



UNIVERSIDADE ESTADUAL PAULISTA
"JÚLIO DE MESQUITA FILHO"

Faculdade de Engenharia - Câmpus de Ilha Solteira

**PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO
EM CIÊNCIAS DOS MATERIAIS**

**Assinaturas topológicas de estados localizados com
elétrons de multi-Weyl e grafeno**

Willian Carvalho da Silva

Ilha Solteira - SP

26-02-2024



UNIVERSIDADE ESTADUAL PAULISTA
"JÚLIO DE MESQUITA FILHO"

Faculdade de Engenharia - Câmpus de Ilha Solteira

PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO
EM CIÊNCIAS DOS MATERIAIS

Assinaturas topológicas de estados localizados com
elétrons de multi-Weyl e grafeno

Willian Carvalho da Silva

Advisor: Antonio Carlos Ferreira Seridonio

Trabalho apresentado à Universi-
dade Estadual Paulista - UNESP
como requisito para obtenção do
Título de Doutor em Ciências dos
Materiais.

Ilha Solteira - SP

26-02-2024

FICHA CATALOGRÁFICA
Desenvolvido pelo Serviço Técnico de Biblioteca e Documentação

S586a Silva, Willian Carvalho da.
Assinaturas topológicas de estados localizados com elétrons de multi-Weyl e grafeno / Willian Carvalho da Silva. -- Ilha Solteira: [s.n.], 2024
91 f. : il.

Tese (doutorado) - Universidade Estadual Paulista. Faculdade de Engenharia de Ilha Solteira. Área de conhecimento: Física da Matéria Condensada, 2024

Orientador: Antonio Carlos Ferreira Seridonio

Inclui bibliografia

1. Semimetais de multi-Weyl. 2. Efeito fano. 3. Grafeno multicamadas. 4. Colapso atômico.


Amanda Sertori dos Santos

Bibliotecária - CRB/8-9061
Seção Técnica de Referência, Atendimento ao
Usuário e Documentação
Diretoria Técnica de Biblioteca e Documentação

CERTIFICADO DE APROVAÇÃO

TÍTULO DA TESE: Assinaturas topológicas de estados localizados com elétrons de multi-Weyl e grafeno

AUTOR: WILLIAN CARVALHO DA SILVA

ORIENTADOR: ANTONIO CARLOS FERREIRA SERIDONIO

Aprovado como parte das exigências para obtenção do Título de Doutor em Ciência dos Materiais, área: Física da Matéria Condensada pela Comissão Examinadora:

Documento assinado digitalmente
gov.br ANTONIO CARLOS FERREIRA SERIDONIO
Data: 11/03/2024 10:09:43-0300
Verifique em <https://validar.iti.gov.br>

Prof. Dr. ANTONIO CARLOS FERREIRA SERIDONIO (Participação Virtual)
Departamento de Física e Química / Faculdade de Engenharia de Ilha Solteira - UNESP

Prof. Dr. CAIO HENRIQUE LEWENKOPF (Participação Virtual)
Instituto de Física / Universidade Federal Fluminense - UFF

Prof. Dr. LUIZ NUNES DE OLIVEIRA (Participação Virtual)
Instituto de Física de São Carlos / Universidade de São Paulo - USP

Prof. Dr. ALEXANDRE REILY ROCHA (Participação Virtual)
Instituto de Física Teórica / Reitoria - UNESP

Profa. Dra. MARIANA MALARD SALES ANDRADE (Participação Virtual)
Faculdade de Planaltina / Universidade de Brasília - UnB

Documento assinado digitalmente
gov.br MARIANA MALARD SALES ANDRADE
Data: 29/02/2024 14:34:57-0300
Verifique em <https://validar.iti.gov.br>

Ilha Solteira, 26 de fevereiro de 2024

Impacto e Relevância Científico-Social

Explorar os semimetais de multi-Weyl e o grafeno multicamadas Romboédrico não apenas influencia de maneira significativa a física de materiais e a ciência em geral, mas também detém um potencial substancial para impulsionar avanços tecnológicos, aplicações práticas e repercussões sociais pertinentes. A pesquisa apresentada não só adiciona ao conhecimento científico para futuras realizações experimentais, mas também enriquece diversas esferas, incluindo avanços tecnológicos.

As propriedades eletrônicas distintas dos semimetais de multi-Weyl e do grafeno multicamadas desempenham um papel fundamental no avanço tecnológico, diferenciando-se significativamente dos materiais convencionais no contexto do transporte eletrônico. Esses materiais são objeto de estudo no campo em ascensão da computação quântica, onde as características eletrônicas destacadas nesta tese abrem caminho para a possível criação de qubits estáveis e manipuláveis, essenciais para a informação quântica.

A exploração desses materiais proporciona oportunidades para o aprimoramento do saber e o desenvolvimento científico, dirigindo-se tanto a estudantes quanto a pesquisadores. No contexto da educação e formação científica, à medida que a pesquisa avança, os conhecimentos e habilidades adquiridos podem ser aplicados em diferentes áreas da ciência e tecnologia, impulsionando o progresso da sociedade como um todo.

Dedico este trabalho a minha esposa Rafaella Cristina,
pelo incentivo, companheirismo e por toda
reciprocidade que sempre tivemos.

Agradecimentos

Agradeço à CAPES por ter custeado meu trabalho, pois sendo beneficiário de bolsa CAPES foi possível garantir minha permanência no Doutorado com dedicação exclusiva.

Agradeço ao meu orientador Antonio Carlos Ferreira Seridonio pelo incentivo a permanecer focado nos estudos e pelos ensinamentos que se estendem além da pesquisa.

Agradeço ao meu amigo José Eduardo pelo auxílio no uso de softwares de edição de imagens para produção de gráficos e imagens de boa qualidade.

Agradeço a minha esposa Rafella Cristina pelo apoio incondicional e incentivo durante o curso de Doutorado.

Aos meus amigos José Eduardo e Luana, pelo companheirismo que me proporcionaram durante o Doutorado.

Agradeço também a Andreia Cristina, Daniella Cristina, Graziella Cristina pelo incentivo em aprimorar minha formação acadêmica.

Ao Prof. Dr. Reginaldo Naves Reis pelo incentivo ao ingresso na carreira acadêmica, desde o ensino médio.

A todos os professores que contribuíram de alguma forma com minha carreira acadêmica e científica.

Agradeço a todos pela confiança e pelo incentivo.

*“A cor da minha pele é o meu orgulho,
a minha ancestralidade”*

Autora: Mariana Moreno

Resumo

Determinamos o parâmetro de assimetria Fano (q_J) ao considerar uma única impureza adsorvida a um semimetal de multi-Weyl. Introduzimos o efeito Fano associado a uma carga topológica, revelando a modulação do perfil Fano pelos arcos de Fermi. O ajuste da carga topológica permite a transição do perfil ressonante (para $J = 1$, semimetal de Weyl) para o perfil antirressonante em semimetais hiper-Weyl ($J \gg 1$). Em casos com proteção topológica ($J \leq 3$), o parâmetro de assimetria é determinado pelo grupo de simetria rotacional do semimetal multi-Weyl. Simultaneamente, exploramos estados ligados virtuais na região do *gap* de Coulomb de um átomo adsorvido em um sistema de grafeno multicamadas com empilhamento ABC. Demonstramos que esses estados virtuais reproduzem um fenômeno semelhante ao colapso atômico da física atômica relativística. Além disso, identificamos um segundo estado virtual com função equivalente a um estado de pósitron, introduzindo assim o conceito de colapso atômico no sistema de grafeno multicamadas ABC.

Palavras-chave: Semimetais de multi-Weyl, Efeito Fano, Grafeno Multicamadas e Colapso atômico.

Abstract

We determine the Fano asymmetry parameter (q_J) when considering a single adsorbed impurity to a multi-Weyl semimetal. We introduce the Fano effect associated with a topological charge, revealing the modulation of the Fano profile by the Fermi arcs. The tuning of the topological charge allows the transition from the resonant profile (for $J = 1$, Weyl semimetal) to the antiresonant profile in hyper-Weyl semimetals ($J \gg 1$). In cases with topological protection ($J \leq 3$), the asymmetry parameter is determined by the rotational symmetry group of the multi-Weyl semimetal. Simultaneously, we explore virtual bound states in the Coulomb gap region of an adatom in a multilayer graphene system with ABC stacking. We demonstrate that these virtual states reproduce a phenomenon similar to the atomic collapse of relativistic atomic physics. Furthermore, we identify a second virtual state with analogous behavior of a positron state, thus introducing the concept of atomic collapse in the ABC multilayer graphene system.

Keywords: multi-Weyl semimetals, Fano Effect, Multilayer Graphene and Atomic collapse.

Sumário

1	Introdução	14
1.1	Semimetais de multi-Weyl	14
1.2	Grafeno Multicamadas Romboédrico	19
1.3	Colapso Atômico	21
1.4	Organização do Tese	25
2	Conceitos Fundamentais	26
2.1	Efeito Fano	26
2.2	Modelo de Anderson de uma Impureza	29
2.3	Fase de Berry	30
3	Formalismo Matemático	33
3.1	Funções de Green	33
3.2	Equação de Movimento	34
3.2.1	Aproximação de Hubbard I	36
4	Multi-Weyl	38
4.1	Modelo Adotado: Multi-Weyl	39
4.2	Densidade Local de Estados	43
4.3	Auto-Energia local	49
4.4	Função de Green das Impurezas	55
4.5	Perfil Natural Fano	57
5	Grafeno Multicamadas Romboédrico	59
6	Resultados e discussão	62
6.1	Topological charge Fano effect in multi-Weyl semimetals	62

6.2	Analog of atomic collapse for adatoms on rhombohedral graphene	73
7	Considerações Finais	81
7.1	Topological charge Fano effect in multi-Weyl semimetals	81
7.2	Analog of atomic collapse for adatoms on rhombohedral graphene	82
8	Publicações e Perspectivas Futuras	83

