} \\
 &+ \sum_{j'\sigma'} \varepsilon_{j'\sigma'} \delta_{jj'} \delta_{\sigma\sigma'} d_{j'\sigma'}^\dagger d_{j\sigma} c_{\mathbf{k}\chi\sigma} \\
 &= \sum_{j'\sigma'} \varepsilon_{j'\sigma'} \delta_{jj'} \delta_{\sigma\sigma'} \left(-d_{j'\sigma'}^\dagger d_{j\sigma} + d_{j\sigma}^\dagger d_{j'\sigma'} \right) c_{\mathbf{k}\chi\sigma} \\
 &= \sum_{j'=j} \sum_{\sigma'=\sigma} \varepsilon_{j\sigma} \delta_{jj} \delta_{\sigma\sigma} \left(-\cancel{d_{j\sigma}^\dagger d_{j\sigma}} + \cancel{d_{j\sigma}^\dagger d_{j\sigma}} \right) c_{\mathbf{k}\chi\sigma} \\
 &= 0
 \end{aligned}$$

Now, solving the two terms with V_{jq} in Eq. (A.138)

$$\begin{aligned}
 \sum_{j'q\sigma'\chi'} V_{j'q} \left[n_{j\sigma} c_{\mathbf{k}\chi\sigma}, d_{j'\sigma'}^\dagger, c_{q\chi'\sigma'} \right] &= \sum_{j'q\sigma'\chi'} V_{j'q} \left(n_{j\sigma} c_{\mathbf{k}\chi\sigma} d_{j'\sigma'}^\dagger c_{q\chi'\sigma'} - d_{j'\sigma'}^\dagger c_{q\chi'\sigma'} n_{j\sigma} c_{\mathbf{k}\chi\sigma} \right) \\
 &= \sum_{j'q\sigma'\chi'} V_{j'q} \left\{ n_{j\sigma} \left(-d_{j'\sigma'}^\dagger c_{\mathbf{k}\chi\sigma} \right) c_{q\chi'\sigma'} - d_{j'\sigma'}^\dagger n_{j\sigma} c_{q\chi'\sigma'} c_{\mathbf{k}\chi\sigma} \right\} \\
 &= \sum_{j'q\sigma'\chi'} V_{j'q} \left\{ -n_{j\sigma} d_{j'\sigma'}^\dagger c_{\mathbf{k}\chi\sigma} c_{q\chi'\sigma'} - d_{j'\sigma'}^\dagger n_{j\sigma} \left(-c_{\mathbf{k}\chi\sigma} c_{q\chi'\sigma'} \right) \right\} \\
 &= \sum_{j'q\sigma'\chi'} V_{j'q} \left\{ -n_{j\sigma} d_{j'\sigma'}^\dagger c_{\mathbf{k}\chi\sigma} c_{q\chi'\sigma'} - d_{j'\sigma'}^\dagger n_{j\sigma} \left(-c_{\mathbf{k}\chi\sigma} c_{q\chi'\sigma'} \right) \right\} \\
 &= \sum_{j'q\sigma'\chi'} V_{j'q} \left\{ -n_{j\sigma} d_{j'\sigma'}^\dagger + d_{j'\sigma'}^\dagger n_{j\sigma} \right\} c_{\mathbf{k}\chi\sigma} c_{q\chi'\sigma'} \\
 &= \sum_{j'q\sigma'\chi'} V_{j'q} \left[d_{j'\sigma'}^\dagger, n_{j\sigma} \right] c_{\mathbf{k}\chi\sigma} c_{q\chi'\sigma'} \\
 &= \sum_{j'q\sigma'\chi'} V_{j'q} \left(-\delta_{jj'} \delta_{\sigma\sigma'} d_{j\sigma}^\dagger \right) c_{\mathbf{k}\chi\sigma} c_{q\chi'\sigma'} \\
 &= - \sum_{q\chi'} \sum_{j'=j} \sum_{\sigma'=\sigma} V_{jq} \delta_{jj} \delta_{\sigma\sigma} d_{j\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\chi\sigma} c_{q\chi'\sigma} \\
 &= - \sum_{q\chi'} V_{jq} d_{j\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\chi\sigma} c_{q\chi'\sigma} \\
 &= \sum_{q\chi'} V_{jq} d_{j\sigma}^\dagger c_{q\chi'\sigma} c_{\mathbf{k}\chi\sigma}
 \end{aligned} \tag{A.145}$$

$$\begin{aligned}
 \sum_{j'q\sigma'\chi'} V_{j'q}^* \left[n_{j\sigma} c_{\mathbf{k}\chi\sigma}, c_{\mathbf{q}\chi'\sigma'}^\dagger d_{j'\sigma'} \right] &= \sum_{j'q\sigma'\chi'} V_{j'q}^* \left(n_{j\sigma} c_{\mathbf{k}\chi\sigma} c_{\mathbf{q}\chi'\sigma'}^\dagger d_{j'\sigma'} - c_{\mathbf{q}\chi'\sigma'}^\dagger d_{j'\sigma'} n_{j\sigma} c_{\mathbf{k}\chi\sigma} \right) \\
 &= \sum_{j'q\sigma'\chi'} V_{j'q}^* \left\{ c_{\mathbf{k}\chi\sigma} c_{\mathbf{q}\chi'\sigma'}^\dagger n_{j\sigma} d_{j'\sigma'} - c_{\mathbf{q}\chi'\sigma'}^\dagger (-c_{\mathbf{k}\chi\sigma} d_{j'\sigma'} n_{j\sigma}) \right\} \\
 &= \sum_{j'q\sigma'\chi'} V_{j'q}^* \left\{ \left(\delta_{\mathbf{k}\mathbf{q}} \delta_{\chi\chi'} \delta_{\sigma\sigma'} - c_{\mathbf{q}\chi'\sigma'}^\dagger c_{\mathbf{k}\chi\sigma} \right) n_{j\sigma} d_{j'\sigma'} + c_{\mathbf{q}\chi'\sigma'}^\dagger c_{\mathbf{k}\chi\sigma} d_{j'\sigma'} n_{j\sigma} \right\} \\
 &= \sum_{j'q\sigma'\chi'} V_{j'q}^* \delta_{\mathbf{k}\mathbf{q}} \delta_{\chi\chi'} \delta_{\sigma\sigma'} n_{j\sigma} d_{j'\sigma'} \\
 &+ \sum_{j'q\sigma'\chi'} V_{j'q}^* \left\{ -c_{\mathbf{q}\chi'\sigma'}^\dagger c_{\mathbf{k}\chi\sigma} n_{j\sigma} d_{j'\sigma'} + c_{\mathbf{q}\chi'\sigma'}^\dagger c_{\mathbf{k}\chi\sigma} d_{j'\sigma'} n_{j\sigma} \right\} \\
 &= \sum_{j'q\sigma'\chi'} V_{j'q}^* \delta_{\mathbf{k}\mathbf{q}} \delta_{\chi\chi'} \delta_{\sigma\sigma'} n_{j\sigma} d_{j'\sigma'} \\
 &+ \sum_{j'q\sigma'\chi'} V_{j'q}^* c_{\mathbf{q}\chi'\sigma'}^\dagger c_{\mathbf{k}\chi\sigma} (-n_{j\sigma} d_{j'\sigma'} + d_{j'\sigma'} n_{j\sigma}) \\
 &= \sum_{j'q\sigma'\chi'} V_{j'q}^* \delta_{\mathbf{k}\mathbf{q}} \delta_{\chi\chi'} \delta_{\sigma\sigma'} n_{j\sigma} d_{j'\sigma'} \\
 &+ \sum_{j'q\sigma'\chi'} V_{j'q}^* c_{\mathbf{q}\chi'\sigma'}^\dagger c_{\mathbf{k}\chi\sigma} [d_{j'\sigma'}, n_{j\sigma}] \\
 &= \sum_{j'q\sigma'\chi'} V_{j'q}^* \delta_{\mathbf{k}\mathbf{q}} \delta_{\chi\chi'} \delta_{\sigma\sigma'} n_{j\sigma} d_{j'\sigma'} \\
 &+ \sum_{j'q\sigma'\chi'} V_{j'q}^* c_{\mathbf{q}\chi'\sigma'}^\dagger c_{\mathbf{k}\chi\sigma} \delta_{jj'} \delta_{\sigma\sigma'} d_{j\sigma} \\
 &= \sum_{j'} \sum_{\mathbf{k}=\mathbf{k}} \sum_{\sigma'=\sigma} \sum_{\chi'=\chi} V_{j'q}^* \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}} \delta_{\chi\chi} \delta_{\sigma\sigma} n_{j\sigma} d_{j'\sigma} \\
 &+ \sum_{\mathbf{q}\chi'} \sum_{j'=j} \sum_{\sigma'=\sigma} V_{j'q}^* \delta_{jj} \delta_{\sigma\sigma} c_{\mathbf{q}\chi'\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\chi\sigma} d_{j\sigma} \\
 &= \sum_{j'} V_{j'q}^* n_{j\sigma} d_{j'\sigma} + \sum_{\mathbf{q}\chi'} V_{j'q}^* c_{\mathbf{q}\chi'\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\chi\sigma} d_{j\sigma}
 \end{aligned} \tag{A.146}$$

Now for the term with $U_{j'}$

$$\begin{aligned}
 \sum_{j'} U_{j'} \left[n_{j\sigma} c_{\mathbf{k}\chi\sigma}, d_{j'\uparrow}^\dagger d_{j'\uparrow} d_{j'\downarrow}^\dagger d_{j'\downarrow} \right] &= \sum_{j'} U_{j'} [n_{j\sigma} c_{\mathbf{k}\chi\sigma}, n_{j'\uparrow} n_{j'\downarrow}] \\
 &= \sum_{j'} U_{j'} \{ n_{j\sigma} c_{\mathbf{k}\chi\sigma} n_{j'\uparrow} n_{j'\downarrow} - n_{j'\uparrow} n_{j'\downarrow} n_{j\sigma} c_{\mathbf{k}\chi\sigma} \} \\
 &= \sum_{j'} U_{j'} \{ n_{j\sigma} n_{j'\uparrow} n_{j'\downarrow} c_{\mathbf{k}\chi\sigma} - n_{j'\uparrow} n_{j'\downarrow} n_{j\sigma} c_{\mathbf{k}\chi\sigma} \} \\
 &= \sum_{j'} U_{j'} \{ n_{j\sigma} n_{j'\uparrow} n_{j'\downarrow} - n_{j'\uparrow} n_{j'\downarrow} n_{j\sigma} \} c_{\mathbf{k}\chi\sigma} \\
 &= \sum_{j'} U_{j'} \left\{ n_{j\sigma} n_{j'\uparrow} n_{j'\downarrow} - n_{j'\uparrow} \left[\delta_{jj'} \delta_{\downarrow\sigma} \left(d_{j'\downarrow}^\dagger d_{j\sigma} - d_{j\sigma}^\dagger d_{j'\downarrow} \right) + n_{j\sigma} n_{j'\downarrow} \right] \right\} c_{\mathbf{k}\chi\sigma}
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 &= - \sum_{j'} U_{j'} \delta_{jj'} \delta_{\downarrow\sigma} n_{j'\uparrow} \left(d_{j'\downarrow}^\dagger d_{j\sigma} - d_{j\sigma}^\dagger d_{j'\downarrow} \right) c_{\mathbf{k}\chi\sigma} + \sum_{j'} U_{j'} \{ n_{j\sigma} n_{j'\uparrow} n_{j'\downarrow} - n_{j'\uparrow} n_{j\sigma} n_{j'\downarrow} \} c_{\mathbf{k}\chi\sigma} \\
 &= - \sum_{j'} U_{j'} \delta_{jj'} \delta_{\downarrow\sigma} n_{j'\uparrow} \left(d_{j'\downarrow}^\dagger d_{j\sigma} - d_{j\sigma}^\dagger d_{j'\downarrow} \right) c_{\mathbf{k}\chi\sigma} + \sum_{j'} U_{j'} \{ n_{j\sigma} n_{j'\uparrow} - n_{j'\uparrow} n_{j\sigma} \} n_{j'\downarrow} c_{\mathbf{k}\chi\sigma} \\
 &= - \sum_{j'} U_{j'} \delta_{jj'} \delta_{\downarrow\sigma} n_{j'\uparrow} \left(d_{j'\downarrow}^\dagger d_{j\sigma} - d_{j\sigma}^\dagger d_{j'\downarrow} \right) c_{\mathbf{k}\chi\sigma} + \sum_{j'} U_{j'} [n_{j\sigma}, n_{j'\uparrow}] n_{j'\downarrow} c_{\mathbf{k}\chi\sigma} \\
 &= - \sum_{j'} U_{j'} \delta_{jj'} \delta_{\downarrow\sigma} n_{j'\uparrow} \left(d_{j'\downarrow}^\dagger d_{j\sigma} - d_{j\sigma}^\dagger d_{j'\downarrow} \right) c_{\mathbf{k}\chi\sigma} + \sum_{j'} U_{j'} \delta_{jj'} \delta_{\sigma\uparrow} \left(d_{j\sigma}^\dagger d_{j'\uparrow} - d_{j'\uparrow}^\dagger d_{j\sigma} \right) n_{j'\downarrow} c_{\mathbf{k}\chi\sigma} \\
 &= - \sum_{j'=j} U_j \delta_{jj} \delta_{\downarrow\sigma} n_{j\uparrow} \left(d_{j\downarrow}^\dagger d_{j\sigma} - d_{j\sigma}^\dagger d_{j\downarrow} \right) c_{\mathbf{k}\chi\sigma} + \sum_{j'=j} U_j \delta_{jj} \delta_{\sigma\uparrow} \left(d_{j\sigma}^\dagger d_{j\uparrow} - d_{j\uparrow}^\dagger d_{j\sigma} \right) n_{j'\downarrow} c_{\mathbf{k}\chi\sigma} \\
 &= -U_j \delta_{\downarrow\sigma} n_{j\uparrow} \left(d_{j\downarrow}^\dagger d_{j\sigma} - d_{j\sigma}^\dagger d_{j\downarrow} \right) c_{\mathbf{k}\chi\sigma} + U_j \delta_{\sigma\uparrow} \left(d_{j\sigma}^\dagger d_{j\uparrow} - d_{j\uparrow}^\dagger d_{j\sigma} \right) n_{j'\downarrow} c_{\mathbf{k}\chi\sigma}
 \end{aligned} \tag{A.147}$$

Let us analyze the two cases

$$\begin{array}{l|l}
 \text{For } \sigma = \uparrow & \text{For } \sigma = \downarrow \\
 \begin{aligned}
 &= -U_j \delta_{\downarrow\sigma} n_{j\uparrow} \left(d_{j\downarrow}^\dagger d_{j\sigma} - d_{j\sigma}^\dagger d_{j\downarrow} \right) c_{\mathbf{k}\chi\sigma} \\
 &+ U_j \delta_{\sigma\uparrow} \left(d_{j\sigma}^\dagger d_{j\uparrow} - d_{j\uparrow}^\dagger d_{j\sigma} \right) n_{j'\downarrow} c_{\mathbf{k}\chi\sigma} \\
 &= -U_j \delta_{\sigma\sigma} n_{j\sigma} \left(d_{j\sigma}^\dagger d_{j\sigma} - d_{j\sigma}^\dagger d_{j\sigma} \right) c_{\mathbf{k}\chi\sigma} \\
 &+ U_j \delta_{\sigma\sigma} \left(d_{j\sigma}^\dagger d_{j\sigma} - d_{j\sigma}^\dagger d_{j\sigma} \right) n_{j'\sigma} c_{\mathbf{k}\chi\sigma} \\
 &= 0
 \end{aligned} & \begin{aligned}
 &= -U_j \delta_{\downarrow\sigma} n_{j\uparrow} \left(d_{j\downarrow}^\dagger d_{j\sigma} - d_{j\sigma}^\dagger d_{j\downarrow} \right) c_{\mathbf{k}\chi\sigma} \\
 &+ U_j \delta_{\sigma\uparrow} \left(d_{j\sigma}^\dagger d_{j\uparrow} - d_{j\uparrow}^\dagger d_{j\sigma} \right) n_{j'\downarrow} c_{\mathbf{k}\chi\sigma} \\
 &= -U_j \delta_{\sigma\sigma} n_{j\sigma} \left(d_{j\sigma}^\dagger d_{j\sigma} - d_{j\sigma}^\dagger d_{j\sigma} \right) c_{\mathbf{k}\chi\sigma} \\
 &+ U_j \delta_{\sigma\sigma} \left(d_{j\sigma}^\dagger d_{j\sigma} - d_{j\sigma}^\dagger d_{j\sigma} \right) n_{j'\sigma} c_{\mathbf{k}\chi\sigma} \\
 &= 0
 \end{aligned}
 \end{array}$$

Therefore, no matter what is the value of σ the result will be the same

$$\sum_{j'} U_{j'} \left[n_{j\sigma} c_{\mathbf{k}\chi\sigma}, d_{j'\uparrow}^\dagger d_{j'\uparrow} d_{j'\downarrow}^\dagger d_{j'\downarrow} \right] = 0 \tag{A.148}$$

Substituting them in Eq. (A.138)

$$\begin{aligned}
 i\hbar \frac{\partial}{\partial \tau} n_{j\sigma}(\tau) c_{\mathbf{k}\chi\sigma}(\tau) &= \chi k_{z+}^\chi \delta_{\sigma\uparrow} n_{j\sigma} c_{\mathbf{k}\chi\uparrow} + \chi k_{z-}^\chi \delta_{\sigma\uparrow} n_{j\sigma} c_{\mathbf{k}\chi\downarrow} + \chi k_{z+}^\chi \delta_{\sigma\downarrow} n_{j\sigma} c_{\mathbf{k}\chi\uparrow} - \chi k_{z-}^\chi \delta_{\sigma\downarrow} n_{j\sigma} c_{\mathbf{k}\chi\downarrow} \\
 &- t \left(c_{\mathbf{k}\chi\sigma} d_{j\sigma}^\dagger d_{j\sigma} - c_{\mathbf{k}\chi\sigma} d_{j\sigma}^\dagger d_{j\sigma} \right) + \sum_{\mathbf{q}\chi'} V_{j\mathbf{q}} d_{j\sigma}^\dagger c_{\mathbf{q}\chi'\sigma} c_{\mathbf{k}\chi\sigma} \\
 &+ \sum_{j'} V_{j'\mathbf{k}}^* n_{j\sigma} d_{j'\sigma} + \sum_{\mathbf{q}\chi'} V_{j\mathbf{q}}^* c_{\mathbf{q}\chi'\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\chi\sigma} d_{j\sigma} \\
 \frac{\partial}{\partial \tau} n_{j\sigma}(\tau) c_{\mathbf{k}\chi\sigma}(\tau) &= -\frac{i}{\hbar} \chi k_{z+}^\chi \delta_{\sigma\uparrow} n_{j\sigma} c_{\mathbf{k}\chi\uparrow} - \frac{i}{\hbar} \chi k_{z-}^\chi \delta_{\sigma\uparrow} n_{j\sigma} c_{\mathbf{k}\chi\downarrow} - \frac{i}{\hbar} \chi k_{z+}^\chi \delta_{\sigma\downarrow} n_{j\sigma} c_{\mathbf{k}\chi\uparrow} + \frac{i}{\hbar} \chi k_{z-}^\chi \delta_{\sigma\downarrow} n_{j\sigma} c_{\mathbf{k}\chi\downarrow} \\
 &+ \frac{i}{\hbar} t c_{\mathbf{k}\chi\sigma} d_{j\sigma}^\dagger d_{j\sigma} - \frac{i}{\hbar} t c_{\mathbf{k}\chi\sigma} d_{j\sigma}^\dagger d_{j\sigma} - \frac{i}{\hbar} \sum_{\mathbf{q}\chi'} V_{j\mathbf{q}} d_{j\sigma}^\dagger c_{\mathbf{q}\chi'\sigma} c_{\mathbf{k}\chi\sigma} \\
 &+ \left(-\frac{i}{\hbar} \right) \sum_{j'} V_{j'\mathbf{k}}^* n_{j\sigma} d_{j'\sigma} - \frac{i}{\hbar} \sum_{\mathbf{q}\chi'} V_{j\mathbf{q}}^* c_{\mathbf{q}\chi'\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\chi\sigma} d_{j\sigma}
 \end{aligned} \tag{A.149}$$

Substituting

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial}{\partial \tau} \mathcal{G}_{n_{j\sigma} c_{\mathbf{k}\chi\sigma} d_{l\sigma'}}(\tau) &= -\frac{i}{\hbar} \delta(\tau) Z_e^{-1} \sum_n e^{-\beta E_n} \langle n | \left[n_{j\sigma}(\tau) c_{\mathbf{k}\chi\sigma}(\tau), d_{l\sigma'}^\dagger(0) \right]_+ | n \rangle \\
 &+ \left(-\frac{i}{\hbar} \right) \theta(\tau) Z_e^{-1} \sum_n e^{-\beta E_n} \langle n | \left[\frac{\partial}{\partial \tau} \{ n_{j\sigma}(\tau) c_{\mathbf{k}\chi\sigma}(\tau) \}, d_{l\sigma'}^\dagger(0) \right]_+ | n \rangle \\
 &= -\frac{i}{\hbar} \delta(\tau) Z_e^{-1} \sum_n e^{-\beta E_n} \langle n | \left[n_{j\sigma}(\tau) c_{\mathbf{k}\chi\sigma}(\tau), d_{l\sigma'}^\dagger(0) \right]_+ | n \rangle \\
 &+ \left(-\frac{i}{\hbar} \right) \theta(\tau) Z_e^{-1} \sum_n e^{-\beta E_n} \langle n | \left[\left\{ -\frac{i}{\hbar} \chi k_{z+}^\chi \delta_{\sigma\uparrow} n_{j\sigma} c_{\mathbf{k}\chi\uparrow} \right\}, d_{l\sigma'}^\dagger(0) \right]_+ | n \rangle \\
 &+ \left(-\frac{i}{\hbar} \right) \theta(\tau) Z_e^{-1} \sum_n e^{-\beta E_n} \langle n | \left[\left\{ -\frac{i}{\hbar} \chi k_{z-}^\chi \delta_{\sigma\uparrow} n_{j\sigma} c_{\mathbf{k}\chi\downarrow} \right\}, d_{l\sigma'}^\dagger(0) \right]_+ | n \rangle \\
 &+ \left(-\frac{i}{\hbar} \right) \theta(\tau) Z_e^{-1} \sum_n e^{-\beta E_n} \langle n | \left[\left\{ -\frac{i}{\hbar} \chi k_{z+}^\chi \delta_{\sigma\downarrow} n_{j\sigma} c_{\mathbf{k}\chi\uparrow} \right\}, d_{l\sigma'}^\dagger(0) \right]_+ | n \rangle \\
 &+ \left(-\frac{i}{\hbar} \right) \theta(\tau) Z_e^{-1} \sum_n e^{-\beta E_n} \langle n | \left[\left\{ \frac{i}{\hbar} \chi k_{z-}^\chi \delta_{\sigma\downarrow} n_{j\sigma} c_{\mathbf{k}\chi\downarrow} \right\}, d_{l\sigma'}^\dagger(0) \right]_+ | n \rangle \\
 &+ \left(-\frac{i}{\hbar} \right) \theta(\tau) Z_e^{-1} \sum_n e^{-\beta E_n} \langle n | \left[\left\{ \frac{i}{\hbar} t c_{\mathbf{k}\chi\sigma} d_{j\sigma}^\dagger d_{j\sigma} \right\}, d_{l\sigma'}^\dagger(0) \right]_+ | n \rangle \\
 &+ \left(-\frac{i}{\hbar} \right) \theta(\tau) Z_e^{-1} \sum_n e^{-\beta E_n} \langle n | \left[\left\{ -\frac{i}{\hbar} t c_{\mathbf{k}\chi\sigma} d_{j\sigma}^\dagger d_{j\sigma} \right\}, d_{l\sigma'}^\dagger(0) \right]_+ | n \rangle \\
 &+ \left(-\frac{i}{\hbar} \right) \theta(\tau) Z_e^{-1} \sum_n e^{-\beta E_n} \langle n | \left[\left\{ -\frac{i}{\hbar} \sum_{\mathbf{q}\chi'} V_{j\mathbf{q}} d_{j\sigma}^\dagger c_{\mathbf{q}\chi'\sigma} c_{\mathbf{k}\chi\sigma} \right\}, d_{l\sigma'}^\dagger(0) \right]_+ | n \rangle \\
 &+ \left(-\frac{i}{\hbar} \right) \theta(\tau) Z_e^{-1} \sum_n e^{-\beta E_n} \langle n | \left[\left\{ -\frac{i}{\hbar} \sum_{j'} V_{j'\mathbf{k}}^* n_{j\sigma} d_{j'\sigma} \right\}, d_{l\sigma'}^\dagger(0) \right]_+ | n \rangle \\
 &+ \left(-\frac{i}{\hbar} \right) \theta(\tau) Z_e^{-1} \sum_n e^{-\beta E_n} \langle n | \left[\left\{ -\frac{i}{\hbar} \sum_{\mathbf{q}\chi'} V_{j\mathbf{q}}^* c_{\mathbf{q}\chi'\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\chi\sigma} d_{j\sigma} \right\}, d_{l\sigma'}^\dagger(0) \right]_+ | n \rangle
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 &= -\frac{i}{\hbar}\delta(\tau)Z_e^{-1}\sum_n e^{-\beta E_n}\langle n| [n_{j\sigma}(\tau)c_{\mathbf{k}\chi\sigma}(\tau), d_{l\sigma'}^\dagger(0)]_+ |n\rangle \\
 &+ \left(-\frac{i}{\hbar}\right)\chi k_{z+}^X \delta_{\sigma\uparrow} \left\{ -\frac{i}{\hbar}\theta(\tau)Z_e^{-1}\sum_n e^{-\beta E_n}\langle n| [n_{j\sigma}c_{\mathbf{k}\chi\uparrow}, d_{l\sigma'}^\dagger(0)]_+ |n\rangle \right\} \\
 &+ \left(-\frac{i}{\hbar}\right)\chi k_{z-}^X \delta_{\sigma\uparrow} \left\{ -\frac{i}{\hbar}\theta(\tau)Z_e^{-1}\sum_n e^{-\beta E_n}\langle n| [n_{j\sigma}c_{\mathbf{k}\chi\downarrow}, d_{l\sigma'}^\dagger(0)]_+ |n\rangle \right\} \\
 &+ \left(-\frac{i}{\hbar}\right)\chi k_{z+}^X \delta_{\sigma\downarrow} \left\{ -\frac{i}{\hbar}\theta(\tau)Z_e^{-1}\sum_n e^{-\beta E_n}\langle n| [n_{j\sigma}c_{\mathbf{k}\chi\uparrow}, d_{l\sigma'}^\dagger(0)]_+ |n\rangle \right\} \\
 &+ \frac{i}{\hbar}\chi k_{z-}^X \delta_{\sigma\downarrow} \left\{ -\frac{i}{\hbar}\theta(\tau)Z_e^{-1}\sum_n e^{-\beta E_n}\langle n| [n_{j\sigma}c_{\mathbf{k}\chi\downarrow}, d_{l\sigma'}^\dagger(0)]_+ |n\rangle \right\} \\
 &+ \frac{i}{\hbar}t \left\{ -\frac{i}{\hbar}\theta(\tau)Z_e^{-1}\sum_n e^{-\beta E_n}\langle n| [c_{\mathbf{k}\chi\sigma}d_{j\sigma}^\dagger d_{j\sigma}, d_{l\sigma'}^\dagger(0)]_+ |n\rangle \right\} \\
 &+ \left(-\frac{i}{\hbar}\right)t \left\{ -\frac{i}{\hbar}\theta(\tau)Z_e^{-1}\sum_n e^{-\beta E_n}\langle n| [c_{\mathbf{k}\chi\sigma}d_{j\sigma}^\dagger d_{j\sigma}, d_{l\sigma'}^\dagger(0)]_+ |n\rangle \right\} \\
 &+ \left(-\frac{i}{\hbar}\right)\sum_{\mathbf{q}\chi'} V_{j\mathbf{q}} \left\{ -\frac{i}{\hbar}\theta(\tau)Z_e^{-1}\sum_n e^{-\beta E_n}\langle n| [d_{j\sigma}^\dagger c_{\mathbf{q}\chi'\sigma} c_{\mathbf{k}\chi\sigma}, d_{l\sigma'}^\dagger(0)]_+ |n\rangle \right\} \\
 &+ \left(-\frac{i}{\hbar}\right)\sum_{j'} V_{j'\mathbf{k}}^* \left\{ -\frac{i}{\hbar}\theta(\tau)Z_e^{-1}\sum_n e^{-\beta E_n}\langle n| [n_{j\sigma}d_{j'\sigma}, d_{l\sigma'}^\dagger(0)]_+ |n\rangle \right\} \\
 &+ \left(-\frac{i}{\hbar}\right)\sum_{\mathbf{q}\chi'} V_{j\mathbf{q}}^* \left\{ -\frac{i}{\hbar}\theta(\tau)Z_e^{-1}\sum_n e^{-\beta E_n}\langle n| [c_{\mathbf{q}\chi'\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\chi\sigma} d_{j\sigma}, d_{l\sigma'}^\dagger(0)]_+ |n\rangle \right\} \\
 &= -\frac{i}{\hbar}\delta(\tau)Z_e^{-1}\sum_n e^{-\beta E_n}\langle n| [n_{j\sigma}(\tau)c_{\mathbf{k}\chi\sigma}(\tau), d_{l\sigma'}^\dagger(0)]_+ |n\rangle \\
 &+ \left(-\frac{i}{\hbar}\right)\chi k_{z+}^X \delta_{\sigma\uparrow} \mathcal{G}_{n_{j\sigma}c_{\mathbf{k}\chi\uparrow}d_{l\sigma'}}(\tau) - \frac{i}{\hbar}\chi k_{z-}^X \delta_{\sigma\uparrow} \mathcal{G}_{n_{j\sigma}c_{\mathbf{k}\chi\downarrow}d_{l\sigma'}}(\tau) - \frac{i}{\hbar}\chi k_{z+}^X \delta_{\sigma\downarrow} \mathcal{G}_{n_{j\sigma}c_{\mathbf{k}\chi\uparrow}d_{l\sigma'}}(\tau) \\
 &+ \frac{i}{\hbar}\chi k_{z-}^X \delta_{\sigma\downarrow} \mathcal{G}_{n_{j\sigma}c_{\mathbf{k}\chi\downarrow}d_{l\sigma'}}(\tau) + \frac{i}{\hbar}t \mathcal{G}_{c_{\mathbf{k}\chi\sigma}d_{j\sigma}^\dagger d_{j\sigma}d_{l\sigma'}}(\tau) - \frac{i}{\hbar}t \mathcal{G}_{c_{\mathbf{k}\chi\sigma}d_{j\sigma}^\dagger d_{j\sigma}d_{l\sigma'}}(\tau) \\
 &+ \left(-\frac{i}{\hbar}\right)\sum_{\mathbf{q}\chi'} V_{j\mathbf{q}} \mathcal{G}_{d_{j\sigma}^\dagger c_{\mathbf{q}\chi'\sigma} c_{\mathbf{k}\chi\sigma}d_{l\sigma'}}(\tau) - \frac{i}{\hbar}\sum_{j'} V_{j'\mathbf{k}}^* \mathcal{G}_{n_{j\sigma}d_{j'\sigma}d_{l\sigma'}}(\tau) - \frac{i}{\hbar}\sum_{\mathbf{q}\chi'} V_{j\mathbf{q}} \mathcal{G}_{c_{\mathbf{q}\chi'\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\chi\sigma}d_{j\sigma}d_{l\sigma'}}(\tau) \quad (\text{A.150})
 \end{aligned}$$