Lista de Figuras

1.1	Imagem esquemática dos nós de Weyl no espaço recíproco, com suas respectivas projeções nas bordas da amostra, indicando os estados de superfície (Arcos de Fermi).(Imagem Retirada de [15]).	15
1.2	Esquema dos autovalores para os três regimes de interesse: (a) semimetal de Dirac ($Q_0 = 0$ e $\mathbf{Q} = \mathbf{0}$), (b) IS-quebrada Weyl ($Q_0 \neq 0$ e $\mathbf{Q} = \mathbf{0}$), e (c) TRS-quebrada Weyl ($Q_0 = 0$ e $\mathbf{Q} \neq 0$).	17
1.3	(a) Relação de dispersão versus componentes do momento, com quebra da TRS, formando os nós de Weyl em $k_z = \pm k_0$. (b) Curvatura de Berry com nós em $k_z = \pm k_0$ (Imagem retirada de [17]).	17
1.4	Relação de dispersão energética de um semimetal de multi-Weyl com (a) $J = 1$, (b) $J = 2$ e (c) $J = 3$, sendo que $k_y = 0$. Ambas com TRS e IS quebradas (Imagem retirada de [2]).	19
1.5	Perspectiva lateral e superior do multigrafeno seguindo o empilhamento do tipo ABC (Imagem retirada de [23]).	20
1.6	Diferentes arranjos para o empilhamento de camadas de grafeno. (a) Empilhamento Bernal, também conhecido como ABA; (b) Empilhamento AAA; (c) Empilhamento ABC. (Imagem retirada de [25]).	20
1.7	Perspectiva lateral do multigrafeno romboédrico seguindo o empilhamento do tipo ABC, com os respectivos acoplamentos $\gamma_0, \gamma_1, \gamma_2, \gamma_3$ e γ_4 . (Imagem retirada de [28]).	21
1.8	Evolução dos clusters de impurezas carregadas do regime subcrítico para o supercrítico (Imagem retirada de [22]).	24

2.1	a) Visão esquemática de dois osciladores amortecidos acoplados, sob a ação de uma força externa $F(\omega) = \cos(\omega t)$. No painel b) é exibido a dependência da amplitude de oscilação do oscilador forçado em função da frequência (ω) oriunda da força externa, sendo possível identificar dois tipos de ressonâncias, uma com perfil simétrico em $\omega_- \approx 1$ e outra com padrão assimétrico, com ponto de mínimo em $\omega_+ \approx 1.21$, respectivamente. c) O segundo oscilador acoplado responde apenas com perfis ressonantes simétricos (Figura adaptada de [38]).	27
2.2	Perfis de Interferência Fano para os casos em que o parâmetro de fano assume os valores $q = 0$, $ q = \infty$ e $q = 1$ (Figura retirada de [37]).	28
2.3	Esquematização de um sistema constituído por uma impureza adsorvida em um hospedeiro metálico.	29
2.4	Representação esquemática da densidade local de estados ($LDOS$) do sistema, exibindo dois picos de Hubbard localizados exatamente em ε_d e $\varepsilon_d + U$. A semi-largura dos picos de Hubbard está indicada por Γ e o nível de fermi é indicado por $\varepsilon_F = 0$	30
4.1	Visão geral do efeito Fano oriundo da carga topológica em semimetais de multi-Weyl. (a) Representação esquemática do semimetal de multi-Weyl com uma impureza enterrada. Estruturas de banda correspondentes da Eq.(4.3), com $k_y = 0$ e $Q_0 = 0.4k_D$ são ilustradas nos painéis (b), (c) e (d) para quando $J = 1$ (Weyl), para $J = 2$ (Weyl-duplo) e para $J = 3$ (Weyl-triplo) respectivamente. Nos painéis (b), (c) e (d) são indicados os Perfis Fano versus a energia em coordenadas naturais (adimensional). Note que o perfil Fano evolui do comportamento ressonante (b) para o tipo antirressonante (d) à medida que J aumenta. A quantidade de pares de arcos de Fermi esta estritamente relacionado com o valor do <i>Winding Number</i> J , já que o número de arcos de Fermi é igual a $2J$ [4], modulando a forma de perfil de Fano. Este perfil Fano é determinado pelo valor absoluto do parâmetro de assimetria Fano $ q_J = \tan(C_{2J})$ [painel (c)], onde $C_{2J} \equiv (360^\circ/2J)$ representa o ângulo do grupo de simetria rotacional. Em resumo, a correspondência “ <i>bulk-boundary</i> ” [4] define o perfil Fano em sistemas multi-Weyl (Figura retirada de [12]).	40

5.1	(a) Representação numa perspectiva lateral do grafeno multicamadas seguindo o empilhamento do tipo ABC e um átomo adsorvido no seu topo[painel (a)-I].(b) – (d) Nestes painéis são registrados as estruturas de bandas para $J = 3, 4$ e 6 , sendo tais estruturas obtidas a partir da relação de dispersão 5.2. Nos painéis também são ilustrados o alargamento de quasipartículas versus energia, sendo possível identificar um estado sem dispersão e uma singularidade de van Hove na energia de Fermi, respectivamente. Ao aumentar a fase Berry $J\pi$, a extensão da banda chata no espaço recíproco também aumenta. Além disso, J representa o total de monocamadas.(Figura retirada de [28]).	60
5.2	Os três locais de adsorção que podem ser considerados são: <i>Hollow</i> (H) que é indicado no centro do hexágono, <i>Bridge</i> (B) que corresponde ao meio da ligação em entre dois átomos de carbono, e <i>Top</i> (T) indicado sobre um átomo de carbono.(Figura retirada de [58]).	61
8.1	No painel central é representado numa perspectiva lateral o grafeno multicamadas seguindo o empilhamento do tipo ABC e um átomo adsorvido em seu topo. Nos painéis (a)-(d) são exibidos a modulação do perfil Fano em função de x_i (x , representado pelas linhas sólidas, ou \bar{x} , representado pelas linhas tracejadas) para diferentes números de camadas (J) no ABC grafeno multicamadas empilhado. O perfil Fano obtido para $J = 1$ (b) assemelha-se ao obtido para o caso em que $J = 8$ (a). Também comparamos o perfil de ressonância Fano para o grafeno multicamadas ($J \gg 1$) com o obtido para um semimetal de Weyl ($J = 1$), conforme apresentado nos painéis (c) e (d).	84
8.2	Representação de uma barra de semimetal multi-Weyl, na qual duas impurezas estão acopladas lateralmente. Neste sistema, nossa intenção é investigar o colapso dos picos de Hubbard na densidade de estados ao quebrarmos a simetria de inversão ($Q \neq 0$). Esse processo conduz à formação de um único pico em zero ($\varepsilon_F = 0$), ou seja, manifestando um único modo zero. Este modo zero é resultado da fusão entre os estados moleculares comuns, ocorrendo quando a simetria de inversão é quebrada.	85
8.3	Representação numa perspectiva lateral do grafeno multicamadas seguindo o empilhamento do tipo ABC, com dois átomos adsorvidos. Neste sistema pretendemos explorar o possível colapso molecular, efeito análogo ao colapso atômico. .	85

Capítulo 1

Introdução

Em nosso estudo, direcionamos nossa atenção para dois sistemas distintos: o multi-Weyl e o grafeno romboédrico multicamadas, como objetos de investigação. Nesse contexto, optamos por subdividir a introdução em quatro seções, sendo as três iniciais dedicadas à apresentação dos efeitos decorrentes de cada sistema, proporcionando assim uma análise individualizada para uma compreensão mais aprofundada. Na última seção deste capítulo introdutório, apresentamos a organização da tese.

1.1 Semimetais de multi-Weyl

Na comunidade científica, os semimetais multi-Weyl emergem como uma categoria envolvente de materiais, capturando um interesse cada vez maior. Suas propriedades eletrônicas exóticas e fenômenos quânticos distintos os tornam notáveis, marcando assim o início de uma nova era na pesquisa em física de materiais [1,2]. Semimetais de multi-Weyl são generalizações intrigantes dos semimetais de Weyl [1–11]. Em semimetais de multi-Weyl, as estruturas de banda nos chamados nós de Weyl apresentam relações de dispersão altamente anisotrópicas, sendo relativísticas exclusivamente em uma direção do momento, enquanto nas outras duas, exibe uma dependência da lei de potência governada exclusivamente pela carga topológica J [12]. Este número topológico corresponde ao número de *Chern* [13]. Como os nós de Weyl aparecem em pares com quiralidades opostas, eles se comportam como emissor e receptor do fluxo da curvatura de Berry, podendo ser vistos como (anti)monopólos colocados distantes um do outro no espaço recíproco. A grandeza denominada quiralidade (χ) é definida como a

projeção do vetor de spin s na direção do momento linear p da partícula, ou seja:

$$\chi = \frac{\mathbf{p} \cdot \mathbf{s}}{|\mathbf{p} \cdot \mathbf{s}|}. \quad (1.1)$$

Dessa forma, os elétrons de um nó de Weyl possuem momento linear com orientação paralela à projeção de spin $\chi = 1$, enquanto que os elétrons do outro nó exibem uma projeção anti-paralela $\chi = -1$. Como resultado dessa disposição, surgem monopolos magnéticos no espaço recíproco, conforme pode ser visualizado na Fig. 1.1. Surpreendentemente, tais nós de Weyl (monopolos magnéticos do espaço recíproco) são conectados uns aos outros por estados de superfície, conhecidos como arcos de Fermi ilustrados na Fig 1.1. Tais estados de superfície só podem emergir nas bordas de uma amostra 3D [14]. A observação destes estados exóticos é possível através da técnica experimental ARPES (*Angle-resolved photoemission spectroscopy*), sendo este um ponto notável [13], transformando-se na prova experimental da existência de monopolos magnéticos no espaço recíproco.

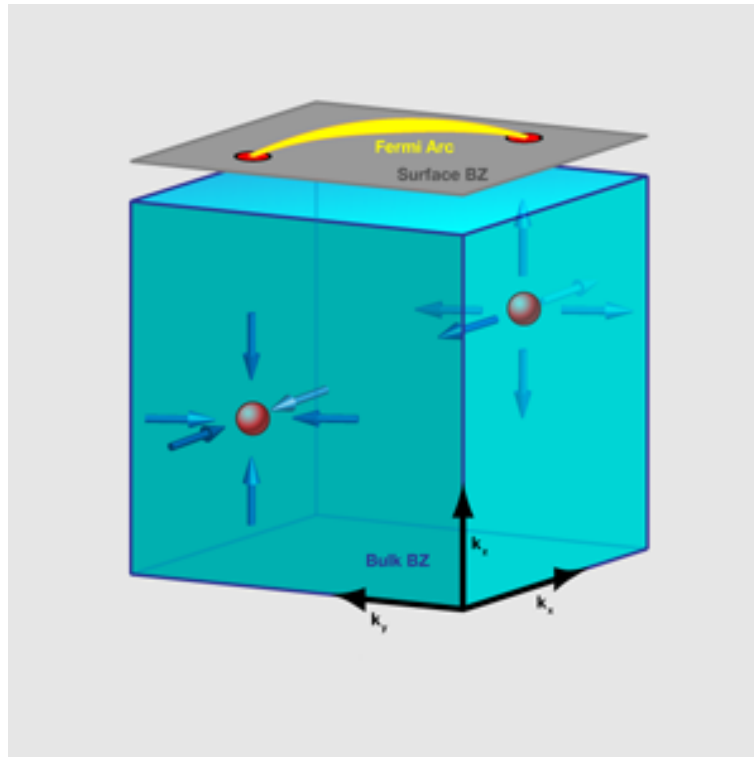


Figura 1.1: Imagem esquemática dos nós de Weyl no espaço recíproco, com suas respectivas projeções nas bordas da amostra, indicando os estados de superfície (Arcos de Fermi). (Imagem Retirada de [15]).