Therefore,

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial}{\partial\tau}\mathcal{G}_{n_{j\sigma}c_{\mathbf{k}\chi\sigma}d_{l\sigma'}}(\tau) &= -\frac{i}{\hbar}\delta(\tau)Z_e^{-1}\sum_n e^{-\beta E_n}\langle n| [n_{j\sigma}(\tau)c_{\mathbf{k}\chi\sigma}(\tau), d_{l\sigma'}^\dagger(0)]_+ |n\rangle \\
 &+ \left(-\frac{i}{\hbar}\right)\chi(k_{z+}^X \delta_{\sigma\downarrow} + k_{z+}^X \delta_{\sigma\uparrow}) \mathcal{G}_{n_{j\sigma}c_{\mathbf{k}\chi\uparrow}d_{l\sigma'}}(\tau) \\
 &+ \left(-\frac{i}{\hbar}\right)\chi(k_{z-}^X \delta_{\sigma\uparrow} - k_{z-}^X \delta_{\sigma\downarrow}) \mathcal{G}_{n_{j\sigma}c_{\mathbf{k}\chi\downarrow}d_{l\sigma'}}(\tau) \\
 &+ \frac{i}{\hbar}t \mathcal{G}_{c_{\mathbf{k}\chi\sigma}d_{j\sigma}^\dagger d_{j\sigma}d_{l\sigma'}}(\tau) - \frac{i}{\hbar}t \mathcal{G}_{c_{\mathbf{k}\chi\sigma}d_{j\sigma}^\dagger d_{j\sigma}d_{l\sigma'}}(\tau) - \frac{i}{\hbar}\sum_{\mathbf{q}\chi'} V_{j\mathbf{q}} \mathcal{G}_{d_{j\sigma}^\dagger c_{\mathbf{q}\chi'\sigma} c_{\mathbf{k}\chi\sigma}d_{l\sigma'}}(\tau) \\
 &+ \left(-\frac{i}{\hbar}\right)\sum_{j'} V_{j'\mathbf{k}}^* \mathcal{G}_{n_{j\sigma}d_{j'\sigma}d_{l\sigma'}}(\tau) - \frac{i}{\hbar}\sum_{\mathbf{q}\chi'} V_{j\mathbf{q}} \mathcal{G}_{c_{\mathbf{q}\chi'\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\chi\sigma}d_{j\sigma}d_{l\sigma'}}(\tau) \quad (\text{A.151})
 \end{aligned}$$

Integrating and multiplying both sides of Eq. (A.151) by $e^{\frac{i}{\hbar}(\varepsilon+i\eta)t}$,

$$\begin{aligned}
 \int_{-\infty}^{+\infty} dt \frac{\partial}{\partial \tau} \mathcal{G}_{n_{j\sigma} c_{\mathbf{k}\chi\sigma} d_{l\sigma'}}(\tau) \cdot e^{\frac{i}{\hbar}(\varepsilon+i\eta)t} &= \int_{-\infty}^{+\infty} dt \left\{ -\frac{i}{\hbar} \delta(\tau) Z_e^{-1} \sum_n e^{-\beta E_n} \langle n | \left[n_{j\sigma}(\tau) c_{\mathbf{k}\chi\sigma}(\tau), d_{l\sigma'}^\dagger(0) \right]_+ | n \rangle \right. \\
 &+ \left(-\frac{i}{\hbar} \right) \chi \left(k_+^X \delta_{\sigma\downarrow} + k_{z+}^X \delta_{\sigma\uparrow} \right) \mathcal{G}_{n_{j\sigma} c_{\mathbf{k}\chi\uparrow} d_{l\sigma'}}(\tau) \\
 &+ \left(-\frac{i}{\hbar} \right) \chi \left(k_-^X \delta_{\sigma\uparrow} - k_{z-}^X \delta_{\sigma\downarrow} \right) \mathcal{G}_{n_{j\sigma} c_{\mathbf{k}\chi\downarrow} d_{l\sigma'}}(\tau) \\
 &+ \frac{i}{\hbar} t \mathcal{G}_{c_{\mathbf{k}\chi\sigma} d_{j\sigma}^\dagger d_{j\sigma} d_{l\sigma'}}(\tau) - \frac{i}{\hbar} t \mathcal{G}_{c_{\mathbf{k}\chi\sigma} d_{j\sigma}^\dagger d_{j\sigma} d_{l\sigma'}}(\tau) - \frac{i}{\hbar} \sum_{\mathbf{q}\chi'} V_{j\mathbf{q}} \mathcal{G}_{d_{j\sigma}^\dagger c_{\mathbf{q}\chi'\sigma} c_{\mathbf{k}\chi\sigma} d_{l\sigma'}}(\tau) \\
 &+ \left. \left(-\frac{i}{\hbar} \right) \sum_{j'} V_{j'\mathbf{k}}^* \mathcal{G}_{n_{j\sigma} d_{j'\sigma} d_{l\sigma'}}(\tau) - \frac{i}{\hbar} \sum_{\mathbf{q}\chi'} V_{j\mathbf{q}}^* \mathcal{G}_{c_{\mathbf{q}\chi'\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\chi\sigma} d_{j\sigma} d_{l\sigma'}}(\tau) \right\} \cdot e^{\frac{i}{\hbar}(\varepsilon+i\eta)t} \\
 &= -\frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} dt \left\{ \delta(\tau) Z_e^{-1} \sum_n e^{-\beta E_n} \langle n | \left[n_{j\sigma}(\tau) c_{\mathbf{k}\chi\sigma}(\tau), d_{l\sigma'}^\dagger(0) \right]_+ | n \rangle \right\} \cdot e^{\frac{i}{\hbar}(\varepsilon+i\eta)t} \\
 &+ \left(-\frac{i}{\hbar} \right) \chi \left(k_+^X \delta_{\sigma\downarrow} + k_{z+}^X \delta_{\sigma\uparrow} \right) \tilde{\mathcal{G}}_{n_{j\sigma} c_{\mathbf{k}\chi\uparrow} d_{l\sigma'}}(\varepsilon) \\
 &+ \left(-\frac{i}{\hbar} \right) \chi \left(k_-^X \delta_{\sigma\uparrow} - k_{z-}^X \delta_{\sigma\downarrow} \right) \tilde{\mathcal{G}}_{n_{j\sigma} c_{\mathbf{k}\chi\downarrow} d_{l\sigma'}}(\varepsilon) \\
 &+ \frac{i}{\hbar} t \tilde{\mathcal{G}}_{c_{\mathbf{k}\chi\sigma} d_{j\sigma}^\dagger d_{j\sigma} d_{l\sigma'}}(\varepsilon) - \frac{i}{\hbar} t \tilde{\mathcal{G}}_{c_{\mathbf{k}\chi\sigma} d_{j\sigma}^\dagger d_{j\sigma} d_{l\sigma'}}(\varepsilon) - \frac{i}{\hbar} \sum_{\mathbf{q}\chi'} V_{j\mathbf{q}} \tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\sigma}^\dagger c_{\mathbf{q}\chi'\sigma} c_{\mathbf{k}\chi\sigma} d_{l\sigma'}}(\varepsilon) \\
 &+ \left. \left(-\frac{i}{\hbar} \right) \sum_{j'} V_{j'\mathbf{k}}^* \tilde{\mathcal{G}}_{n_{j\sigma} d_{j'\sigma} d_{l\sigma'}}(\varepsilon) - \frac{i}{\hbar} \sum_{\mathbf{q}\chi'} V_{j\mathbf{q}}^* \tilde{\mathcal{G}}_{c_{\mathbf{q}\chi'\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\chi\sigma} d_{j\sigma} d_{l\sigma'}}(\varepsilon) \right\} \quad (\text{A.152})
 \end{aligned}$$

Now,

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dt \frac{\partial}{\partial \tau} \mathcal{G}_{n_{j\sigma} c_{\mathbf{k}\chi\sigma} d_{j'\sigma'}}(\tau) \cdot e^{\frac{i}{\hbar}(\varepsilon+i\eta)t} = -\frac{i}{\hbar} (\varepsilon + i\eta) \tilde{\mathcal{G}}_{n_{j\sigma} c_{\mathbf{k}\chi\sigma} d_{j'\sigma'}}(\varepsilon) \quad (\text{A.153})$$

$$\begin{aligned}
 \int_{-\infty}^{+\infty} dt \left\{ \delta(\tau) Z_e^{-1} \sum_n \dots \right\} \cdot e^{\frac{i}{\hbar}(\varepsilon+i\eta)t} &= \langle n | \left[n_{j\sigma}(0) c_{\mathbf{k}\chi\sigma}(0), d_{j'\sigma'}^\dagger(0) \right]_+ | n \rangle \\
 &= \langle n | \left[n_{j\sigma} c_{\mathbf{k}\chi\sigma}, d_{j'\sigma'}^\dagger \right]_+ | n \rangle \\
 &= \langle n | \left(n_{j\sigma} c_{\mathbf{k}\chi\sigma} d_{j'\sigma'}^\dagger + d_{j'\sigma'}^\dagger n_{j\sigma} c_{\mathbf{k}\chi\sigma} \right) | n \rangle \\
 &= \langle n | \left\{ n_{j\sigma} \left(-d_{j'\sigma'}^\dagger c_{\mathbf{k}\chi\sigma} \right) + d_{j'\sigma'}^\dagger n_{j\sigma} c_{\mathbf{k}\chi\sigma} \right\} | n \rangle \\
 &= \langle n | \left\{ -n_{j\sigma} d_{j'\sigma'}^\dagger c_{\mathbf{k}\chi\sigma} + d_{j'\sigma'}^\dagger n_{j\sigma} c_{\mathbf{k}\chi\sigma} \right\} | n \rangle \\
 &= \langle n | \left\{ -n_{j\sigma} d_{j'\sigma'}^\dagger + d_{j'\sigma'}^\dagger n_{j\sigma} \right\} c_{\mathbf{k}\chi\sigma} | n \rangle \\
 &= \langle n | \left[d_{j'\sigma'}^\dagger, n_{j\sigma} \right] c_{\mathbf{k}\chi\sigma} | n \rangle \\
 &= \langle n | -\delta_{jj'} \delta_{\sigma\sigma'} d_{j\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\chi\sigma} | n \rangle \\
 &= -\delta_{jj'} \delta_{\sigma\sigma'} \langle n | d_{j\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\chi\sigma} | n \rangle \\
 &= -\left\langle d_{j\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\chi\sigma} \right\rangle \delta_{jj'} \delta_{\sigma\sigma'} \quad (\text{A.154})
 \end{aligned}$$

Therefore,

$$\begin{aligned}
 (\varepsilon + i\eta) \tilde{\mathcal{G}}_{n_j\sigma c_{\mathbf{k}\chi\sigma} d_{l\sigma'}}(\varepsilon) &= \langle c_{\mathbf{k}\chi\sigma} d_{j\sigma}^\dagger \rangle \delta_{jl} \delta_{\sigma\sigma'} \\
 &+ \chi (k_+^X \delta_{\sigma\downarrow} + k_{z+}^X \delta_{\sigma\uparrow}) \tilde{\mathcal{G}}_{n_j\sigma c_{\mathbf{k}\chi\uparrow} d_{l\sigma'}}(\varepsilon) \\
 &+ \chi (k_-^X \delta_{\sigma\uparrow} - k_{z-}^X \delta_{\sigma\downarrow}) \tilde{\mathcal{G}}_{n_j\sigma c_{\mathbf{k}\chi\downarrow} d_{l\sigma'}}(\varepsilon) \\
 &+ \sum_{j'} V_{j'\mathbf{k}}^* \tilde{\mathcal{G}}_{n_j\sigma d_{j'\sigma} d_{l\sigma'}}(\varepsilon)
 \end{aligned} \tag{A.161}$$

The $\tilde{\mathcal{G}}_{n_j\sigma c_{\mathbf{k}\chi\sigma} d_{l\sigma'}}(\varepsilon)$ is a general GF for spins σ . So, according to Eq. (A.161), the equation for $\tilde{\mathcal{G}}_{n_j\sigma c_{\mathbf{k}\chi\uparrow} d_{l\sigma'}}(\varepsilon)$ and $\tilde{\mathcal{G}}_{n_j\sigma c_{\mathbf{k}\chi\downarrow} d_{l\sigma'}}(\varepsilon)$ is similar to Eq. (A.161) but with $\sigma = \uparrow$ for $\tilde{\mathcal{G}}_{n_j\sigma c_{\mathbf{k}\chi\uparrow} d_{l\sigma'}}(\varepsilon)$ and $\sigma = \downarrow$ for $\tilde{\mathcal{G}}_{n_j\sigma c_{\mathbf{k}\chi\downarrow} d_{l\sigma'}}(\varepsilon)$.

For $\sigma = \uparrow$

$$\begin{aligned}
 (\varepsilon + i\eta) \tilde{\mathcal{G}}_{n_j\uparrow c_{\mathbf{k}\chi\uparrow} d_{l\sigma'}}(\varepsilon) &= \langle c_{\mathbf{k}\chi\uparrow} d_{j\uparrow}^\dagger \rangle \delta_{jl} \delta_{\uparrow\sigma'} \\
 &+ [\chi (k_+^X \delta_{\uparrow\downarrow} + k_{z+}^X \delta_{\uparrow\uparrow})] \tilde{\mathcal{G}}_{n_j\uparrow c_{\mathbf{k}\chi\uparrow} d_{l\sigma'}}(\varepsilon) \\
 &+ [\chi (k_-^X \delta_{\uparrow\uparrow} - k_{z-}^X \delta_{\uparrow\downarrow})] \tilde{\mathcal{G}}_{n_j\uparrow c_{\mathbf{k}\chi\downarrow} d_{l\sigma'}}(\varepsilon) \\
 &+ \sum_{j'} V_{j'\mathbf{k}}^* \tilde{\mathcal{G}}_{n_j\uparrow d_{j'\uparrow} d_{l\sigma'}}(\varepsilon) \\
 &= \langle c_{\mathbf{k}\chi\uparrow} d_{j\uparrow}^\dagger \rangle \delta_{jl} \delta_{\uparrow\sigma'} + k_{z+}^X \tilde{\mathcal{G}}_{n_j\uparrow c_{\mathbf{k}\chi\uparrow} d_{l\sigma'}}(\varepsilon) + \chi k_-^X \tilde{\mathcal{G}}_{n_j\uparrow c_{\mathbf{k}\chi\downarrow} d_{l\sigma'}}(\varepsilon) + \sum_{j'} V_{j'\mathbf{k}}^* \tilde{\mathcal{G}}_{n_j\uparrow d_{j'\uparrow} d_{l\sigma'}}(\varepsilon) \\
 (\varepsilon + i\eta - \chi k_{z+}^X) \tilde{\mathcal{G}}_{n_j\uparrow c_{\mathbf{k}\chi\uparrow} d_{l\sigma'}}(\varepsilon) &= \langle c_{\mathbf{k}\chi\uparrow} d_{j\uparrow}^\dagger \rangle \delta_{jl} \delta_{\uparrow\sigma'} + \chi k_-^X \tilde{\mathcal{G}}_{n_j\uparrow c_{\mathbf{k}\chi\downarrow} d_{l\sigma'}}(\varepsilon) + \sum_{j'} V_{j'\mathbf{k}}^* \tilde{\mathcal{G}}_{n_j\uparrow d_{j'\uparrow} d_{l\sigma'}}(\varepsilon)
 \end{aligned} \tag{A.162}$$

Therefore $\tilde{\mathcal{G}}_{n_j\uparrow c_{\mathbf{k}\chi\uparrow} d_{l\sigma'}}(\varepsilon)$ is described by

$$\tilde{\mathcal{G}}_{n_j\uparrow c_{\mathbf{k}\chi\uparrow} d_{l\sigma'}}(\varepsilon) = \frac{\langle c_{\mathbf{k}\chi\uparrow} d_{j\uparrow}^\dagger \rangle \delta_{jl} \delta_{\uparrow\sigma'}}{(\varepsilon + i\eta - \chi k_{z+}^X)} + \frac{\chi k_-^X \tilde{\mathcal{G}}_{n_j\uparrow c_{\mathbf{k}\chi\downarrow} d_{l\sigma'}}(\varepsilon)}{(\varepsilon + i\eta - \chi k_{z+}^X)} + \frac{\sum_{j'} V_{j'\mathbf{k}}^* \tilde{\mathcal{G}}_{n_j\uparrow d_{j'\uparrow} d_{l\sigma'}}(\varepsilon)}{(\varepsilon + i\eta - \chi k_{z+}^X)} \tag{A.163}$$

For $\sigma = \downarrow$ in Eq. (A.161)

$$\begin{aligned}
 (\varepsilon + i\eta) \tilde{\mathcal{G}}_{n_j\downarrow c_{\mathbf{k}\chi\downarrow} d_{l\sigma'}}(\varepsilon) &= \langle c_{\mathbf{k}\chi\downarrow} d_{j\downarrow}^\dagger \rangle \delta_{jl} \delta_{\downarrow\sigma'} \\
 &+ \chi (k_+^X \delta_{\downarrow\downarrow} + k_{z+}^X \delta_{\downarrow\uparrow}) \tilde{\mathcal{G}}_{n_j\downarrow c_{\mathbf{k}\chi\uparrow} d_{l\sigma'}}(\varepsilon) \\
 &+ \chi (k_-^X \delta_{\downarrow\uparrow} - k_{z-}^X \delta_{\downarrow\downarrow}) \tilde{\mathcal{G}}_{n_j\downarrow c_{\mathbf{k}\chi\downarrow} d_{l\sigma'}}(\varepsilon) \\
 &+ \sum_{j'} V_{j'\mathbf{k}}^* \tilde{\mathcal{G}}_{n_j\downarrow d_{j'\downarrow} d_{l\sigma'}}(\varepsilon) \\
 &= \langle c_{\mathbf{k}\chi\downarrow} d_{j\downarrow}^\dagger \rangle \delta_{jl} \delta_{\downarrow\sigma'} + \chi k_+^X \tilde{\mathcal{G}}_{n_j\downarrow c_{\mathbf{k}\chi\uparrow} d_{l\sigma'}}(\varepsilon) - \chi k_{z-}^X \tilde{\mathcal{G}}_{n_j\downarrow c_{\mathbf{k}\chi\downarrow} d_{l\sigma'}}(\varepsilon) + \sum_{j'} V_{j'\mathbf{k}}^* \tilde{\mathcal{G}}_{n_j\downarrow d_{j'\downarrow} d_{l\sigma'}}(\varepsilon) \\
 (\varepsilon + i\eta + \chi k_{z-}^X) \tilde{\mathcal{G}}_{n_j\downarrow c_{\mathbf{k}\chi\downarrow} d_{l\sigma'}}(\varepsilon) &= \langle c_{\mathbf{k}\chi\downarrow} d_{j\downarrow}^\dagger \rangle \delta_{jl} \delta_{\downarrow\sigma'} + \chi k_+^X \tilde{\mathcal{G}}_{n_j\downarrow c_{\mathbf{k}\chi\uparrow} d_{l\sigma'}}(\varepsilon) + \sum_{j'} V_{j'\mathbf{k}}^* \tilde{\mathcal{G}}_{n_j\downarrow d_{j'\downarrow} d_{l\sigma'}}(\varepsilon)
 \end{aligned} \tag{A.164}$$

Therefore $\tilde{\mathcal{G}}_{n_j\downarrow c_{\mathbf{k}\chi\downarrow} d_{l\sigma'}}(\varepsilon)$ is described by

$$\tilde{\mathcal{G}}_{n_j\downarrow c_{\mathbf{k}\chi\downarrow} d_{l\sigma'}}(\varepsilon) = \frac{\langle c_{\mathbf{k}\chi\downarrow} d_{j\downarrow}^\dagger \rangle \delta_{jl} \delta_{\downarrow\sigma'}}{(\varepsilon + i\eta + \chi k_{z-}^X)} + \frac{\chi k_+^X \tilde{\mathcal{G}}_{n_j\downarrow c_{\mathbf{k}\chi\uparrow} d_{l\sigma'}}(\varepsilon)}{(\varepsilon + i\eta + \chi k_{z-}^X)} + \frac{\sum_{j'} V_{j'\mathbf{k}}^* \tilde{\mathcal{G}}_{n_j\downarrow d_{j'\downarrow} d_{l\sigma'}}(\varepsilon)}{(\varepsilon + i\eta + \chi k_{z-}^X)} \tag{A.165}$$

Let us take a look in the two GFs

$$\tilde{\mathcal{G}}_{n_j \uparrow c_{\mathbf{k}\chi} \uparrow d_{l\sigma'}}(\varepsilon) = \frac{\langle c_{\mathbf{k}\chi} \uparrow d_{j\uparrow}^\dagger \rangle \delta_{jl} \delta_{\uparrow\sigma'}}{(\varepsilon + i\eta - \chi k_{z+}^X)} + \frac{\chi k_-^X \tilde{\mathcal{G}}_{n_j \uparrow c_{\mathbf{k}\chi} \downarrow d_{l\sigma'}}(\varepsilon)}{(\varepsilon + i\eta - \chi k_{z+}^X)} + \frac{\sum_{j'} V_{j'\mathbf{k}}^* \tilde{\mathcal{G}}_{n_j \uparrow d_{j'\uparrow} d_{l\sigma'}}(\varepsilon)}{(\varepsilon + i\eta - \chi k_{z+}^X)} \quad (\text{A.166})$$

$$\tilde{\mathcal{G}}_{n_j \downarrow c_{\mathbf{k}\chi} \downarrow d_{l\sigma'}}(\varepsilon) = \frac{\langle c_{\mathbf{k}\chi} \downarrow d_{j\downarrow}^\dagger \rangle \delta_{jl} \delta_{\downarrow\sigma'}}{(\varepsilon + i\eta + \chi k_{z-}^X)} + \frac{\chi k_+^X \tilde{\mathcal{G}}_{n_j \downarrow c_{\mathbf{k}\chi} \uparrow d_{l\sigma'}}(\varepsilon)}{(\varepsilon + i\eta + \chi k_{z-}^X)} + \frac{\sum_{j'} V_{j'\mathbf{k}}^* \tilde{\mathcal{G}}_{n_j \downarrow d_{j'\downarrow} d_{l\sigma'}}(\varepsilon)}{(\varepsilon + i\eta + \chi k_{z-}^X)} \quad (\text{A.167})$$

As we can see in Eq. [A.134-A.135] we just need $\tilde{\mathcal{G}}_{n_j \sigma c_{\mathbf{k}\chi} \sigma d_{l\sigma'}}(\varepsilon)$ with the opposite spin, in other words $\sigma' = \bar{\sigma}$. Thus

$$\tilde{\mathcal{G}}_{n_j \uparrow c_{\mathbf{k}\chi} \uparrow d_{l\downarrow}}(\varepsilon) = \frac{\langle c_{\mathbf{k}\chi} \uparrow d_{j\uparrow}^\dagger \rangle \delta_{jl} \delta_{\uparrow\downarrow}}{(\varepsilon + i\eta - \chi k_{z+}^X)} + \frac{\chi k_-^X \tilde{\mathcal{G}}_{n_j \uparrow c_{\mathbf{k}\chi} \downarrow d_{l\downarrow}}(\varepsilon)}{(\varepsilon + i\eta - \chi k_{z+}^X)} + \frac{\sum_{j'} V_{j'\mathbf{k}}^* \tilde{\mathcal{G}}_{n_j \uparrow d_{j'\uparrow} d_{l\downarrow}}(\varepsilon)}{(\varepsilon + i\eta - \chi k_{z+}^X)} \quad (\text{A.168})$$

$$\tilde{\mathcal{G}}_{n_j \downarrow c_{\mathbf{k}\chi} \downarrow d_{l\uparrow}}(\varepsilon) = \frac{\langle c_{\mathbf{k}\chi} \downarrow d_{j\downarrow}^\dagger \rangle \delta_{jl} \delta_{\downarrow\uparrow}}{(\varepsilon + i\eta + \chi k_{z-}^X)} + \frac{\chi k_+^X \tilde{\mathcal{G}}_{n_j \downarrow c_{\mathbf{k}\chi} \uparrow d_{l\uparrow}}(\varepsilon)}{(\varepsilon + i\eta + \chi k_{z-}^X)} + \frac{\sum_{j'} V_{j'\mathbf{k}}^* \tilde{\mathcal{G}}_{n_j \downarrow d_{j'\downarrow} d_{l\uparrow}}(\varepsilon)}{(\varepsilon + i\eta + \chi k_{z-}^X)} \quad (\text{A.169})$$

Therefore,

$$\tilde{\mathcal{G}}_{n_j \uparrow c_{\mathbf{k}\chi} \uparrow d_{l\downarrow}}(\varepsilon) = \frac{\chi k_-^X \tilde{\mathcal{G}}_{n_j \uparrow c_{\mathbf{k}\chi} \downarrow d_{l\downarrow}}(\varepsilon)}{(\varepsilon + i\eta - \chi k_{z+}^X)} + \frac{\sum_{j'} V_{j'\mathbf{k}}^* \tilde{\mathcal{G}}_{n_j \uparrow d_{j'\uparrow} d_{l\downarrow}}(\varepsilon)}{(\varepsilon + i\eta - \chi k_{z+}^X)} \quad (\text{A.170})$$

$$\tilde{\mathcal{G}}_{n_j \downarrow c_{\mathbf{k}\chi} \downarrow d_{l\uparrow}}(\varepsilon) = \frac{\chi k_+^X \tilde{\mathcal{G}}_{n_j \downarrow c_{\mathbf{k}\chi} \uparrow d_{l\uparrow}}(\varepsilon)}{(\varepsilon + i\eta + \chi k_{z-}^X)} + \frac{\sum_{j'} V_{j'\mathbf{k}}^* \tilde{\mathcal{G}}_{n_j \downarrow d_{j'\downarrow} d_{l\uparrow}}(\varepsilon)}{(\varepsilon + i\eta + \chi k_{z-}^X)} \quad (\text{A.171})$$

A.4.3.2 Grouping the $\tilde{\mathcal{G}}_{n_j \bar{\sigma} c_{\mathbf{k}\chi} \sigma d_{l\sigma'}}(\varepsilon)$

Let us recalling equation Eq. [A.134-A.135] and Eq. [A.171-A.171]

$$\tilde{\mathcal{G}}_{n_j \downarrow c_{\mathbf{k}\chi} \uparrow d_{l\uparrow}}(\varepsilon) = \frac{\chi k_-^X \tilde{\mathcal{G}}_{n_j \downarrow c_{\mathbf{k}\chi} \downarrow d_{l\uparrow}}(\varepsilon)}{(\varepsilon + i\eta - \chi k_{z+}^X)} + \frac{\sum_{j'} V_{j'\mathbf{k}}^* \tilde{\mathcal{G}}_{n_j \downarrow d_{j'\uparrow} d_{l\uparrow}}(\varepsilon)}{(\varepsilon + i\eta - \chi k_{z+}^X)} \quad (\text{A.172})$$

$$\tilde{\mathcal{G}}_{n_j \uparrow c_{\mathbf{k}\chi} \downarrow d_{l\downarrow}}(\varepsilon) = \frac{\chi k_+^X \tilde{\mathcal{G}}_{n_j \uparrow c_{\mathbf{k}\chi} \uparrow d_{l\downarrow}}(\varepsilon)}{(\varepsilon + i\eta + \chi k_{z-}^X)} + \frac{\sum_{j'} V_{j'\mathbf{k}}^* \tilde{\mathcal{G}}_{n_j \uparrow d_{j'\downarrow} d_{l\downarrow}}(\varepsilon)}{(\varepsilon + i\eta + \chi k_{z-}^X)} \quad (\text{A.173})$$

$$\tilde{\mathcal{G}}_{n_j \uparrow c_{\mathbf{k}\chi} \uparrow d_{l\downarrow}}(\varepsilon) = \frac{\chi k_-^X \tilde{\mathcal{G}}_{n_j \uparrow c_{\mathbf{k}\chi} \downarrow d_{l\downarrow}}(\varepsilon)}{(\varepsilon + i\eta - \chi k_{z+}^X)} + \frac{\sum_{j'} V_{j'\mathbf{k}}^* \tilde{\mathcal{G}}_{n_j \uparrow d_{j'\uparrow} d_{l\downarrow}}(\varepsilon)}{(\varepsilon + i\eta - \chi k_{z+}^X)} \quad (\text{A.174})$$

$$\tilde{\mathcal{G}}_{n_j \downarrow c_{\mathbf{k}\chi} \downarrow d_{l\uparrow}}(\varepsilon) = \frac{\chi k_+^X \tilde{\mathcal{G}}_{n_j \downarrow c_{\mathbf{k}\chi} \uparrow d_{l\uparrow}}(\varepsilon)}{(\varepsilon + i\eta + \chi k_{z-}^X)} + \frac{\sum_{j'} V_{j'\mathbf{k}}^* \tilde{\mathcal{G}}_{n_j \downarrow d_{j'\downarrow} d_{l\uparrow}}(\varepsilon)}{(\varepsilon + i\eta + \chi k_{z-}^X)} \quad (\text{A.175})$$