A característica fundamental dos semimetais relativísticos tratados neste trabalho é a localização precisa do nível de Fermi no ponto de contato entre duas bandas com dispersão

relativística. Este fenômeno pode ser observado em certos materiais que possuem uma relação de dispersão linear que satisfaz a equação de Dirac, como por exemplo: grafeno, semimetal de Dirac, semimetal de Weyl e entre outros. Portanto, podemos descrever estes sistemas por meio de Hamiltonianos de baixas energias, que oferecem uma representação precisa da Física em torno do nível de Fermi. Logo, o Hamiltoniano de um semimetal de Dirac é dado por:

$$H_D = h_+(\mathbf{k}) \oplus h_-(\mathbf{k}), \quad (1.2)$$

onde

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

em que v_F é velocidade de Fermi, $\mathbf{k} = (k_x, k_y, k_z)$ é o vetor de onda e $\boldsymbol{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$ são as matrizes de Pauli. A grandeza física $\chi = \pm 1$, indicada na equação anterior representa a quiralidade. A partir do Hamiltoniano descrito na Eq. (1.2) e seus respectivos autovalores obtemos dois pares de bandas degenerados (cones de Dirac sobrepostos exibindo mesmo momento e energia) [16]. Assim, ao descrever a degenerescência do par de nós de Weyl devido à quiralidade, observa-se a sobreposição de duas bandas de energia, como ilustrado na Fig. 1.2 (a).

Para obter o Hamiltoniano de Weyl devemos quebrar a simetria de reversão temporal (TRS) ou a simetria de inversão (IS) no Hamiltoniano de Dirac. Tais simetrias podem ser quebradas adicionando-se os termos \mathbf{Q} e Q_0 na Eq. (1.3),

$$h_\chi = \chi [\hbar v_F \boldsymbol{\sigma} \cdot (\mathbf{k} - \chi \mathbf{Q}) + \sigma_0 Q_0], \quad (1.4)$$

sendo que o termo Q_0 (\mathbf{Q}) é responsável por quebrar a IS (TRS). Logo, o caso em que $Q = 0$ e $\mathbf{Q} = \mathbf{0}$ temos um semimetal de Dirac, que possui sua estrutura de banda representada na Fig. 1.2 (a). A situação em que temos uma quebra de IS ($Q_0 \neq 0$), mas que preserva a TRS ($\mathbf{Q} = \mathbf{0}$), há uma separação dos nós de Weyl na energia, mas com mesmo momento, conforme é indicado na Fig. 1.2 (b). Já a situação em que temos preservação da IS ($Q_0 = 0$), mas com quebra da TRS ($\mathbf{Q} \neq \mathbf{0}$), há uma separação dos nós de Weyl no espaço do momento, conforme é indicado na Fig. 1.2 (c).

Para contrastarmos a conexão dos nós de Weyl, com a curvatura de Berry e a estrutura de banda do semimetal de Weyl observe a Fig. 1.3 (a) e (b), onde fica evidente que tais nós de Weyl desempenham papel análogo a monopolos magnéticos.

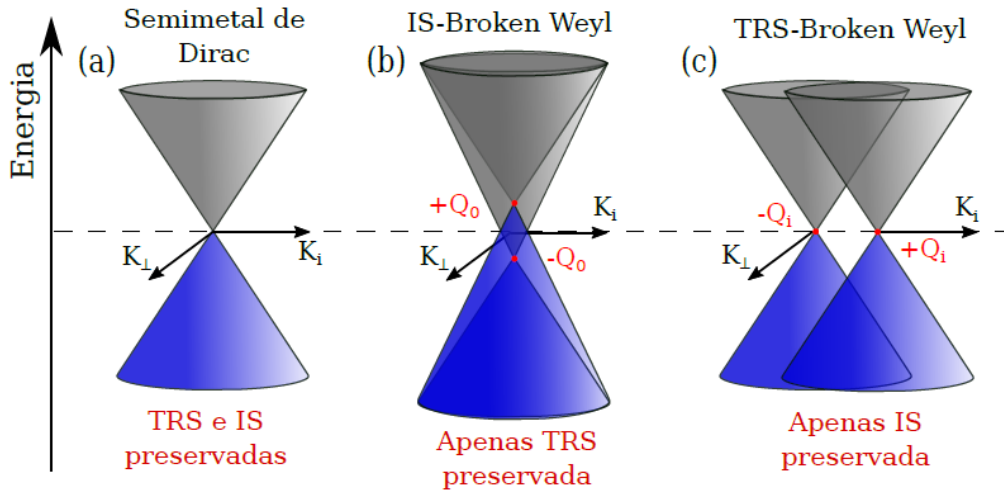


Figura 1.2: Esquema dos autovalores para os três regimes de interesse: (a) semimetal de Dirac ($Q_0 = 0$ e $\mathbf{Q} = \mathbf{0}$), (b) IS-quebrada Weyl ($Q_0 \neq 0$ e $\mathbf{Q} = \mathbf{0}$), e (c) TRS-quebrada Weyl ($Q_0 = 0$ e $\mathbf{Q} \neq \mathbf{0}$).

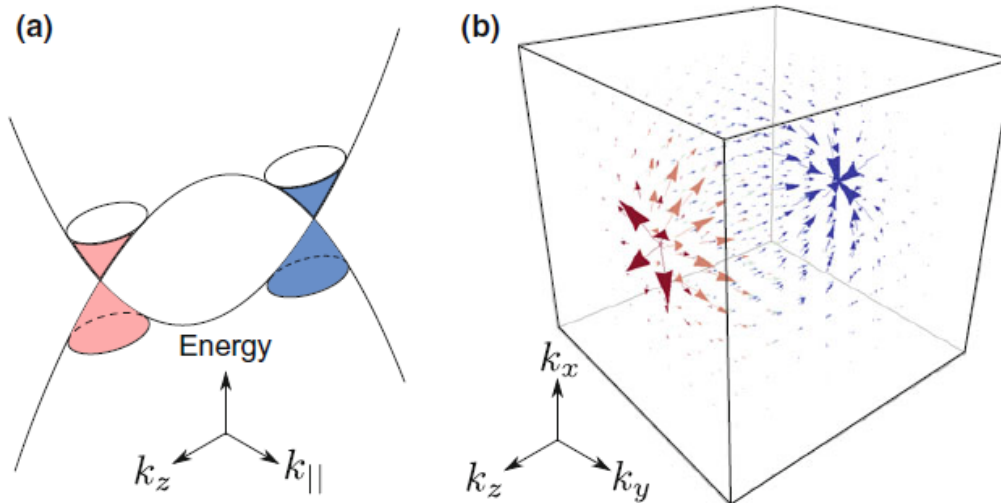


Figura 1.3: (a) Relação de dispersão versus componentes do momento, com quebra da TRS, formando os nós de Weyl em $k_z = \pm k_0$. (b) Curvatura de Berry com nós em $k_z = \pm k_0$ (Imagem retirada de [17]).

Como já foi discutido, nos semimetais de Weyl observa-se uma dispersão energética que sempre escala linearmente com qualquer componente do momento. Mas, nosso propósito é investigar semimetais de multi-Weyl e nos concentramos na correspondência “*bulk-boundary*” para estados de superfície (arcos de Fermi) e a carga topológica do *bulk*, a fim de apresentar o conceito de efeito Fano oriundo da carga topológica nos semimetais de multi-Weyl, já que a carga topológica introduz uma anisotropia na relação de dispersão. Evidenciando como a carga topológica modula quantidade de pares de arcos de Fermi do sistema e este por sua vez modifica o perfil Fano do *bulk*. O modelo que descreve tais semimetais é construído de forma que a relação de dispersão da energia seja linear apenas ao longo de uma das componentes do momento, conforme pode ser observado na Fig. 1.4. Essa dependência não linear ao longo de duas componentes do momento é introduzida por intermédio do número topológico denominado carga topológica (J), este assume valores inteiros [18]. Um semimetal de Weyl é um caso particular dos semimetais de multi-Weyl obtido quando $J = 1$. No capítulo 4 será explicitado de maneira minuciosa como a carga topológica (também chamada de *Winding Number*) é implementada no modelo.

Em busca de criar um semimetal de Weyl em laboratório, vários grupos de pesquisa enfrentaram insucessos. No entanto, em 2015, liderada por Su-Yang Xu e M. Zahid Hasan, uma equipe do *Laboratory for Topological Quantum Matter and Spectroscopy* da Universidade de Princeton, em colaboração com outros cientistas, alcançou êxito ao sintetizar o arseneto de tântalo (TaAs) como o primeiro semimetal de Weyl em condições experimentais. Essa realização possibilitou a observação dos nós de Weyl e dos arcos de Fermi, características distintivas de um semimetal de Weyl, por meio da técnica ARPES [19]. Também podemos destacar os materiais HgCr_2Se_4 e SrSi_2 que exibem a assinatura de um semimetal de multi-Weyl obtida via ARPES para o caso em que $J = 2$ (Weyl-duplo) [6, 9, 20, 21], assim como $\text{A}(\text{MoX})_3$ ($\text{A}=\text{Rb}$ or Tl and $\text{X}=\text{Te}$) é o material que emula o multi-Weyl para o caso em que $J = 3$ (Weyl-triplo) [7].

Nesta tese, determinamos o parâmetro de assimetria Fano (q_J), ao considerar uma única impureza adsorvida a um semimetal de multi-Weyl. Assim verificamos que para $J > 2$ temos parâmetros de assimetria Fano discretizados. Isso nos permitiu introduzir o conceito do efeito Fano decorrente de uma carga topológica. Seguindo o princípio de correspondência “*bulk-boundary*”, que estabelece que o número de arcos de Fermi nas bordas de um sistema é determinado pela magnitude da carga topológica, revelamos a modulação do perfil Fano do sistema por meio desses estados de superfície. Ajustando o valor da carga topológica, observa-

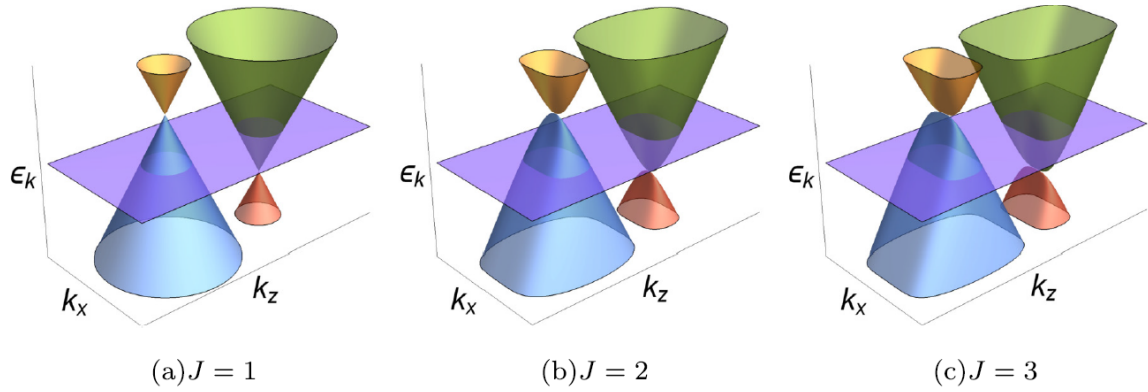


Figura 1.4: Relação de dispersão energética de um semimetal de multi-Weyl com (a) $J = 1$, (b) $J = 2$ e (c) $J = 3$, sendo que $k_y = 0$. Ambas com TRS e IS quebradas (Imagem retirada de [2]).

mos a evolução do perfil Fano desde o padrão ressonante, no caso em que $J = 1$ (semimetal de Weyl), até o perfil Fano antirressonante, identificado no regime dos semimetais hiper-Weyl ($J \gg 1$). No capítulo 2 na seção 2.1 é discutido em detalhes o que chamamos de efeito Fano.

1.2 Grafeno Multicamadas Romboédrico

O grafeno multicamadas romboédrico é uma forma específica de estrutura de grafeno, composta por várias camadas de grafeno empilhadas de maneira romboédrica, conforme é apresentado na Fig. 1.5. Cada camada consiste em uma única camada de átomos de carbono dispostos em uma estrutura hexagonal. Essas características fazem do grafeno multicamadas romboédrico um material de interesse para diversas aplicações tecnológicas, incluindo eletrônica, nanotecnologia e materiais avançados [22].

Quando sobrepomos várias camadas de grafeno, as propriedades eletrônicas e estruturais se tornam notavelmente distintas em comparação com uma única camada. É crucial observar que o grafeno de poucas camadas exibe comportamento diferente do grafite. Após empilhar cerca de $J = 10$ camadas, os cálculos de *tight binding* indicam uma transição da dimensionalidade 2D (grafeno) para 3D (grafite) [24]. Observe que J é agora um número associado a quantidade de camadas empilhadas. Portanto, o grafeno de poucas camadas constitui uma entidade singular, exibindo características típicas de uma estrutura bidimensional (2D).

É possível organizar as camadas de grafeno de diversas maneiras. O empilhamento mais energeticamente favorável é conhecido como Bernal (ABA) [24]. Nesse arranjo, observa-se claramente um deslocamento lateral entre os planos A e B. Sendo que em cada par de átomos

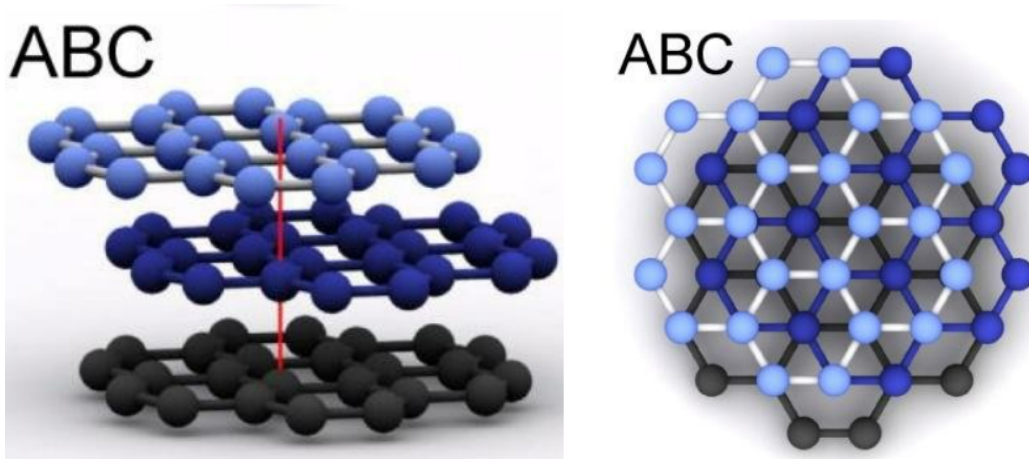


Figura 1.5: Perspectiva lateral e superior do multigrafeno seguindo o empilhamento do tipo ABC (Imagem retirada de [23]).

consecutivos na camada A, um deles coincide com a posição de um átomo na camada B (folha adjacente), enquanto o outro se situa no centro equivalente de um hexágono na mesma camada B conforme pode ser visualizado na Fig. 1.6 (a). No empilhamento AAA, uma camada está diretamente sobreposta à outra conforme é exibido na Fig 1.6 (b). Uma disposição alternativa é o empilhamento ABC (Fig 1.6 (c)), caracterizado por uma simetria romboédrica. Nesse padrão, observa-se que um dos átomos em uma camada se alinha com um átomo na camada adjacente, enquanto o outro se posiciona sobre um átomo que está duas camadas acima ou abaixo. É importante destacar que o tipo de empilhamento reflete diretamente na relação de dispersão, modificando drasticamente a estrutura de bandas do material.

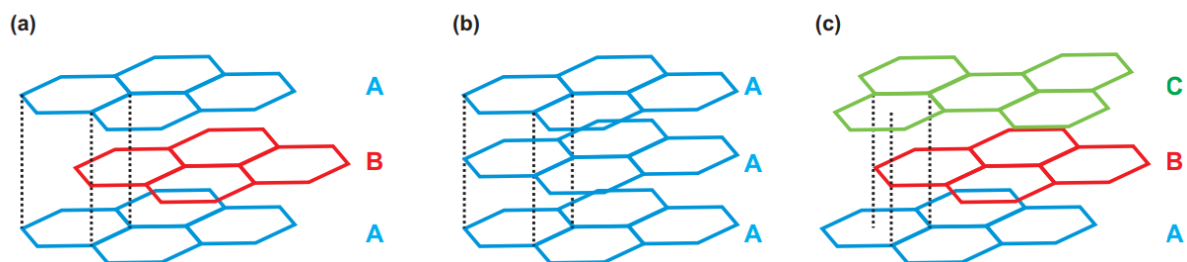


Figura 1.6: Diferentes arranjos para o empilhamento de camadas de grafeno. (a) Empilhamento Bernal, também conhecido como ABA; (b) Empilhamento AAA; (c) Empilhamento ABC. (Imagem retirada de [25]).

A importância de destacar o grafeno multicamadas romboédrico reside no fato de que, para a formulação do Hamiltoniano que descreve esse sistema, é suficiente considerar o modelo que descreve os elétrons livres de um semimetal de multi-Weyl e neste desprezar a velocidade efetiva das quasipartículas ao longo do eixo z ($v_z = 0$) [26, 27]. Quando efetivamos o empilhamento

do tipo ABC, vários acoplamentos ($\gamma_0, \gamma_1, \gamma_2, \gamma_3$ e γ_4) podem emergir como indicado na Fig. 1.7, porém neste modelo em que $v_z = 0$, são levados em conta apenas os acoplamento γ_0 e γ_1 , sendo os demais desprezados [26,27].

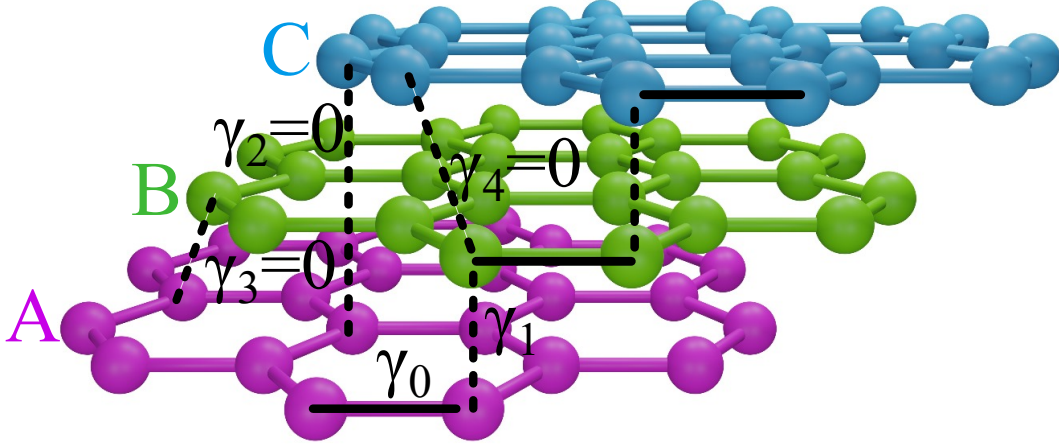


Figura 1.7: Perspectiva lateral do multigrafeno romboédrico seguindo o empilhamento do tipo ABC, com os respectivos acoplamentos $\gamma_0, \gamma_1, \gamma_2, \gamma_3$ e γ_4 . (Imagem retirada de [28]).