Now, substituting Eq. (A.171) in Eq. (A.134) and remembering the parameters in A.8,

$$\begin{aligned} \tilde{\mathcal{G}}_{n_j \downarrow c_{\mathbf{k}\chi} \uparrow d_{l\uparrow}}(\varepsilon) &= \frac{\chi k_-^X \tilde{\mathcal{G}}_{n_j \downarrow c_{\mathbf{k}\chi} \downarrow d_{l\uparrow}}(\varepsilon)}{\varepsilon + i\eta - \chi k_{z+}^X} + \frac{\sum_{j'} V_{j'\mathbf{k}}^* \tilde{\mathcal{G}}_{n_j \downarrow d_{j'\uparrow} d_{l\uparrow}}(\varepsilon)}{\varepsilon + i\eta - \chi k_{z+}^X} \\ &= \frac{\chi k_-^X}{\varepsilon + i\eta - \chi k_{z+}^X} \left\{ \frac{\chi k_+^X \tilde{\mathcal{G}}_{n_j \downarrow c_{\mathbf{k}\chi} \uparrow d_{l\uparrow}}(\varepsilon)}{\varepsilon + i\eta + \chi k_{z-}^X} + \frac{\sum_{j'} V_{j'\mathbf{k}}^* \tilde{\mathcal{G}}_{n_j \downarrow d_{j'\downarrow} d_{l\uparrow}}(\varepsilon)}{\varepsilon + i\eta + \chi k_{z-}^X} \right\} + \frac{\sum_{j'} V_{j'\mathbf{k}}^* \tilde{\mathcal{G}}_{n_j \downarrow d_{j'\uparrow} d_{l\uparrow}}(\varepsilon)}{\varepsilon + i\eta - \chi k_{z+}^X} \\ &= \frac{k_+^X k_-^X \tilde{\mathcal{G}}_{n_j \downarrow c_{\mathbf{k}\chi} \uparrow d_{l\uparrow}}(\varepsilon)}{\tilde{\varepsilon}_\chi^2 - (\hbar\nu_F k_z^X)^2} + \frac{\chi k_-^X \sum_{j'} V_{j'\mathbf{k}}^* \tilde{\mathcal{G}}_{n_j \downarrow d_{j'\downarrow} d_{l\uparrow}}(\varepsilon)}{\tilde{\varepsilon}_\chi^2 - (\hbar\nu_F k_z^X)^2} + \frac{\sum_{j'} V_{j'\mathbf{k}}^* \tilde{\mathcal{G}}_{n_j \downarrow d_{j'\uparrow} d_{l\uparrow}}(\varepsilon)}{\varepsilon + i\eta - \chi k_{z+}^X} \\ &= \frac{k_+^X k_-^X \tilde{\mathcal{G}}_{n_j \downarrow c_{\mathbf{k}\chi} \uparrow d_{l\uparrow}}(\varepsilon)}{\tilde{\varepsilon}_\chi^2 - (\hbar\nu_F k_z^X)^2} + \frac{\sum_{j'} V_{j'\mathbf{k}}^* \tilde{\mathcal{G}}_{n_j \downarrow d_{j'\uparrow} d_{l\uparrow}}(\varepsilon)}{\varepsilon + i\eta - \chi k_{z+}^X} + \frac{\chi k_-^X \sum_{j'} V_{j'\mathbf{k}}^* \tilde{\mathcal{G}}_{n_j \downarrow d_{j'\downarrow} d_{l\uparrow}}(\varepsilon)}{\tilde{\varepsilon}_\chi^2 - (\hbar\nu_F k_z^X)^2} \end{aligned} \quad (\text{A.176})$$

Factoring $\tilde{\mathcal{G}}_{n_{j\downarrow}c_{\mathbf{k}\chi\uparrow}d_{l\uparrow}}(\varepsilon)$

$$\begin{aligned}
 \left[1 - \frac{k_+^X k_-^X}{\tilde{\varepsilon}_\chi^2 - (\hbar\nu_F k_z^X)^2} \right] \tilde{\mathcal{G}}_{n_{j\downarrow}c_{\mathbf{k}\chi\uparrow}d_{l\uparrow}}(\varepsilon) &= \frac{\sum_{j'} V_{j'\mathbf{k}}^* \tilde{\mathcal{G}}_{n_{j\downarrow}d_{j'\uparrow}d_{l\uparrow}}(\varepsilon)}{\varepsilon + i\eta - \chi k_{z+}^X} \\
 &+ \frac{\chi k_-^X \sum_{j'} V_{j'\mathbf{k}}^* \tilde{\mathcal{G}}_{n_{j\downarrow}d_{j'\downarrow}d_{l\uparrow}}(\varepsilon)}{\tilde{\varepsilon}_\chi^2 - (\hbar\nu_F k_z^X)^2} \\
 \left[\frac{\tilde{\varepsilon}_\chi^2 - (\hbar\nu_F k_z^X)^2 - \hbar^2 \nu_F^2 \left[(k_x^X)^2 + (k_y^X)^2 \right]}{\tilde{\varepsilon}_\chi^2 - (\hbar\nu_F k_z^X)^2} \right] \tilde{\mathcal{G}}_{n_{j\downarrow}c_{\mathbf{k}\chi\uparrow}d_{l\uparrow}}(\varepsilon) &= \frac{\sum_{j'} V_{j'\mathbf{k}}^* \tilde{\mathcal{G}}_{n_{j\downarrow}d_{j'\uparrow}d_{l\uparrow}}(\varepsilon)}{\varepsilon + i\eta - \chi k_{z+}^X} \\
 &+ \frac{\chi k_-^X \sum_{j'} V_{j'\mathbf{k}}^* \tilde{\mathcal{G}}_{n_{j\downarrow}d_{j'\downarrow}d_{l\uparrow}}(\varepsilon)}{\tilde{\varepsilon}_\chi^2 - (\hbar\nu_F k_z^X)^2} \\
 \left[\frac{\tilde{\varepsilon}_\chi^2 - (\hbar\nu_F k_z^X)^2}{\tilde{\varepsilon}_\chi^2 - (\hbar\nu_F k_z^X)^2} \right] \tilde{\mathcal{G}}_{n_{j\downarrow}c_{\mathbf{k}\chi\uparrow}d_{l\uparrow}}(\varepsilon) &= \frac{\sum_{j'} V_{j'\mathbf{k}}^* \tilde{\mathcal{G}}_{n_{j\downarrow}d_{j'\uparrow}d_{l\uparrow}}(\varepsilon)}{\varepsilon + i\eta - \chi k_{z+}^X} \\
 &+ \frac{\chi k_-^X \sum_{j'} V_{j'\mathbf{k}}^* \tilde{\mathcal{G}}_{n_{j\downarrow}d_{j'\downarrow}d_{l\uparrow}}(\varepsilon)}{\tilde{\varepsilon}_\chi^2 - (\hbar\nu_F k_z^X)^2}
 \end{aligned} \tag{A.177}$$

Isolating $\tilde{\mathcal{G}}_{n_{j\downarrow}c_{\mathbf{k}\chi\uparrow}d_{l\uparrow}}(\varepsilon)$

$$\begin{aligned}
 \tilde{\mathcal{G}}_{n_{j\downarrow}c_{\mathbf{k}\chi\uparrow}d_{l\uparrow}}(\varepsilon) &= \frac{\tilde{\varepsilon}_\chi^2 - (\hbar\nu_F k_z^X)^2}{\tilde{\varepsilon}_\chi^2 - (\hbar\nu_F k_z^X)^2} \left\{ \frac{\sum_{j'} V_{j'\mathbf{k}}^* \tilde{\mathcal{G}}_{n_{j\downarrow}d_{j'\uparrow}d_{l\uparrow}}(\varepsilon)}{\varepsilon + i\eta - \chi k_{z+}^X} + \frac{\chi k_-^X \sum_{j'} V_{j'\mathbf{k}}^* \tilde{\mathcal{G}}_{n_{j\downarrow}d_{j'\downarrow}d_{l\uparrow}}(\varepsilon)}{\tilde{\varepsilon}_\chi^2 - (\hbar\nu_F k_z^X)^2} \right\} \\
 &= \frac{(\varepsilon + i\eta + \chi k_{z-}^X) \cdot (\varepsilon + i\eta - \chi k_{z+}^X)}{\tilde{\varepsilon}_\chi^2 - (\hbar\nu_F k_z^X)^2} \cdot \frac{\sum_{j'} V_{j'\mathbf{k}}^* \tilde{\mathcal{G}}_{n_{j\downarrow}d_{j'\uparrow}d_{l\uparrow}}(\varepsilon)}{\varepsilon + i\eta - \chi k_{z+}^X} \\
 &+ \frac{\tilde{\varepsilon}_\chi^2 - (\hbar\nu_F k_z^X)^2}{\tilde{\varepsilon}_\chi^2 - (\hbar\nu_F k_z^X)^2} \cdot \frac{\chi k_-^X \sum_{j'} V_{j'\mathbf{k}}^* \tilde{\mathcal{G}}_{n_{j\downarrow}d_{j'\downarrow}d_{l\uparrow}}(\varepsilon)}{\tilde{\varepsilon}_\chi^2 - (\hbar\nu_F k_z^X)^2}
 \end{aligned} \tag{A.178}$$

Therefore,

$$\tilde{\mathcal{G}}_{n_{j\downarrow}c_{\mathbf{k}\chi\uparrow}d_{l\uparrow}}(\varepsilon) = \frac{\varepsilon + i\eta + \chi k_{z-}^X}{\tilde{\varepsilon}_\chi^2 - (\hbar\nu_F k_z^X)^2} \sum_{j'} V_{j'\mathbf{k}}^* \tilde{\mathcal{G}}_{n_{j\downarrow}d_{j'\uparrow}d_{l\uparrow}}(\varepsilon) + \frac{\chi k_-^X \sum_{j'} V_{j'\mathbf{k}}^* \tilde{\mathcal{G}}_{n_{j\downarrow}d_{j'\downarrow}d_{l\uparrow}}(\varepsilon)}{\tilde{\varepsilon}_\chi^2 - (\hbar\nu_F k_z^X)^2} \tag{A.179}$$

Now, substituting Eq. (A.171) in Eq. (A.135)

$$\begin{aligned}
 \tilde{\mathcal{G}}_{n_{j\uparrow}c_{\mathbf{k}\chi\downarrow}d_{l\downarrow}}(\varepsilon) &= \frac{\chi k_+^X \tilde{\mathcal{G}}_{n_{j\uparrow}c_{\mathbf{k}\chi\downarrow}d_{l\downarrow}}(\varepsilon)}{\varepsilon + i\eta + \chi k_{z-}^X} + \frac{\sum_{j'} V_{j'\mathbf{k}}^* \tilde{\mathcal{G}}_{n_{j\uparrow}d_{j'\downarrow}d_{l\downarrow}}(\varepsilon)}{\varepsilon + i\eta + \chi k_{z-}^X} \\
 &= \frac{\chi k_+^X}{\varepsilon + i\eta + \chi k_{z-}^X} \left\{ \frac{\chi k_-^X \tilde{\mathcal{G}}_{n_{j\uparrow}c_{\mathbf{k}\chi\downarrow}d_{l\downarrow}}(\varepsilon)}{\varepsilon + i\eta - \chi k_{z+}^X} + \frac{\sum_{j'} V_{j'\mathbf{k}}^* \tilde{\mathcal{G}}_{n_{j\uparrow}d_{j'\uparrow}d_{l\downarrow}}(\varepsilon)}{\varepsilon + i\eta - \chi k_{z+}^X} \right\} + \frac{\sum_{j'} V_{j'\mathbf{k}}^* \tilde{\mathcal{G}}_{n_{j\uparrow}d_{j'\downarrow}d_{l\downarrow}}(\varepsilon)}{\varepsilon + i\eta + \chi k_{z-}^X} \\
 &= \frac{k_+^X k_-^X \tilde{\mathcal{G}}_{n_{j\uparrow}c_{\mathbf{k}\chi\downarrow}d_{l\downarrow}}(\varepsilon)}{\tilde{\varepsilon}_\chi^2 - (\hbar\nu_F k_z^X)^2} + \frac{\chi k_+^X \sum_{j'} V_{j'\mathbf{k}}^* \tilde{\mathcal{G}}_{n_{j\uparrow}d_{j'\uparrow}d_{l\downarrow}}(\varepsilon)}{\tilde{\varepsilon}_\chi^2 - (\hbar\nu_F k_z^X)^2} + \frac{\sum_{j'} V_{j'\mathbf{k}}^* \tilde{\mathcal{G}}_{n_{j\uparrow}d_{j'\downarrow}d_{l\downarrow}}(\varepsilon)}{\varepsilon + i\eta + \chi k_{z-}^X} \\
 &= \frac{k_+^X k_-^X \tilde{\mathcal{G}}_{n_{j\uparrow}c_{\mathbf{k}\chi\downarrow}d_{l\downarrow}}(\varepsilon)}{\tilde{\varepsilon}_\chi^2 - (\hbar\nu_F k_z^X)^2} + \frac{\chi k_+^X \sum_{j'} V_{j'\mathbf{k}}^* \tilde{\mathcal{G}}_{n_{j\uparrow}d_{j'\uparrow}d_{l\downarrow}}(\varepsilon)}{\tilde{\varepsilon}_\chi^2 - (\hbar\nu_F k_z^X)^2} + \frac{\sum_{j'} V_{j'\mathbf{k}}^* \tilde{\mathcal{G}}_{n_{j\uparrow}d_{j'\downarrow}d_{l\downarrow}}(\varepsilon)}{\varepsilon + i\eta + \chi k_{z-}^X}
 \end{aligned} \tag{A.180}$$

Factoring $\tilde{\mathcal{G}}_{n_j \uparrow c_{k_x \downarrow} d_{l \downarrow}}(\varepsilon)$

$$\begin{aligned}
 \left[1 - \frac{k_+^x k_-^x}{\tilde{\varepsilon}_\chi^2 - (\hbar \nu_F k_z^x)^2} \right] \tilde{\mathcal{G}}_{n_j \uparrow c_{k_x \downarrow} d_{l \downarrow}}(\varepsilon) &= \frac{\sum_{j'} V_{j' \mathbf{k}}^* \tilde{\mathcal{G}}_{n_j \uparrow d_{j' \downarrow} d_{l \downarrow}}(\varepsilon)}{\varepsilon + i\eta + \chi k_{z-}^x} \\
 &+ \frac{\chi k_+^x \sum_{j'} V_{j' \mathbf{k}}^* \tilde{\mathcal{G}}_{n_j \uparrow d_{j' \uparrow} d_{l \downarrow}}(\varepsilon)}{\tilde{\varepsilon}_\chi^2 - (\hbar \nu_F k_z^x)^2} \\
 \left[\frac{\tilde{\varepsilon}_\chi^2 - (\hbar \nu_F k_z^x)^2 - \hbar^2 \nu_F^2 \left[(k_x^x)^2 + (k_y^x)^2 \right]}{\tilde{\varepsilon}_\chi^2 - (\hbar \nu_F k_z^x)^2} \right] \tilde{\mathcal{G}}_{n_j \uparrow c_{k_x \downarrow} d_{l \downarrow}}(\varepsilon) &= \frac{\sum_{j'} V_{j' \mathbf{k}}^* \tilde{\mathcal{G}}_{n_j \uparrow d_{j' \downarrow} d_{l \downarrow}}(\varepsilon)}{\varepsilon + i\eta + \chi k_{z-}^x} \\
 &+ \frac{\chi k_+^x \sum_{j'} V_{j' \mathbf{k}}^* \tilde{\mathcal{G}}_{n_j \uparrow d_{j' \uparrow} d_{l \downarrow}}(\varepsilon)}{\tilde{\varepsilon}_\chi^2 - (\hbar \nu_F k_z^x)^2} \\
 \left[\frac{\tilde{\varepsilon}_\chi^2 - (\hbar \nu_F k_z^x)^2}{\tilde{\varepsilon}_\chi^2 - (\hbar \nu_F k_z^x)^2} \right] \tilde{\mathcal{G}}_{n_j \uparrow c_{k_x \downarrow} d_{l \downarrow}}(\varepsilon) &= \frac{\sum_{j'} V_{j' \mathbf{k}}^* \tilde{\mathcal{G}}_{n_j \uparrow d_{j' \downarrow} d_{l \downarrow}}(\varepsilon)}{\varepsilon + i\eta + \chi k_{z-}^x} \\
 &+ \frac{\chi k_+^x \sum_{j'} V_{j' \mathbf{k}}^* \tilde{\mathcal{G}}_{n_j \uparrow d_{j' \uparrow} d_{l \downarrow}}(\varepsilon)}{\tilde{\varepsilon}_\chi^2 - (\hbar \nu_F k_z^x)^2} \tag{A.181}
 \end{aligned}$$