Em algumas plataformas da matéria condensada, sistemas baseados em grafeno ganham destaque como eficazes emuladores do fenômeno conhecido como colapso atômico [22, 29, 30]. A relevância significativa desses sistemas para esse fenômeno é derivada das propriedades particulares que surgem da supercriticalidade de carga artificialmente gerada e amplamente reconhecida nesses materiais [31]. O colapso atômico, previsto pela física atômica relativística, refere-se à ultrapassagem da carga de um núcleo além de seu limite. Durante esse processo, o núcleo adquire a capacidade de capturar um elétron, seguido pela emissão de um pósitron. Observar/Estudar esse fenômeno demanda núcleos ultrapesados, que não ocorrem na natureza. Infelizmente, apesar dos esforços para criar as condições apropriadas que simulem esses átomos no contexto experimental nativo, a descrição do colapso atômico permanece fora de alcance. No entanto, plataformas baseadas em grafeno tem revelado aspectos promissores para percepção de tal fenômeno.

1.3 Colapso Atômico

A supercriticalidade nos átomos ocorre quando o acoplamento de Coulomb $\beta = Z\alpha$, excede um valor crítico, onde Z é o número atômico e $\alpha \approx 1/137$ é a constante de estrutura fina [30].

Neste regime, os orbitais eletrônicos, começando com o estado 1S, afundam no contínuo de Dirac até que Z seja reduzido ao valor crítico. Este processo, conhecido como colapso atômico, é acompanhado pela polarização do vácuo e pela geração espontânea de pósitrons. Mas o acesso a esta nova física requer núcleos ultrapesados que não existe na natureza [30]. No grafeno, onde a constante efetiva de estrutura fina, $\alpha_g = \alpha (c/v_F) \approx 2$, é muito maior, o acoplamento crítico, $\beta_c = (Z_c/k) \alpha_g = 0.5$, podendo ser alcançado por uma taxa relativamente modesta (c é a velocidade da luz, v_F a velocidade de Fermi e k a constante dielétrica efetiva). A transição para o regime supercrítico no grafeno é marcada pelo surgimento de uma sequência de estados quase ligados que podem aprisionar elétrons [30].

Dado que a tabela periódica atual se estende até o número atômico 118, é razoável conceber que a obtenção de um núcleo supercrítico com $Z \gtrsim 170$ está consideravelmente além das capacidades tecnológicas atuais. Houve diversas tentativas de observar a emissão de pósitrons provenientes de núcleos supercríticos gerados através da colisão de íons pesados, entretanto, os resultados obtidos foram inconclusivos [32, 33]. Felizmente, o grafeno nos fornece uma plataforma conveniente para explorar tal física relativística, já que os elétrons no grafeno se comportam como partículas relativísticas de Dirac sem massa, havendo previsões teóricas de que impurezas carregadas no grafeno poderiam produzir estados de colapso atômico, com buracos na banda de valência desempenhando o papel de pósitrons [34]. Os férmions de Dirac exibem um deslocamento com velocidade v_F no grafeno. Isso resulta no aumento da constante efetiva de estrutura fina por um fator de $\frac{c}{v_F} \approx 300$. Como resultado, a carga crítica Z_c necessária para o comportamento supercrítico é consideravelmente diminuída, e portanto a detecção do colapso atômico no grafeno não demanda valores extraordinariamente elevados da carga nuclear [22].

O trabalho intitulado *Observing Atomic Collapse Resonances in Artificial Nuclei on Graphene* [22] descreve de forma eficiente um experimento em que estados de colapso atômico são identificados em torno de núcleos artificiais montados na superfície do grafeno. Tais núcleos artificiais são criados usando uma ponta de STM (*Scanning Tunneling Microscope*) para unir dímeros de Ca ionizados. No trabalho citado acima, para caracterizar o efeito que os núcleos artificiais tem no movimento dos férmions de Dirac sem massa no grafeno, foram mensurados as condutâncias diferenciais dI/dV em função da voltagem para vários valores de distância lateral do centro de cada conjunto de dímeros de Ca , este resultado pode ser visualizado na Fig. 1.8, vale destacar que tais espectros são normalizados. Observando a Fig. 1.8, são nítidas as diferenças entre cada conjunto de espectros adquiridos dI/dV para cada núcleo artificial.

Os espectros para o caso em que o cluster possui 2 dímeros de Ca (Fig. 1.8 (B)) exibe maior assimetria elétron-buraco do que para o sistema de um dímero (Fig. 1.8 (A)), bem como uma oscilação extra em uma energia acima do ponto de Dirac. Os espectros obtidos para clusters de 3 dímeros de Ca (Fig. 1.8 (C)) mostram uma assimetria elétron-buraco ainda mais forte, e a oscilação começou a formar uma estrutura semelhante a uma ressonância próximo de $V_s = 0.30V$.

Para espectros obtidos no caso de 4 dímeros de Ca (Fig. 1.8 (D)), a estrutura semelhante à ressonância aumentou em intensidade e coalesceu em um pico agudo com uma energia bem definida próximo ao ponto de Dirac. Finalmente para o caso de 5 dímeros de Ca (Fig. 1.8 (E)), a energia da ressonância deslocou-se para abaixo do ponto de Dirac. A formação desta ressonância representa a transição do regime subcrítico para o regime supercrítico e o surgimento de um estado de colapso atômico quase ligado, ou seja, como consequência, esses átomos dentro deste regime supercrítico exibe um estado ligado virtual localizado aparecendo na densidade local de estados (LDOS) como um estado ressonante abaixo do nível de Fermi, reproduzindo o estado de colapso atômico. Os painéis à direita ((F)-(J)) na Fig. 1.8 indicam os resultados teóricos nos mesmos regimes experimentais, com a respectiva carga crítica.

Pelo que já foi discutido ao considerarmos a reprodução do colapso atômico sabemos então que a monocamada de grafeno é uma plataforma alternativa, que já demonstrou confiabilidade nesse aspecto, surge a indagação sobre a viabilidade das heteroestruturas contemporâneas de van der Waals poderem igualmente se candidatar a tal feito. Como exemplo, podemos citar o grafeno bicamada torcido, caracterizados por uma banda chata e singularidade de van Hove no nível de Fermi em um ângulo específico de torção. Porém, para todo o cumprimento dessas características, é necessário um ajuste fino do “ângulo mágico de torção” e das condições de potencial moiré. Para superar tal desafio técnico, uma maneira é levar em consideração o grafeno romboédrico multicamadas [26, 35], que mostra naturalmente uma banda chata numa região próximo ao nível de Fermi, sendo que sua origem não está relacionada ao aparecimento de uma super-rede de *moiré*, induzida por uma torção. Curiosamente, isto é atribuído à sua densidade de estados divergente (DOS) exatamente no nível de Fermi, sendo exibido um estado sem dispersão [26]. Assim, o sistema é conhecido como *moiréless*, ou seja, não há formação do padrão de super-rede de *moiré*.

Conseqüentemente, com base neste útil aspecto experimental, nos beneficiamos dele dentro de uma perspectiva teórica ao propor um efeito análogo ao colapso atômico. Aqui, descobrimos

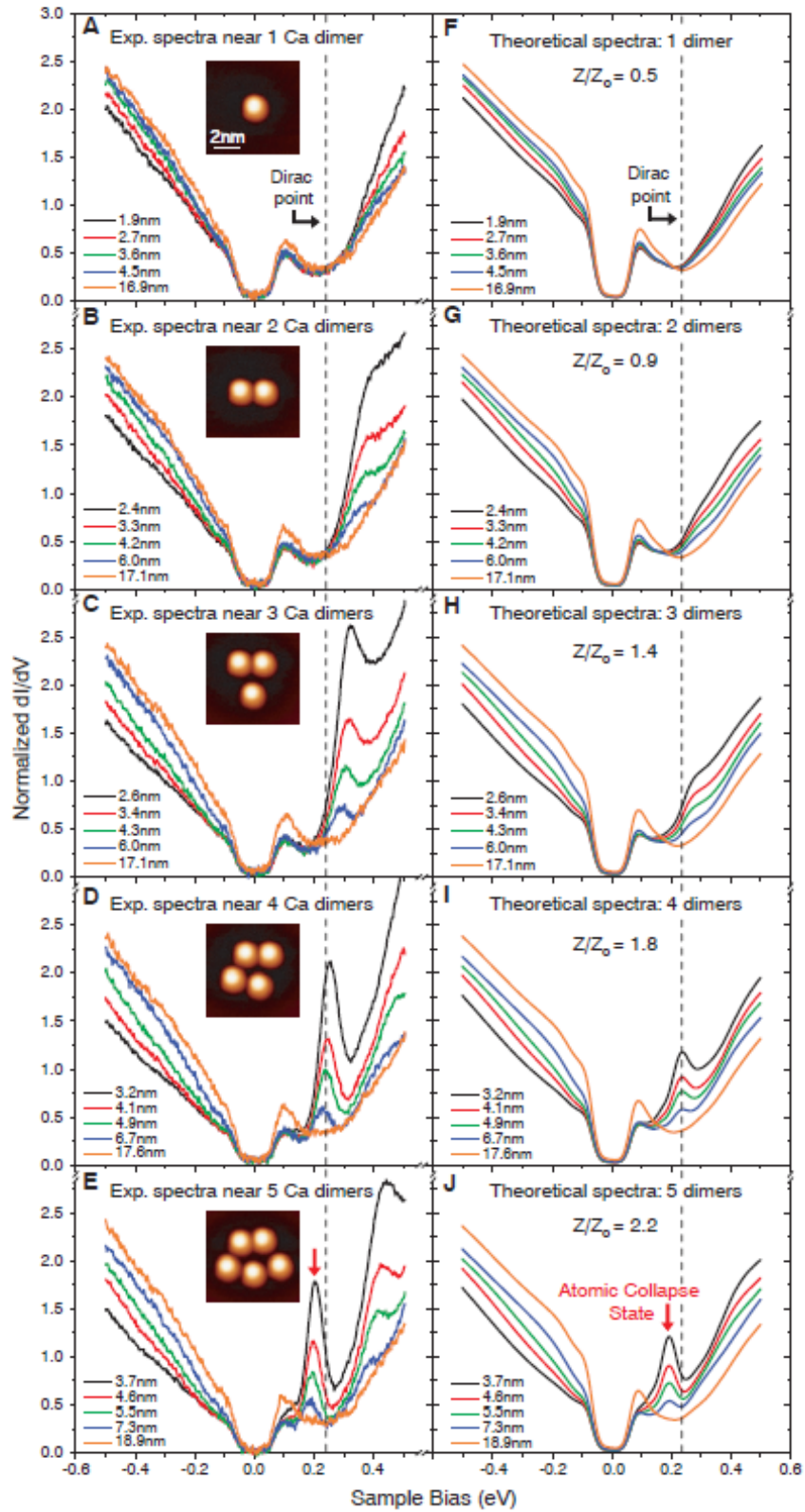


Figura 1.8: Evolução dos clusters de impurezas carregadas do regime subcrítico para o supercrítico (Imagem retirada de [22]).

que o multigrafeno do empilhamento do tipo ABC se transforma em uma nova plataforma para esse fim. Diferente dos resultados anteriores, o comportamento relatado aqui é o resultado da interação entre as correlações de Coulomb e da singularidade de van Hove na energia de Fermi. Curiosamente, esta singularidade entra na lei de potência do hospedeiro DOS, que segue $|\varepsilon - \varepsilon_F|^{2/J-1}$, sendo ε_F a energia de Fermi e leva a uma divergência para $J \geq 3$, com fase de Berry $J\pi$.

1.4 Organização do Tese

Este trabalho está estruturado da seguinte maneira:

1. No capítulo 2, realizamos uma breve descrição dos conceitos fundamentais essenciais para a compreensão do modelo que descreve um semimetal de multi-Weyl e o Grafeno Multicamadas Romboédrico. Além disso, apresentamos uma breve introdução sobre o efeito Fano.
2. No capítulo 3, apresentamos todo o formalismo matemático utilizado para a obtenção das soluções analíticas.
3. No capítulo 4 apresentamos o modelo que descreve um semimetal de multi-Weyl e também todo o tratamento analítico desenvolvido para obtenção da densidade local de estados (do inglês, LDOS: local density of states) na forma Fano.
4. No capítulo 5 discutimos como obter um Hamiltoniano que descreve o Grafeno Multicamadas Romboédrico e recorreremos ao formalismo desenvolvido nos capítulos 3 e 4 para obtenção dos resultados analíticos.
5. No capítulo 6, apresentamos e discutimos os resultados numéricos derivados das soluções analíticas encontradas nos capítulos 4 e 5.
6. O capítulo 7 é dedicado as considerações finais do trabalho.

Capítulo 2

Conceitos Fundamentais

Neste capítulo serão apresentados conceitos relevantes para melhor compreensão dos assuntos abordados nos capítulos 4 e 5. Deste modo, iniciaremos com uma breve discussão sobre o efeito Fano, em seguida será explorado o modelo de Anderson com uma impureza, já que as premissas consideradas neste modelo serão estendidas para formulação dos Hamiltonianos referentes aos sistemas tratado nos capítulos 4 e 5.

2.1 Efeito Fano

Em 1961, Ugo Fano identificou o fenômeno que ficou conhecido como efeito Fano enquanto examinava linhas espectrais de átomos que exibiam assimetria durante os processos de absorção [36]. No entanto, apesar de ter surgido num contexto de física atômica, o mesmo não é exclusivo da mecânica quântica. Resumidamente, esse efeito mencionado do ponto de vista quântico ocorre devido à interferência quântica entre diferentes integrais de caminho ou canais de tunelamento eletrônico, que estão localizadas entre um espectro contínuo de energia e níveis discretos [37]. Entretanto, observando o panorama de maneira mais abrangente, o efeito Fano, que está vinculado a padrões de interferências, deve manifestar-se invariavelmente quando se encontrarem dois elementos essenciais: um espectro contínuo de energia (frequência) e um componente discreto.

Para que possamos compreender o que é este fenômeno denominado efeito Fano e discutir o papel qualitativo do contínuo e discreto de energia, vamos analisar a dinâmica de um sistema constituído por um par de osciladores clássicos acoplados à uma mola, conforme é exibido na Fig. 2.1 (a). Perceba que no esquema ilustrado na Fig. 2.1 (a) há uma força externa da forma

$F(\omega) = \cos(\omega t)$ sendo aplicada em um dos osciladores. Além disso, cada oscilador exibe uma frequência discreta natural ω_1 e ω_2 , assim como cada oscilador exibe uma amplitude de oscilação C_1 e C_2 , respectivamente. Note que a contribuição do contínuo de frequências é introduzida pela força externa, enquanto a contribuição do discreto é implementada pelas frequências naturais ω_1 e ω_2 . Assim, temos os dois ingredientes necessários para a verificação do efeito Fano.

As propriedades ressonantes são verificadas na análise das amplitudes $|C_1|$ e $|C_2|$ em função da frequência ω , conforme é ilustrado nas Figs. 2.1 (b) e (c). Assim, a amplitude $|C_1|$ exibe dois picos sendo um ressonante em $\omega_- \approx 1$ e outro perfil assimétrico com ponto de mínimo em $\omega_+ \approx 1.21$. O segundo oscilador acoplado responde apenas com perfis ressonantes simétricos conforme é apresentado na Fig. 2.1 (c). Note que os parâmetros ω_- e ω_+ exibidos nos painéis (b) e (c) da Fig. 2.1 são os respectivos modos normais de vibração.

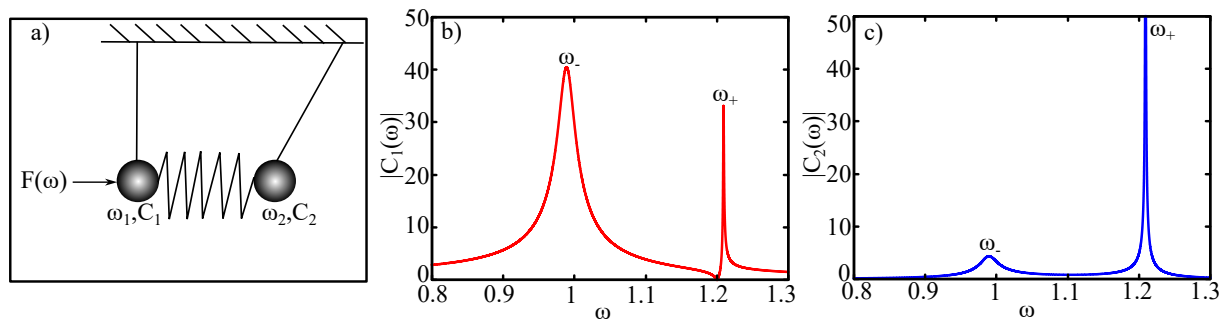


Figura 2.1: a) Visão esquemática de dois osciladores amortecidos acoplados, sob a ação de uma força externa $F(\omega) = \cos(\omega t)$. No painel b) é exibido a dependência da amplitude de oscilação do oscilador forçado em função da frequência (ω) oriunda da força externa, sendo possível identificar dois tipos de ressonâncias, uma com perfil simétrico em $\omega_- \approx 1$ e outra com padrão assimétrico, com ponto de mínimo em $\omega_+ \approx 1.21$, respectivamente. c) O segundo oscilador acoplado responde apenas com perfis ressonantes simétricos (Figura adaptada de [38]).

Para obtenção dos perfis de ressonância Fano, foi estabelecido que os mesmos podem ser obtidos a partir da fórmula Fano:

$$Fano\ profile = \frac{1}{1 + q^2} \left\{ \frac{(\omega + q)^2}{\omega^2 + 1} \right\}, \quad (2.1)$$

onde q é denominado parâmetro de assimetria ou parâmetro de Fano e ω é chamado de energia reduzida(adimensional). Note que a forma de perfil Fano a ser obtido é modulada pelo parâmetro q .

No sistema que será tratado no capítulo 4 os elétrons só podem percorrer os canais hospedeiro versus hospedeiro-impureza e neste caso o fator de Fano é dado por $q = \frac{Re(\Sigma_{Auto-Energia})}{-Im(\Sigma_{Auto-Energia})}$, como veremos mais adiante. Note que $\Sigma_{Auto-Energia}$ é a auto-energia do sistema e para metais tem-se

que $Re(\Sigma_{Auto-Energia}) = 0$ [39]. O que nos leva a concluir que o parâmetro q não desempenha papel algum na geração dos perfis Fanos quando estão sendo tratados hospedeiros metálicos [40].

A Fig. 2.2 exibe perfis fanos de interferência para os casos em que $q = 0$, $|q| = \infty$ e $q = 1$. Quando $q = 0$ e $|q| = \infty$, a LDOS na Fig. 2.2 apresenta um perfil ressonante (simétrico-positivo) e anti-ressonante(simétrico-negativo) respectivamente, os quais são indicados pelas curvas pontilhada-preta e vermelha-tracejada. Já para o caso em que $q = 1$ temos uma combinação de perfis anti-ressonante e ressonante, também chamado de perfil assimétrico. O caso assimétrico não é exclusividade do caso em que $q = 1$, o mesmo pode ser observado em regimes em que q assume valor finito e constante [41]. É importante ressaltar que os pontos de mínimo e máximo no perfil assimétrico observado na Fig. 2.2 são obtidos quando $\omega = -q$ e $\omega = 1/q$ respectivamente.

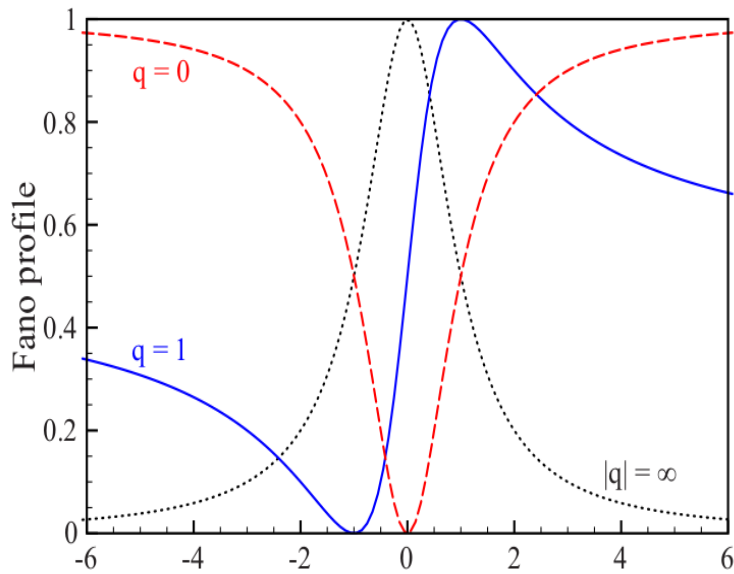


Figura 2.2: Perfis de Interferência Fano para os casos em que o parâmetro de fano assume os valores $q = 0$, $|q| = \infty$ e $q = 1$ (Figura retirada de [37]).