Isolating $\tilde{\mathcal{G}}_{n_j \uparrow c_{k_x \downarrow} d_{l \downarrow}}(\varepsilon)$

$$\begin{aligned}
 \tilde{\mathcal{G}}_{n_j \uparrow c_{k_x \downarrow} d_{l \downarrow}}(\varepsilon) &= \frac{\tilde{\varepsilon}_\chi^2 - (\hbar \nu_F k_z^x)^2}{\tilde{\varepsilon}_\chi^2 - (\hbar \nu_F k_z^x)^2} \left\{ \frac{\sum_{j'} V_{j' \mathbf{k}}^* \tilde{\mathcal{G}}_{n_j \uparrow d_{j' \downarrow} d_{l \downarrow}}(\varepsilon)}{\varepsilon + i\eta + \chi k_{z-}^x} + \frac{\chi k_+^x \sum_{j'} V_{j' \mathbf{k}}^* \tilde{\mathcal{G}}_{n_j \uparrow d_{j' \uparrow} d_{l \downarrow}}(\varepsilon)}{\tilde{\varepsilon}_\chi^2 - (\hbar \nu_F k_z^x)^2} \right\} \\
 &= \frac{(\varepsilon + i\eta + \chi k_{z+}^x) \cdot (\varepsilon + i\eta - \chi k_{z-}^x)}{\tilde{\varepsilon}_\chi^2 - (\hbar \nu_F k_z^x)^2} \cdot \frac{\sum_{j'} V_{j' \mathbf{k}}^* \tilde{\mathcal{G}}_{n_j \uparrow d_{j' \downarrow} d_{l \downarrow}}(\varepsilon)}{\varepsilon + i\eta + \chi k_{z-}^x} \\
 &+ \frac{\tilde{\varepsilon}_\chi^2 - (\hbar \nu_F k_z^x)^2}{\tilde{\varepsilon}_\chi^2 - (\hbar \nu_F k_z^x)^2} \cdot \frac{\chi k_+^x \sum_{j'} V_{j' \mathbf{k}}^* \tilde{\mathcal{G}}_{n_j \uparrow d_{j' \uparrow} d_{l \downarrow}}(\varepsilon)}{\tilde{\varepsilon}_\chi^2 - (\hbar \nu_F k_z^x)^2} \tag{A.182}
 \end{aligned}$$

Therefore,

$$\tilde{\mathcal{G}}_{n_j \uparrow c_{k_x \downarrow} d_{l \downarrow}}(\varepsilon) = \frac{\varepsilon + i\eta + \chi k_{z+}^x}{\tilde{\varepsilon}_\chi^2 - (\hbar \nu_F k_z^x)^2} \sum_{j'} V_{j' \mathbf{k}}^* \tilde{\mathcal{G}}_{n_j \uparrow d_{j' \downarrow} d_{l \downarrow}}(\varepsilon) + \frac{\chi k_+^x \sum_{j'} V_{j' \mathbf{k}}^* \tilde{\mathcal{G}}_{n_j \uparrow d_{j' \uparrow} d_{l \downarrow}}(\varepsilon)}{\tilde{\varepsilon}_\chi^2 - (\hbar \nu_F k_z^x)^2} \tag{A.183}$$

Thus, for $\tilde{\mathcal{G}}_{n_j \sigma c_{k_x \sigma} d_{l \sigma'}}(\varepsilon)$, we have the following equations

$$\tilde{\mathcal{G}}_{n_j \downarrow c_{k_x \uparrow} d_{l \uparrow}}(\varepsilon) = \frac{\varepsilon + i\eta + \chi k_{z-}^x}{\tilde{\varepsilon}_\chi^2 - (\hbar \nu_F k_z^x)^2} \sum_{j'} V_{j' \mathbf{k}}^* \tilde{\mathcal{G}}_{n_j \downarrow d_{j' \uparrow} d_{l \uparrow}}(\varepsilon) + \frac{\chi k_-^x \sum_{j'} V_{j' \mathbf{k}}^* \tilde{\mathcal{G}}_{n_j \downarrow d_{j' \downarrow} d_{l \uparrow}}(\varepsilon)}{\tilde{\varepsilon}_\chi^2 - (\hbar \nu_F k_z^x)^2} \tag{A.184}$$

$$\tilde{\mathcal{G}}_{n_j \uparrow c_{k_x \downarrow} d_{l \downarrow}}(\varepsilon) = \frac{\varepsilon + i\eta + \chi k_{z+}^x}{\tilde{\varepsilon}_\chi^2 - (\hbar \nu_F k_z^x)^2} \sum_{j'} V_{j' \mathbf{k}}^* \tilde{\mathcal{G}}_{n_j \uparrow d_{j' \downarrow} d_{l \downarrow}}(\varepsilon) + \frac{\chi k_+^x \sum_{j'} V_{j' \mathbf{k}}^* \tilde{\mathcal{G}}_{n_j \uparrow d_{j' \uparrow} d_{l \downarrow}}(\varepsilon)}{\tilde{\varepsilon}_\chi^2 - (\hbar \nu_F k_z^x)^2} \tag{A.185}$$

Now we are going to perform the summation over j' .

$$\begin{aligned}
 \tilde{\mathcal{G}}_{n_j \downarrow c_{k_x \uparrow} d_{l \uparrow}}(\varepsilon) &= \frac{\varepsilon + i\eta + \chi k_{z-}^x}{\tilde{\varepsilon}_\chi^2 - (\hbar \nu_F k_z^x)^2} \sum_{j'} V_{j' \mathbf{k}}^* \tilde{\mathcal{G}}_{n_j \downarrow d_{j' \uparrow} d_{l \uparrow}}(\varepsilon) + \frac{\chi k_-^x}{\tilde{\varepsilon}_\chi^2 - (\hbar \nu_F k_z^x)^2} \sum_{j'} V_{j' \mathbf{k}}^* \tilde{\mathcal{G}}_{n_j \downarrow d_{j' \downarrow} d_{l \uparrow}}(\varepsilon) \\
 &= \frac{\varepsilon + i\eta + \chi k_{z-}^x}{\tilde{\varepsilon}_\chi^2 - (\hbar \nu_F k_z^x)^2} \sum_{j'=j} V_{j \mathbf{k}}^* \tilde{\mathcal{G}}_{n_j \downarrow d_{j \uparrow} d_{l \uparrow}}(\varepsilon) + \frac{\varepsilon + i\eta + \chi k_{z-}^x}{\tilde{\varepsilon}_\chi^2 - (\hbar \nu_F k_z^x)^2} \sum_{j'=\bar{j}} V_{j \mathbf{k}}^* \tilde{\mathcal{G}}_{n_j \downarrow d_{j \uparrow} d_{l \uparrow}}(\varepsilon) \\
 &+ \frac{k_-^x}{\tilde{\varepsilon}_\chi^2 - (\hbar \nu_F k_z^x)^2} \sum_{j'=j} V_{j \mathbf{k}}^* \tilde{\mathcal{G}}_{n_j \downarrow d_{j \downarrow} d_{l \uparrow}}(\varepsilon) + \frac{\chi k_-^x}{\tilde{\varepsilon}_\chi^2 - (\hbar \nu_F k_z^x)^2} \sum_{j'=\bar{j}} V_{j \mathbf{k}}^* \tilde{\mathcal{G}}_{n_j \downarrow d_{j \downarrow} d_{l \uparrow}}(\varepsilon) \tag{A.186}
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 \tilde{\mathcal{G}}_{n_{j\uparrow}c_{\mathbf{k}\chi\downarrow}d_{l\downarrow}}(\varepsilon) &= \frac{\varepsilon + i\eta + \chi k_{z+}^X}{\tilde{\varepsilon}_\chi^2 - (\hbar\nu_F k\chi)^2} \sum_{j'} V_{j'\mathbf{k}}^* \tilde{\mathcal{G}}_{n_{j\uparrow}d_{j'\downarrow}d_{l\downarrow}}(\varepsilon) + \frac{\chi k_{z+}^X}{\tilde{\varepsilon}_\chi^2 - (\hbar\nu_F k\chi)^2} \sum_{j'} V_{j'\mathbf{k}}^* \tilde{\mathcal{G}}_{n_{j\uparrow}d_{j'\uparrow}d_{l\downarrow}}(\varepsilon) \\
 &= \frac{\varepsilon + i\eta + \chi k_{z+}^X}{\tilde{\varepsilon}_\chi^2 - (\hbar\nu_F k\chi)^2} \sum_{j'=j} V_{j\mathbf{k}}^* \tilde{\mathcal{G}}_{n_{j\uparrow}d_{j\downarrow}d_{l\downarrow}}(\varepsilon) + \frac{\varepsilon + i\eta + \chi k_{z+}^X}{\tilde{\varepsilon}_\chi^2 - (\hbar\nu_F k\chi)^2} \sum_{j'=\bar{j}} V_{j\mathbf{k}}^* \tilde{\mathcal{G}}_{n_{j\uparrow}d_{j\downarrow}d_{l\downarrow}}(\varepsilon) \\
 &+ \frac{k_+^X}{\tilde{\varepsilon}_\chi^2 - (\hbar\nu_F k\chi)^2} \sum_{j'=j} V_{j\mathbf{k}}^* \tilde{\mathcal{G}}_{n_{j\uparrow}d_{j\uparrow}d_{l\downarrow}}(\varepsilon) + \frac{\chi k_+^X}{\tilde{\varepsilon}_\chi^2 - (\hbar\nu_F k\chi)^2} \sum_{j'=\bar{j}} V_{j\mathbf{k}}^* \tilde{\mathcal{G}}_{n_{j\uparrow}d_{j\uparrow}d_{l\downarrow}}(\varepsilon)
 \end{aligned} \tag{A.187}$$

Therefore,

$$\begin{aligned}
 \tilde{\mathcal{G}}_{n_{j\downarrow}c_{\mathbf{k}\chi\uparrow}d_{l\uparrow}}(\varepsilon) &= \frac{\varepsilon + i\eta + \chi k_{z-}^X}{\tilde{\varepsilon}_\chi^2 - (\hbar\nu_F k\chi)^2} V_{j\mathbf{k}}^* \tilde{\mathcal{G}}_{n_{j\downarrow}d_{j\uparrow}d_{l\uparrow}}(\varepsilon) + \frac{\varepsilon + i\eta + \chi k_{z-}^X}{\tilde{\varepsilon}_\chi^2 - (\hbar\nu_F k\chi)^2} V_{j\mathbf{k}}^* \tilde{\mathcal{G}}_{n_{j\downarrow}d_{j\uparrow}d_{l\uparrow}}(\varepsilon) \\
 &+ \frac{\chi k_-^X}{\tilde{\varepsilon}_\chi^2 - (\hbar\nu_F k\chi)^2} V_{j\mathbf{k}}^* \tilde{\mathcal{G}}_{n_{j\downarrow}d_{j\downarrow}d_{l\uparrow}}(\varepsilon) + \frac{\chi k_-^X}{\tilde{\varepsilon}_\chi^2 - (\hbar\nu_F k\chi)^2} V_{j\mathbf{k}}^* \tilde{\mathcal{G}}_{n_{j\downarrow}d_{j\downarrow}d_{l\uparrow}}(\varepsilon)
 \end{aligned} \tag{A.188}$$

$$\begin{aligned}
 \tilde{\mathcal{G}}_{n_{j\uparrow}c_{\mathbf{k}\chi\downarrow}d_{l\downarrow}}(\varepsilon) &= \frac{\varepsilon + i\eta + \chi k_{z+}^X}{\tilde{\varepsilon}_\chi^2 - (\hbar\nu_F k\chi)^2} V_{j\mathbf{k}}^* \tilde{\mathcal{G}}_{n_{j\uparrow}d_{j\downarrow}d_{l\downarrow}}(\varepsilon) + \frac{\varepsilon + i\eta + \chi k_{z+}^X}{\tilde{\varepsilon}_\chi^2 - (\hbar\nu_F k\chi)^2} V_{j\mathbf{k}}^* \tilde{\mathcal{G}}_{n_{j\uparrow}d_{j\downarrow}d_{l\downarrow}}(\varepsilon) \\
 &+ \frac{k_+^X}{\tilde{\varepsilon}_\chi^2 - (\hbar\nu_F k\chi)^2} V_{j\mathbf{k}}^* \tilde{\mathcal{G}}_{n_{j\uparrow}d_{j\uparrow}d_{l\downarrow}}(\varepsilon) + \frac{\chi k_+^X}{\tilde{\varepsilon}_\chi^2 - (\hbar\nu_F k\chi)^2} V_{j\mathbf{k}}^* \tilde{\mathcal{G}}_{n_{j\uparrow}d_{j\uparrow}d_{l\downarrow}}(\varepsilon)
 \end{aligned} \tag{A.189}$$

A.4.4 Grouping Terms of $\tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\sigma}d_{l\sigma'}}(\varepsilon)$ for $U_j \neq 0$

Let us recalling equation Eq. (A.98) and calculate it for $\sigma = \uparrow, \downarrow$.