2.2 Modelo de Anderson de uma Impureza

O modelo de Anderson surge com a finalidade de descrever impurezas em hospedeiro metálicos [39]. Deste modo, o modelo proposto por Anderson, contendo um átomo localizado sobre um hospedeiro metálico está representado na Fig. 2.3. A intensidade da hibridização no esquema da Fig. 2.3 é modulada por V , de modo a garantir a interação impureza-hospedeiro.

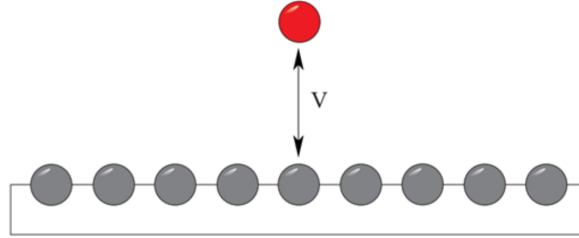


Figura 2.3: Esquematização de um sistema constituído por uma impureza adsorvida em um hospedeiro metálico.

O modelo de Anderson será explicitado nesta seção usando o formalismo de segunda quantização. Desta forma o modelo de Anderson de uma impureza (do inglês, *SIAM: Single Impurity Anderson Model*) pode ser expresso pelo Hamiltoniano [39],

$$H_{SIAM} = \sum_{\mathbf{k}\sigma} \varepsilon_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger} c_{\mathbf{k}\sigma} + \sum_{\sigma} \varepsilon_d d_{\sigma}^{\dagger} d_{\sigma} + \sum_{\mathbf{k}\sigma} V_{\mathbf{k}} \left(c_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger} d_{\sigma} + d_{\sigma}^{\dagger} c_{\mathbf{k}\sigma} \right) + U d_{\uparrow}^{\dagger} d_{\uparrow} d_{\downarrow}^{\dagger} d_{\downarrow}, \quad (2.2)$$

onde os operadores $c_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger}$ e $c_{\mathbf{k}\sigma}$ criam e aniquilam elétrons no hospedeiro metálico, com momento \mathbf{k} , spin σ e energia $\varepsilon_{\mathbf{k}}$, já os operadores d_{σ}^{\dagger} e d_{σ} criam ou aniquilam elétrons com spin $\sigma = \uparrow\downarrow$ localizados na impureza. O primeiro termo do Hamiltoniano da Eq. (2.2) descreve a banda de condução do hospedeiro metálico tal como um gás de elétrons não interagente, já o segundo termo representa a impureza, onde é descrita por um único sítio que pode ser ocupado por elétrons com energia ε_d e spins opostos. O terceiro termo descreve a hibridização entre a banda de condução e o hospedeiro metálico. O último termo na Eq. (2.2) introduz a repulsão de Coulomb entre dois estados de spins opostos da impureza, reduzindo a probabilidade de dupla ocupação.

Existe a possibilidade de explorar o modelo de Anderson em diversos regimes, neste trabalho estamos interessados apenas no regime de simetria partícula-buraco ($\varepsilon_d = -\frac{U}{2}$), este regime é denominado como Anderson simétrico. A simetria partícula-buraco pode ser verificada no gráfico da LDOS em função da energia, sendo esta obtida a partir de um sistema que possui um hospedeiro acoplado a uma impureza. Observe no gráfico 2.4 a formação de dois picos

exatamente quando a energia assume os valores ε_d e $\varepsilon_d + U$, tais picos são chamados de picos de Hubbard. No regime partícula-buraco, esses picos estão equidistante do nível de Fermi.

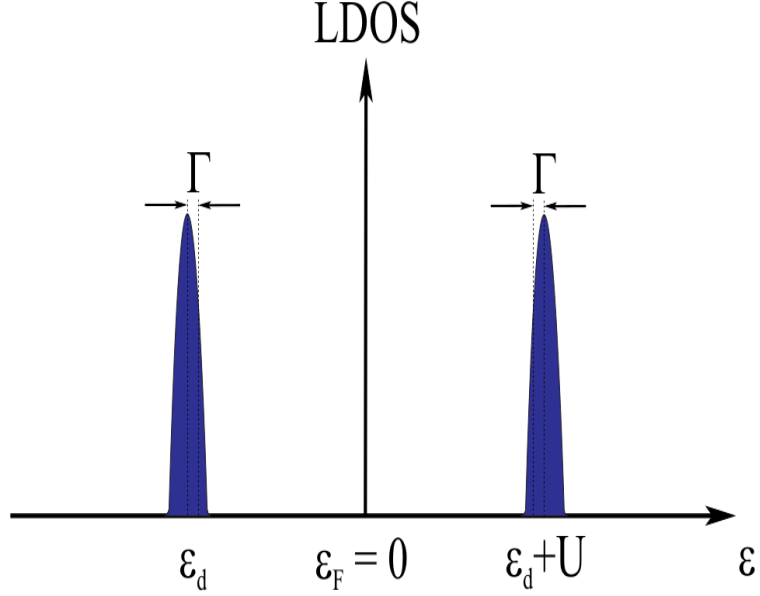


Figura 2.4: Representação esquemática da densidade local de estados (*LDOS*) do sistema, exibindo dois picos de Hubbard localizados exatamente em ε_d e $\varepsilon_d + U$. A semi-largura dos picos de Hubbard está indicada por Γ e o nível de Fermi é indicado por $\varepsilon_F = 0$.

Observe na Fig. 2.4 que o termo responsável pela semi-largura dos picos de Hubbard é indicado por Γ e chamado de parâmetro de Anderson. Na equação que segue, percebemos que, conforme previsto pela regra de ouro de Fermi [42], a largura total de decaimento (Γ) é diretamente influenciada pelo tempo de vida do elétron na impureza (τ), sendo inversamente proporcional a esse parâmetro.

$$\tau = \frac{\hbar}{2\pi|V|^2\rho_0} = \frac{\hbar}{\Gamma}. \quad (2.3)$$

Nesse cenário, V denota o termo de hibridização e ρ_0 é a densidade de estados do hospedeiro puro.

2.3 Fase de Berry

A relação de dispersão nas proximidades de um nó de Weyl para um semimetal de multi-Weyl é dada por $\pm\varepsilon_{\mathbf{p}}$, onde \pm corresponde a banda de condução e valência respectivamente e

$$\varepsilon_{\mathbf{p}} = \sqrt{\alpha_J^2 p_{\perp}^2 + v^2 p_z^2}. \quad (2.4)$$

sendo as componentes do momento expressas por:

$$(p_x, p_y, p_z) = \left(\left(\frac{\varepsilon_{\mathbf{p}}}{\alpha_J} \text{sen}(\theta) \right)^{1/J} \cos(\phi), \left(\frac{\varepsilon_{\mathbf{p}}}{\alpha_J} \text{sen}(\theta) \right)^{1/J} \text{sen}(\phi), \frac{\varepsilon_{\mathbf{p}}}{v} \cos(\theta) \right), \quad (2.5)$$

com $\phi = \text{tg}^{-1} \left(\frac{p_y}{p_x} \right)$, admitindo também que α_J tem dimensão de velocidade, enquanto v é a velocidade de Fermi na direção do eixo z . Note que a introdução do parâmetro α_J é simplesmente para correção de dimensão.

A topologia de um sistema quântico pode ser definida analisando as grandezas conhecidas como curvatura (ou conexão) de Berry, assim como a fase de Berry [32]. Pois, a quantidade que é sensível à topologia é a fase de Berry que a função de onda de Bloch adquire em um circuito fechado em torno dos drenos/fontes do fluxo da curvatura de Berry.

A curvatura de Berry assume então a forma [18]:

$$\Omega^{\pm} = \sum_{n=1}^N \text{Im} \langle u_{np} | \nabla_p | u_{np} \rangle = \frac{sJ^2 \alpha_J^2}{2\varepsilon_{\mathbf{p}}^2} \left(\frac{\varepsilon_{\mathbf{p}} \text{sen}(\theta)}{\alpha_J} \right)^{\frac{2(J-1)}{J}} h_1 \hat{\varepsilon} \quad (2.6)$$

onde N é o número de bandas ocupadas, e $|u_{nk}\rangle$ os estados de Bloch associados. Note que o sinal \pm é usado para indicar a banda de condução (Ω^+) e valência (Ω^-) respectivamente, com $s = \pm$ correspondendo ao dois vales, sendo $\hat{\varepsilon}$ um vetor normal radial e

$$h_1 = \frac{1}{v} \left[\cos^2(\theta) + \frac{v^2}{J^2 \varepsilon_{\mathbf{p}}} \left(\frac{\varepsilon_{\mathbf{p}} \text{sen}(\theta)}{\alpha_J} \right)^{\frac{2}{J}} \right]^{1/2}. \quad (2.7)$$

Uma curvatura de Berry não nula assemelha-se a uma curvatura “eletromagnética” diferente de zero. Em outras palavras, conforme expresso pelas equações de Maxwell, a curvatura do campo magnético é distinta de zero apenas na presença de uma fonte de fluxo magnético [43]. A curvatura do potencial vetor de Berry (ou conexão de Berry) indica a presença de um ponto singular.

A carga de monopolo inteira pode então ser obtida integrando a curvatura de Berry sobre uma esfera unitária (Σ). Dessa forma, a denominada conexão de Berry (primeiro número de Chern) γ_J é resultante desse “fluxo” de curvatura de Berry.

$$\gamma_J = \frac{1}{2\pi} \oint_{\Sigma} \Omega_{\mathbf{p}}^{(s)}. d\mathbf{S} = sJ, \text{ com } J \in \mathbb{Z}. \quad (2.8)$$

É reconhecido que o número de *Chern* (γ_J) é discretizado em múltiplos de 2π . Essa quan-

tização resulta da formação de monopolos devidos ao fluxo da curvatura de Berry, os quais denominamos como nós de Weyl, e temos a expectativa de observá-los em nosso sistema [32].

Portanto, o invariante topológico inteiro de um nó de Weyl mede a quantidade de fluxo da curvatura de Berry encerrado por uma superfície de área unitária, e os nós de Weyl atuam como receptor e emissor da curvatura de Berry. Ao examinar a expressão (2.6), percebe-se uma configuração de monopolo, originando o reconhecido resultado de que os pontos de Weyl representam monopolos da curvatura de Berry, conforme evidenciado nas Figuras 1.3 (a) e (b).