$$\tilde{\mathcal{G}}_{n_{j\bar{\sigma}}d_{j\sigma}d_{l\sigma}}(\varepsilon) = \frac{\langle n_{j\bar{\sigma}} \rangle \delta_{jl}}{\varepsilon + i\eta - \varepsilon_{j\sigma} - U_j} - \frac{t\tilde{\mathcal{G}}_{n_{j\bar{\sigma}}d_{j\sigma}d_{l\sigma}}(\varepsilon)}{\varepsilon + i\eta - \varepsilon_{j\sigma} - U_j} + \frac{\sum_{\mathbf{k}\chi} V_{j\mathbf{k}} \tilde{\mathcal{G}}_{n_{j\bar{\sigma}}c_{\mathbf{k}\chi\sigma}d_{l\sigma}}(\varepsilon)}{\varepsilon + i\eta - \varepsilon_{j\sigma} - U_j} \tag{A.190}$$

$$\tilde{\mathcal{G}}_{n_{j\downarrow}d_{j\uparrow}d_{l\uparrow}}(\varepsilon) = \frac{\langle n_{j\downarrow} \rangle \delta_{jl}}{\varepsilon + i\eta - \varepsilon_{j\uparrow} - U_j} - \frac{t\tilde{\mathcal{G}}_{n_{j\downarrow}d_{j\uparrow}d_{l\uparrow}}(\varepsilon)}{\varepsilon + i\eta - \varepsilon_{j\uparrow} - U_j} + \frac{\sum_{\mathbf{k}\chi} V_{j\mathbf{k}} \tilde{\mathcal{G}}_{n_{j\downarrow}c_{\mathbf{k}\chi\uparrow}d_{l\uparrow}}(\varepsilon)}{\varepsilon + i\eta - \varepsilon_{j\uparrow} - U_j} \tag{A.191}$$

$$\tilde{\mathcal{G}}_{n_{j\uparrow}d_{j\downarrow}d_{l\downarrow}}(\varepsilon) = \frac{\langle n_{j\uparrow} \rangle \delta_{jl}}{\varepsilon + i\eta - \varepsilon_{j\downarrow} - U_j} - \frac{t\tilde{\mathcal{G}}_{n_{j\uparrow}d_{j\downarrow}d_{l\downarrow}}(\varepsilon)}{\varepsilon + i\eta - \varepsilon_{j\downarrow} - U_j} + \frac{\sum_{\mathbf{k}\chi} V_{j\mathbf{k}} \tilde{\mathcal{G}}_{n_{j\uparrow}c_{\mathbf{k}\chi\downarrow}d_{l\downarrow}}(\varepsilon)}{\varepsilon + i\eta - \varepsilon_{j\downarrow} - U_j} \tag{A.192}$$

$$\begin{aligned}
 (\varepsilon + i\eta - \varepsilon_{j\downarrow} - U_j) \tilde{\mathcal{G}}_{n_{j\uparrow}d_{j\downarrow}d_{i\downarrow}}(\varepsilon) &= \langle n_{j\uparrow} \rangle \delta_{jl} - t \tilde{\mathcal{G}}_{n_{j\uparrow}d_{j\downarrow}d_{i\downarrow}}(\varepsilon) \\
 &+ \sum_{\mathbf{k}\chi} \frac{(\varepsilon + i\eta - \chi k_{z+}^\chi) V_{j\mathbf{k}} V_{j\mathbf{k}}^*}{\tilde{\varepsilon}_\chi^2 - (\hbar\nu_F k\chi)^2} \tilde{\mathcal{G}}_{n_{j\uparrow}d_{j\downarrow}d_{i\downarrow}}(\varepsilon) + \sum_{\mathbf{k}\chi} \frac{(\varepsilon + i\eta - \chi k_{z+}^\chi) V_{j\mathbf{k}} V_{j\mathbf{k}}^*}{\tilde{\varepsilon}_\chi^2 - (\hbar\nu_F k\chi)^2} \tilde{\mathcal{G}}_{n_{j\uparrow}d_{j\downarrow}d_{i\downarrow}}(\varepsilon) \\
 &+ \sum_{\mathbf{k}\chi} \frac{\chi k_{z+}^\chi V_{j\mathbf{k}} V_{j\mathbf{k}}^*}{\tilde{\varepsilon}_\chi^2 - (\hbar\nu_F k\chi)^2} \tilde{\mathcal{G}}_{n_{j\uparrow}d_{j\uparrow}d_{i\downarrow}}(\varepsilon) + \sum_{\mathbf{k}\chi} \frac{\chi k_{z+}^\chi V_{j\mathbf{k}} V_{j\mathbf{k}}^*}{\tilde{\varepsilon}_\chi^2 - (\hbar\nu_F k\chi)^2} \tilde{\mathcal{G}}_{n_{j\uparrow}d_{j\uparrow}d_{i\downarrow}}(\varepsilon)
 \end{aligned} \tag{A.196}$$

From these two equations we can recognize the self-energies Eq. [A.59, A.60, A.63 and A.64]. Thus,

$$\begin{aligned}
 (\varepsilon + i\eta - \varepsilon_{j\uparrow} - U_j) \tilde{\mathcal{G}}_{n_{j\downarrow}d_{j\uparrow}d_{i\uparrow}}(\varepsilon) &= \langle n_{j\downarrow} \rangle \delta_{jl} - t \tilde{\mathcal{G}}_{n_{j\downarrow}d_{j\uparrow}d_{i\uparrow}}(\varepsilon) \\
 &+ \tilde{\mathcal{G}}_{n_{j\downarrow}d_{j\uparrow}d_{i\uparrow}}(\varepsilon) + \Sigma_{z-}^{jj} \tilde{\mathcal{G}}_{n_{j\downarrow}d_{j\uparrow}d_{i\uparrow}}(\varepsilon) \\
 &+ \cancel{\Sigma_{z-}^{jj} \tilde{\mathcal{G}}_{n_{j\downarrow}d_{j\uparrow}d_{i\uparrow}}(\varepsilon)} + \cancel{\Sigma_{z-}^{jj} \tilde{\mathcal{G}}_{n_{j\downarrow}d_{j\uparrow}d_{i\uparrow}}(\varepsilon)} \\
 (\varepsilon + i\eta - \varepsilon_{j\uparrow} - \Sigma_{z-}^{jj} - U_j) \tilde{\mathcal{G}}_{n_{j\downarrow}d_{j\uparrow}d_{i\uparrow}}(\varepsilon) &= \langle n_{j\downarrow} \rangle \delta_{jl} + (\Sigma_{z-}^{jj} - t) \tilde{\mathcal{G}}_{n_{j\downarrow}d_{j\uparrow}d_{i\uparrow}}(\varepsilon) \\
 \tilde{\mathcal{G}}_{n_{j\downarrow}d_{j\uparrow}d_{i\uparrow}}(\varepsilon) &= \frac{\langle n_{j\downarrow} \rangle \delta_{jl}}{(\varepsilon + i\eta - \varepsilon_{j\uparrow} - \Sigma_{z-}^{jj} - U_j)} + \frac{\Sigma_{z-}^{jj} - t}{(\varepsilon + i\eta - \varepsilon_{j\uparrow} - \Sigma_{z-}^{jj} - U_j)} \tilde{\mathcal{G}}_{n_{j\downarrow}d_{j\uparrow}d_{i\uparrow}}(\varepsilon)
 \end{aligned} \tag{A.197}$$

$$\begin{aligned}
 (\varepsilon + i\eta - \varepsilon_{j\downarrow} - U_j) \tilde{\mathcal{G}}_{n_{j\uparrow}d_{j\downarrow}d_{i\downarrow}}(\varepsilon) &= \langle n_{j\uparrow} \rangle \delta_{jl} - t \tilde{\mathcal{G}}_{n_{j\uparrow}d_{j\downarrow}d_{i\downarrow}}(\varepsilon) \\
 &+ \Sigma_{z+}^{jj} \tilde{\mathcal{G}}_{n_{j\uparrow}d_{j\downarrow}d_{i\downarrow}}(\varepsilon) + \Sigma_{z+}^{jj} \tilde{\mathcal{G}}_{n_{j\uparrow}d_{j\downarrow}d_{i\downarrow}}(\varepsilon) \\
 &+ \cancel{\Sigma_{z+}^{jj} \tilde{\mathcal{G}}_{n_{j\uparrow}d_{j\downarrow}d_{i\downarrow}}(\varepsilon)} + \cancel{\Sigma_{z+}^{jj} \tilde{\mathcal{G}}_{n_{j\uparrow}d_{j\downarrow}d_{i\downarrow}}(\varepsilon)} \\
 (\varepsilon + i\eta - \varepsilon_{j\downarrow} - \Sigma_{z+}^{jj} - U_j) \tilde{\mathcal{G}}_{n_{j\uparrow}d_{j\downarrow}d_{i\downarrow}}(\varepsilon) &= \langle n_{j\uparrow} \rangle \delta_{jl} + (\Sigma_{z+}^{jj} - t) \tilde{\mathcal{G}}_{n_{j\uparrow}d_{j\downarrow}d_{i\downarrow}}(\varepsilon) \\
 \tilde{\mathcal{G}}_{n_{j\uparrow}d_{j\downarrow}d_{i\downarrow}}(\varepsilon) &= \frac{\langle n_{j\uparrow} \rangle \delta_{jl}}{(\varepsilon + i\eta - \varepsilon_{j\downarrow} - \Sigma_{z+}^{jj} - U_j)} + \frac{\Sigma_{z+}^{jj} - t}{(\varepsilon + i\eta - \varepsilon_{j\downarrow} - \Sigma_{z+}^{jj} - U_j)} \tilde{\mathcal{G}}_{n_{j\uparrow}d_{j\downarrow}d_{i\downarrow}}(\varepsilon)
 \end{aligned} \tag{A.198}$$

Here, we can use the Hubbard I approximation, which consist in doing

$$\tilde{\mathcal{G}}_{n_{j\sigma}d_{j\sigma}d_{i\sigma}}(\varepsilon) \rightarrow \langle n_{j\sigma} \rangle \tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\sigma}d_{i\sigma}}(\varepsilon) \tag{A.199}$$

Therefore,

$$\tilde{\mathcal{G}}_{n_{j\downarrow}d_{j\uparrow}d_{i\uparrow}}(\varepsilon) = \frac{\langle n_{j\downarrow} \rangle \delta_{jl}}{(\varepsilon + i\eta - \varepsilon_{j\uparrow} - \Sigma_{z-}^{jj} - U_j)} + \frac{(\Sigma_{z-}^{jj} - t) \langle n_{j\downarrow} \rangle}{(\varepsilon + i\eta - \varepsilon_{j\uparrow} - \Sigma_{z-}^{jj} - U_j)} \tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\uparrow}d_{i\uparrow}}(\varepsilon) \tag{A.200}$$

$$\tilde{\mathcal{G}}_{n_{j\uparrow}d_{j\downarrow}d_{i\downarrow}}(\varepsilon) = \frac{\langle n_{j\uparrow} \rangle \delta_{jl}}{(\varepsilon + i\eta - \varepsilon_{j\downarrow} - \Sigma_{z+}^{jj} - U_j)} + \frac{(\Sigma_{z+}^{jj} - t) \langle n_{j\uparrow} \rangle}{(\varepsilon + i\eta - \varepsilon_{j\downarrow} - \Sigma_{z+}^{jj} - U_j)} \tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\downarrow}d_{i\downarrow}}(\varepsilon) \tag{A.201}$$

Now, let us recall the Eq. (A.68) and Eq. (A.69), changing then to $n_{j\sigma}$

$$(\varepsilon + i\eta - \varepsilon_{j\uparrow} - \Sigma_{z-}^{jj}) \tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\uparrow}d_{i\uparrow}}(\varepsilon) = \delta_{jl} + (\Sigma_{z-}^{jj} - t) \tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\uparrow}d_{i\uparrow}}(\varepsilon) + U_j \tilde{\mathcal{G}}_{n_{j\downarrow}d_{j\uparrow}d_{i\uparrow}}(\varepsilon) \tag{A.202}$$

$$(\varepsilon + i\eta - \varepsilon_{j\downarrow} - \Sigma_{z+}^{jj}) \tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\downarrow}d_{i\downarrow}}(\varepsilon) = \delta_{jl} + (\Sigma_{z+}^{jj} - t) \tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\downarrow}d_{i\downarrow}}(\varepsilon) + U_j \tilde{\mathcal{G}}_{n_{j\uparrow}d_{j\downarrow}d_{i\downarrow}}(\varepsilon) \tag{A.203}$$

Using Eq. (A.200) and Eq. (A.201)

$$\begin{aligned}
 (\varepsilon + i\eta - \varepsilon_{j\uparrow} - \Sigma_{z-}^{jj}) \tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\uparrow}d_{l\uparrow}}(\varepsilon) &= \delta_{jl} + (\Sigma_{z-}^{j\bar{j}} - t) \tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\uparrow}d_{l\uparrow}}(\varepsilon) + U_j \tilde{\mathcal{G}}_{n_{j\downarrow}d_{j\uparrow}d_{l\uparrow}}(\varepsilon) \\
 &= \delta_{jl} + (\Sigma_{z-}^{j\bar{j}} - t) \tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\uparrow}d_{l\uparrow}}(\varepsilon) + U_j \left\{ \frac{\langle n_{j\downarrow} \rangle \delta_{jl}}{(\varepsilon + i\eta - \varepsilon_{j\uparrow} - \Sigma_{z-}^{jj} - U_j)} \right. \\
 &\quad \left. + \frac{(\Sigma_{z-}^{j\bar{j}} - t) \langle n_{j\downarrow} \rangle}{(\varepsilon + i\eta - \varepsilon_{j\uparrow} - \Sigma_{z-}^{jj} - U_j)} \tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\uparrow}d_{l\uparrow}}(\varepsilon) \right\} \\
 &= \left[1 + \frac{\langle n_{j\downarrow} \rangle U_j}{(\varepsilon + i\eta - \varepsilon_{j\uparrow} - \Sigma_{z-}^{jj} - U_j)} \right] \delta_{jl} \\
 &\quad + \left[1 + \frac{\langle n_{j\downarrow} \rangle U_j}{(\varepsilon + i\eta - \varepsilon_{j\uparrow} - \Sigma_{z-}^{jj} - U_j)} \right] (\Sigma_{z-}^{j\bar{j}} - t) \tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\uparrow}d_{l\uparrow}}(\varepsilon) \tag{A.204}
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 (\varepsilon + i\eta - \varepsilon_{j\downarrow} - \Sigma_{z+}^{jj}) \tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\downarrow}d_{l\downarrow}}(\varepsilon) &= \delta_{jl} + (\Sigma_{z+}^{j\bar{j}} - t) \tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\downarrow}d_{l\downarrow}}(\varepsilon) + U_j \tilde{\mathcal{G}}_{n_{j\uparrow}d_{j\downarrow}d_{l\downarrow}}(\varepsilon) \\
 &= \delta_{jl} + (\Sigma_{z+}^{j\bar{j}} - t) \tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\downarrow}d_{l\downarrow}}(\varepsilon) + U_j \left\{ \frac{\langle n_{j\uparrow} \rangle \delta_{jl}}{(\varepsilon + i\eta - \varepsilon_{j\downarrow} - \Sigma_{z+}^{jj} - U_j)} \right. \\
 &\quad \left. + \frac{(\Sigma_{z+}^{j\bar{j}} - t) \langle n_{j\uparrow} \rangle}{(\varepsilon + i\eta - \varepsilon_{j\downarrow} - \Sigma_{z+}^{jj} - U_j)} \tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\downarrow}d_{l\downarrow}}(\varepsilon) \right\} \\
 &= \left[1 + \frac{\langle n_{j\uparrow} \rangle U_j}{(\varepsilon + i\eta - \varepsilon_{j\downarrow} - \Sigma_{z+}^{jj} - U_j)} \right] \delta_{jl} \\
 &\quad + \left[1 + \frac{\langle n_{j\uparrow} \rangle U_j}{(\varepsilon + i\eta - \varepsilon_{j\downarrow} - \Sigma_{z+}^{jj} - U_j)} \right] (\Sigma_{z+}^{j\bar{j}} - t) \tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\downarrow}d_{l\downarrow}}(\varepsilon) \tag{A.205}
 \end{aligned}$$

Making a substituting using

$$\boxed{\lambda_{j\sigma} = 1 + \frac{\langle n_{j\bar{\sigma}} \rangle U_j}{(\varepsilon + i\eta - \varepsilon_{j\sigma} - \Sigma_{z\pm}^{jj} - U_j)}} \tag{A.206}$$

Substituting,

$$(\varepsilon + i\eta - \varepsilon_{j\uparrow} - \Sigma_{z-}^{jj}) \tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\uparrow}d_{l\uparrow}}(\varepsilon) = \delta_{jl} \lambda_{j\uparrow} + (\Sigma_{z-}^{j\bar{j}} - t) \lambda_{j\uparrow} \tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\uparrow}d_{l\uparrow}}(\varepsilon) \tag{A.207}$$

$$(\varepsilon + i\eta - \varepsilon_{j\downarrow} - \Sigma_{z+}^{jj}) \tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\downarrow}d_{l\downarrow}}(\varepsilon) = \delta_{jl} \lambda_{j\downarrow} + (\Sigma_{z+}^{j\bar{j}} - t) \lambda_{j\downarrow} \tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\downarrow}d_{l\downarrow}}(\varepsilon) \tag{A.208}$$

For $l = j$

$$(\varepsilon + i\eta - \varepsilon_{j\uparrow} - \Sigma_{z-}^{jj}) \tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\uparrow}d_{j\uparrow}}(\varepsilon) = \lambda_{j\uparrow} + (\Sigma_{z-}^{j\bar{j}} - t) \lambda_{j\uparrow} \tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\uparrow}d_{j\uparrow}}(\varepsilon) \tag{A.209}$$

$$(\varepsilon + i\eta - \varepsilon_{j\downarrow} - \Sigma_{z+}^{jj}) \tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\downarrow}d_{j\downarrow}}(\varepsilon) = \lambda_{j\downarrow} + (\Sigma_{z+}^{j\bar{j}} - t) \lambda_{j\downarrow} \tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\downarrow}d_{j\downarrow}}(\varepsilon) \tag{A.210}$$

For $l = \bar{j}$

$$\begin{aligned} (\varepsilon + i\eta - \varepsilon_{j\uparrow} - \Sigma_{z-}^{jj}) \tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\uparrow}d_{j\uparrow}}(\varepsilon) &= (\Sigma_{z-}^{j\bar{j}} - t) \lambda_{j\uparrow} \tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\uparrow}d_{j\uparrow}}(\varepsilon) \\ (\varepsilon + i\eta - \varepsilon_{\bar{j}\uparrow} - \Sigma_{z-}^{j\bar{j}}) \tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\uparrow}d_{j\uparrow}}(\varepsilon) &= (\Sigma_{z-}^{j\bar{j}} - t) \lambda_{\bar{j}\uparrow} \tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\uparrow}d_{j\uparrow}}(\varepsilon) \end{aligned} \quad (\text{A.211})$$

$$\begin{aligned} (\varepsilon + i\eta - \varepsilon_{j\downarrow} - \Sigma_{z+}^{jj}) \tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\downarrow}d_{j\downarrow}}(\varepsilon) &= (\Sigma_{z+}^{j\bar{j}} - t) \lambda_{j\downarrow} \tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\downarrow}d_{j\downarrow}}(\varepsilon) \\ (\varepsilon + i\eta - \varepsilon_{\bar{j}\downarrow} - \Sigma_{z+}^{j\bar{j}}) \tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\downarrow}d_{j\downarrow}}(\varepsilon) &= (\Sigma_{z+}^{j\bar{j}} - t) \lambda_{\bar{j}\downarrow} \tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\downarrow}d_{j\downarrow}}(\varepsilon) \end{aligned} \quad (\text{A.212})$$

Therefore,

$$\tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\uparrow}d_{j\uparrow}}(\varepsilon) = \frac{\Sigma_{z-}^{j\bar{j}} - t}{\varepsilon + i\eta - \varepsilon_{\bar{j}\uparrow} - \Sigma_{z-}^{j\bar{j}}} \lambda_{\bar{j}\uparrow} \tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\uparrow}d_{j\uparrow}}(\varepsilon) \quad (\text{A.213})$$

$$\tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\downarrow}d_{j\downarrow}}(\varepsilon) = \frac{\Sigma_{z+}^{j\bar{j}} - t}{\varepsilon + i\eta - \varepsilon_{\bar{j}\downarrow} - \Sigma_{z+}^{j\bar{j}}} \lambda_{\bar{j}\downarrow} \tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\downarrow}d_{j\downarrow}}(\varepsilon) \quad (\text{A.214})$$

Substituting Eq. (A.213) in Eq. (A.209) and Eq. (A.214) in Eq. (A.210)

$$\begin{aligned} (\varepsilon + i\eta - \varepsilon_{j\uparrow} - \Sigma_{z-}^{jj}) \tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\uparrow}d_{j\uparrow}}(\varepsilon) &= \lambda_{j\uparrow} + (\Sigma_{z-}^{j\bar{j}} - t) \lambda_{j\uparrow} \tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\uparrow}d_{j\uparrow}}(\varepsilon) \\ &= \lambda_{j\uparrow} + (\Sigma_{z-}^{j\bar{j}} - t) \lambda_{j\uparrow} \left[\frac{\Sigma_{z-}^{j\bar{j}} - t}{\varepsilon + i\eta - \varepsilon_{\bar{j}\uparrow} - \Sigma_{z-}^{j\bar{j}}} \lambda_{\bar{j}\uparrow} \tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\uparrow}d_{j\uparrow}}(\varepsilon) \right] \\ &= \lambda_{j\uparrow} + \lambda_{j\uparrow} \lambda_{\bar{j}\uparrow} \left[\frac{t^2 - t\Sigma_{z-}^{j\bar{j}} - t\Sigma_{z-}^{j\bar{j}}}{\varepsilon + i\eta - \varepsilon_{\bar{j}\uparrow} - \Sigma_{z-}^{j\bar{j}}} + \frac{\Sigma_{z-}^{j\bar{j}} \Sigma_{z-}^{j\bar{j}}}{\varepsilon + i\eta - \varepsilon_{\bar{j}\uparrow} - \Sigma_{z-}^{j\bar{j}}} \right] \tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\uparrow}d_{j\uparrow}}(\varepsilon) \\ &= \lambda_{j\uparrow} + \left[\lambda_{j\uparrow} \lambda_{\bar{j}\uparrow} \frac{t^2 - t(\Sigma_{z-}^{j\bar{j}} + \Sigma_{z-}^{j\bar{j}})}{\varepsilon + i\eta - \varepsilon_{\bar{j}\uparrow} - \Sigma_{z-}^{j\bar{j}}} + \lambda_{j\uparrow} \lambda_{\bar{j}\uparrow} \frac{\Sigma_{z-}^{j\bar{j}} \Sigma_{z-}^{j\bar{j}}}{\varepsilon + i\eta - \varepsilon_{\bar{j}\uparrow} - \Sigma_{z-}^{j\bar{j}}} \right] \tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\uparrow}d_{j\uparrow}}(\varepsilon) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} (\varepsilon + i\eta - \varepsilon_{j\downarrow} - \Sigma_{z+}^{jj}) \tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\downarrow}d_{j\downarrow}}(\varepsilon) &= \lambda_{j\downarrow} + (\Sigma_{z+}^{j\bar{j}} - t) \lambda_{j\downarrow} \tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\downarrow}d_{j\downarrow}}(\varepsilon) \\ &= \lambda_{j\downarrow} + (t + \Sigma_{z+}^{j\bar{j}}) \lambda_{j\downarrow} \left[\frac{\Sigma_{z+}^{j\bar{j}} - t}{\varepsilon + i\eta - \varepsilon_{\bar{j}\downarrow} - \Sigma_{z+}^{j\bar{j}}} \lambda_{\bar{j}\downarrow} \tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\downarrow}d_{j\downarrow}}(\varepsilon) \right] \\ &= \lambda_{j\downarrow} + \lambda_{j\downarrow} \lambda_{\bar{j}\downarrow} \left[\frac{t^2 - t\Sigma_{z+}^{j\bar{j}} - t\Sigma_{z+}^{j\bar{j}}}{\varepsilon + i\eta - \varepsilon_{\bar{j}\downarrow} - \Sigma_{z+}^{j\bar{j}}} + \frac{\Sigma_{z+}^{j\bar{j}} \Sigma_{z+}^{j\bar{j}}}{\varepsilon + i\eta - \varepsilon_{\bar{j}\downarrow} - \Sigma_{z+}^{j\bar{j}}} \right] \tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\downarrow}d_{j\downarrow}}(\varepsilon) \\ &= \lambda_{j\downarrow} + \left[\lambda_{j\downarrow} \lambda_{\bar{j}\downarrow} \frac{t^2 - t(\Sigma_{z+}^{j\bar{j}} + \Sigma_{z+}^{j\bar{j}})}{\varepsilon + i\eta - \varepsilon_{\bar{j}\downarrow} - \Sigma_{z+}^{j\bar{j}}} + \lambda_{j\downarrow} \lambda_{\bar{j}\downarrow} \frac{\Sigma_{z+}^{j\bar{j}} \Sigma_{z+}^{j\bar{j}}}{\varepsilon + i\eta - \varepsilon_{\bar{j}\downarrow} - \Sigma_{z+}^{j\bar{j}}} \right] \tilde{\mathcal{G}}_{d_{j\downarrow}d_{j\downarrow}}(\varepsilon) \end{aligned}$$

Making another substitution using

$$\tilde{\Pi}_{j\sigma} = \lambda_{j\sigma} \lambda_{\bar{j}\sigma} \frac{t^2 - t(\Sigma_{z\mp}^{j\bar{j}} + \Sigma_{z\mp}^{j\bar{j}})}{\varepsilon + i\eta - \varepsilon_{\bar{j}\sigma} - \Sigma_{z\mp}^{j\bar{j}}} \quad (\text{A.215})$$

$$\tilde{\Sigma}_{j\sigma} = \lambda_{j\sigma} \lambda_{\bar{j}\sigma} \frac{\Sigma_{z\mp}^{j\bar{j}} \Sigma_{z\mp}^{j\bar{j}}}{\varepsilon + i\eta - \varepsilon_{\bar{j}\sigma} - \Sigma_{z\mp}^{j\bar{j}}} \quad (\text{A.216})$$

in which \mp is $-$ if $\sigma = \uparrow$ and $+$ if $\sigma = \downarrow$. Substituting,

$$\begin{aligned} (\varepsilon + i\eta - \varepsilon_{j\uparrow} - \Sigma_{z-}^{jj}) \tilde{\mathcal{G}}_{d_j\uparrow d_j\uparrow}(\varepsilon) &= \lambda_{j\uparrow} + [\tilde{\Pi}_{j\uparrow} + \tilde{\Sigma}_{j\uparrow}] \tilde{\mathcal{G}}_{d_j\uparrow d_j\uparrow}(\varepsilon) \\ (\varepsilon + i\eta - \varepsilon_{j\uparrow} - \Sigma_{z-}^{jj} - \tilde{\Pi}_{j\uparrow} - \tilde{\Sigma}_{j\uparrow}) \tilde{\mathcal{G}}_{d_j\uparrow d_j\uparrow}(\varepsilon) &= \lambda_{j\uparrow} \end{aligned} \quad (\text{A.217})$$

$$\begin{aligned} (\varepsilon + i\eta - \varepsilon_{j\downarrow} - \Sigma_{z-}^{jj}) \tilde{\mathcal{G}}_{d_j\downarrow d_j\downarrow}(\varepsilon) &= \lambda_{j\downarrow} + [\tilde{\Pi}_{j\downarrow} + \tilde{\Sigma}_{j\downarrow}] \tilde{\mathcal{G}}_{d_j\downarrow d_j\downarrow}(\varepsilon) \\ (\varepsilon + i\eta - \varepsilon_{j\downarrow} - \Sigma_{z+}^{jj} - \tilde{\Pi}_{j\downarrow} - \tilde{\Sigma}_{j\downarrow}) \tilde{\mathcal{G}}_{d_j\downarrow d_j\downarrow}(\varepsilon) &= \lambda_{j\downarrow} \end{aligned} \quad (\text{A.218})$$

Finally,

$$\boxed{\tilde{\mathcal{G}}_{d_j\uparrow d_j\uparrow}(\varepsilon) = \frac{\lambda_{j\uparrow}}{\varepsilon + i\eta - \varepsilon_{j\uparrow} - \Sigma_{z-}^{jj} - \tilde{\Pi}_{j\uparrow} - \tilde{\Sigma}_{j\uparrow}}} \quad (\text{A.219})$$

$$\boxed{\tilde{\mathcal{G}}_{d_j\downarrow d_j\downarrow}(\varepsilon) = \frac{\lambda_{j\downarrow}}{\varepsilon + i\eta - \varepsilon_{j\downarrow} - \Sigma_{z+}^{jj} - \tilde{\Pi}_{j\downarrow} - \tilde{\Sigma}_{j\downarrow}}} \quad (\text{A.220})$$

Bibliography

- [A1] Hao-Ran Chang, Jianhui Zhou, Shi-Xiong Wang, Wen-Yu Shan and Di Xiao. **RKKY interaction of magnetic impurities in Dirac and Weyl semimetals**. Dec 03rd, 2015
- [A2] Shi-Han Zheng, Rui-Qiang Wang, Min Zhong and Hou-JianDuan. Resonances states and beating pattern induced by quantum impurity scattering in Weyl/Dirac semimetals. Nov 03rd, 2016. DOI: [10.1038/srep36106](https://doi.org/10.1038/srep36106)
- [A3] Yuri Marques. **3D Dirac semimetal calculation in presence of two burried impurities**. Aug 23rd, 2017
- [A4] Antonio C. Seridonio. **Lecture on Quantum Transport: Kondo effect, STM, Green's functions, Anderson model, Fano interference and Hubbard I approximation**. Oct 6th, 2013
- [A5] Matiur Rahman. **Applications of Fourier Transforms to Generalized Functions**. ISBN: [978-1-84564-564-9](https://www.amazon.com/dp/9781845645649)
- [A6] P. W. Anderson. **Localized Magnetic States in Metals**. Oct 1st, 1961. DOI: [10.1103/PhysRev.124.41](https://doi.org/10.1103/PhysRev.124.41)
- [A7] Johnof. **Tight-binding model for electrons in a crystal**. Norwegian University of Science and Technology. 2014-04-11, 00:17. [tight-binding-2014.pdf](#)
- [A8] R. Allub. **Two-Impurity Anderson model in an Antiferromagnetic metal: zero-bandwidth limit**. Sep 18th, 2008. [arXiv:0809.3253v1](https://arxiv.org/abs/0809.3253v1)
- [A9] Wikipedia. **Bose–Hubbard model**. [Wikipedia](#), edited on 21 November
- [A10] Wikipedia. **Hubbard model**. [Wikipedia](#), edited on 17 September 2017
- [A11] WolframAlpha [website](#)
- [A12] Integral Calculator [website](#)
- [A13] Ulrich H. Kurzweg. **Properties of Arctan(Z)**. University of Florida, Department of Mechanical and Aerospace Engineering, Gainesville, Florida, USA. March 2009 . [Link](#)