Capítulo 3

Formalismo Matemático

Neste capítulo será feita uma introdução do formalismo das funções de Green necessária para descrição eletrônica devido à interação impureza-hospedeiro e este estudo é realizado a partir da densidade local de estados (LDOS) dada por

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

3.1 Funções de Green

No estudo de sistemas quânticos, destaca-se o papel fundamental das funções de Green, especialmente quando se trata de sistemas com partículas interagindo entre si. Essas funções possibilitam a obtenção de informações pertinentes, como a densidade de estados [44]. Neste trabalho, exploraremos o uso das funções de Green retardada e avançada [45] para descrever os elétrons de nosso sistema:

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

e

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

sendo θ uma função degrau (Heaviside), $[\dots]_{+}$ é uma relação de anticomutação e $\langle \dots \rangle$ representa uma média térmica realizada sobre o ensemble grão-canônico, sendo expressa em termos do traço(Tr),

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

em que H é o Hamiltoniano do sistema e $\beta = \frac{1}{k_B T}$, com k_B sendo a constante de Boltzmann e T é a temperatura absoluta. Assim, podemos reescrever as funções de Green retardada e avançada

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

e

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

onde $|n\rangle$ é um auto estado do Hamiltoniano. Vale destacar que as funções de Green e a função degrau satisfazem as seguintes relações $\mathcal{G}^R(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t') = [\mathcal{G}^A(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t')]^\dagger$ e $\frac{\partial}{\partial t}\theta(t - t') = \delta(t - t')$, com $\delta(t - t')$ sendo a função delta de Dirac.

Note que as funções (3.5) e (3.6) estão definidas no domínio temporal e, como foi apresentado no início da seção para determinar a LDOS, é preciso obter a parte imaginária de uma função de Green retardada no domínio da energia. Para isto, realizamos uma transformada de Fourier que possibilita a conversão entre os domínios, este procedimento é feito a partir do método da equação de movimento (EOM: do inglês *equation of motion*), o qual será descrito na próxima seção.

3.2 Equação de Movimento

Em sua essência, a técnica conhecida como equação de movimento realiza uma transformada Fourier que desmembra funções de Green que variam no tempo em funções de Green no domínio das frequências [46].

Para explicar o método da equação de movimento com maior clareza, faremos uso de uma notação simplificada para função de Green retardada de dois operadores fermiônicos \hat{A} e \hat{B} na representação de Heisenberg,

$$\mathcal{G}_{AB}^R(t, 0) = -\frac{i}{\hbar}\theta(t - 0) \langle n | \left[\hat{A}(t), \hat{B}^\dagger(0) \right]_+ | n \rangle. \quad (3.7)$$

Note que a dependência espacial foi também omitida para manter a simplicidade. Agora,

ao derivarmos esta última expressão em relação a t , obtemos

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \mathcal{G}_{AB}^R(t, 0) &= -\frac{i}{\hbar} \delta(t) \langle n \left| \left[\hat{A}(t), \hat{B}^\dagger(0) \right]_+ \right| n \rangle \\ &+ \left(\frac{-i}{\hbar} \right) \theta(t) \langle n \left| \left[\frac{\partial}{\partial t} \hat{A}(t), \hat{B}^\dagger(0) \right]_+ \right| n \rangle. \end{aligned} \quad (3.8)$$

Da Eq. de Heisenberg sabemos que $\frac{\partial}{\partial t} \hat{A}(t) = -\frac{i}{\hbar} [\hat{A}(t), H]$ e conseqüentemente podemos reescrever a Eq. (3.8) na forma

$$\frac{\partial}{\partial t} \mathcal{G}_{AB}^R(t, 0) = -\frac{i}{\hbar} \delta(t) \langle n \left| \left[\hat{A}(t), \hat{B}^\dagger(0) \right]_+ \right| n \rangle - \frac{i}{\hbar} \mathcal{G}_{[A,H]B}(t, 0), \quad (3.9)$$

onde

$$\mathcal{G}_{[A,H]B}(t, 0) = -\frac{i}{\hbar} \theta(t-0) \langle n \left| \left[[\hat{A}(t), H], \hat{B}^\dagger(0) \right]_+ \right| n \rangle. \quad (3.10)$$

Ao realizar a transformada de Fourier, uma função de Green retardada, em coordenadas de energia, é dada por

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

ou

$$\tilde{\mathcal{G}}_{AB}(\varepsilon^+) = \int_{-\infty}^{\infty} dt \mathcal{G}_{AB}(t, 0) e^{\frac{i}{\hbar} (\varepsilon + i\eta)t}, \quad (3.12)$$

onde $\varepsilon^+ = \varepsilon + i\eta$, com η sendo um infinitesimal positivo tal que $\eta \rightarrow 0$ (condição de convergência). Deste modo, multiplicamos ambos os membros da Eq. (3.9) por $e^{\frac{i}{\hbar} \varepsilon^+ t}$ e integramos de $-\infty$ a ∞ , assim obtemos

$$\int_{-\infty}^{\infty} dt \frac{\partial}{\partial t} \mathcal{G}_{AB}^R(t, 0) e^{\frac{i}{\hbar} \varepsilon^+ t} = -\frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} dt \delta(t) \langle n \left| \left[\hat{A}(t), \hat{B}^\dagger(0) \right]_+ \right| n \rangle - \frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} dt \mathcal{G}_{[A,H]B}(t, 0) e^{\frac{i}{\hbar} \varepsilon^+ t}. \quad (3.13)$$

Para integrar o termo do lado esquerdo da Eq. (3.13) utilizamos o método de integração por partes, onde escrevemos $u = e^{\frac{i}{\hbar} \varepsilon^+ t}$ e $dv = \frac{\partial}{\partial t} \mathcal{G}_{AB}(t, 0) dt$, e isto implica que $du = \frac{i}{\hbar} \varepsilon^+ e^{\frac{i}{\hbar} \varepsilon^+ t} dt$ e $v = \mathcal{G}_{AB}^R(t, 0)$. Logo, temos que

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} dt \frac{\partial}{\partial t} \mathcal{G}_{AB}^R(t, 0) e^{\frac{i}{\hbar} \varepsilon^+ t} &= e^{\frac{i}{\hbar} \varepsilon^+ t} \mathcal{G}_{AB}^R(t, 0) \Big|_{-\infty}^{\infty} - \int_{-\infty}^{\infty} \mathcal{G}_{AB}^R(t, 0) \frac{i}{\hbar} \varepsilon^+ e^{\frac{i}{\hbar} \varepsilon^+ t} dt \\ &= -\frac{i}{\hbar} \varepsilon^+ \int_{-\infty}^{\infty} \mathcal{G}_{AB}^R(t, 0) e^{\frac{i}{\hbar} \varepsilon^+ t} dt \\ &= \frac{i}{\hbar} \varepsilon^+ \tilde{\mathcal{G}}_{AB}(\varepsilon^+). \end{aligned} \quad (3.14)$$

Tendo em vista o resultado exibido na Eq. (3.14) e sabendo que $\int_{-\infty}^{\infty} \delta(x - x_0) f(x) dx = f(x_0)$, a Eq. (3.13) fica reescrita da seguinte maneira

$$(\varepsilon + i\eta) \tilde{\mathcal{G}}_{AB}^R(\varepsilon^+) = \left[\hat{A}(0), \hat{B}(0) \right]_+ + \tilde{\mathcal{G}}_{[A,H]B}^R(\varepsilon^+). \quad (3.15)$$

A EOM, em sua essência, estabelece uma sucessão hierárquica entre as funções de Green, ou seja, quando calculamos $\tilde{\mathcal{G}}_{AB}^R(\varepsilon^+)$, uma nova função de Green $\tilde{\mathcal{G}}_{[A,H]B}^R(\varepsilon^+)$ é gerada. Ao prosseguir com esse cálculo, outras funções de Green emergem em uma sequência contínua. Somente quando obtemos um conjunto de n equações e funções de Green é que o processo de cálculo chega ao término. Entretanto, em alguns casos, essa hierarquia torna-se infinita, o que exige o emprego de aproximações para enfrentar tal situação. Neste trabalho será explorada e utilizada a aproximação de Hubbard I que permite realizar uma truncagem de maneira razoável nas equações obtidas no cálculo das funções de Green.

3.2.1 Aproximação de Hubbard I

A partir do Hamiltoniano total que descreve o sistema abordado, evoluímos a EOM até que possamos utilizar a aproximação de Hubbard I, que consiste em uma aproximação de campo médio para truncar as funções de Green que contém quatro operadores, assim tal aproximação permite escrever [47]:

$$\tilde{\mathcal{G}}_{ABCD}(\varepsilon) = \langle AB \rangle \tilde{\mathcal{G}}_{CD}, \quad (3.16)$$

sendo A, B, C e D operadores quaisquer. Apesar da aproximação de Hubbard I possibilitar resolver o problema no cálculo das funções de Green, este método impõe uma truncagem nas funções de Green de correlação spin-flip entre a impureza e a banda do sistema, e de certo modo perdemos informações que são pertinentes para o efeito Kondo [48].

O efeito Kondo pode emergir em certas condições de temperatura, especificamente para $T \ll T_K$, com T indicando a temperatura do sistema e T_K representando a temperatura de Kondo. O fenômeno denominado efeito Kondo ocorre quando observa-se um acoplamento antiferromagnético entre os spins localizados na impureza e os elétrons de condução próximos ao nível de Fermi do hospedeiro (spin-flip). Assim, é formada uma nuvem de elétrons de condução que blinda o momento magnético situado na impureza. Isso resulta na ocorrência de um pico chamado pico de Kondo na densidade de estados, centrado no nível de Fermi.

Os semimetais de multi-Weyl exibem um pseudogap (*gap* pontual) nas bandas de energia

no nível de Fermi em $\varepsilon_F = 0$, por este motivo é perfeitamente viável empregar a abordagem de Hubbard I sem enfrentar dificuldades, mesmo quando T é muito menor que T_K .

Capítulo 4

Multi-Weyl

Os semimetais de multi-Weyl representam uma classe intrigante de materiais que tem atraído um interesse crescente na comunidade científica. Eles se destacam por suas propriedades eletrônicas exóticas e fenômenos quânticos únicos, abrindo um novo capítulo na pesquisa em física de materiais.

O conceito de nós de Weyl foi inicialmente proposto na década de 1920, mas apenas recentemente as tecnologias experimentais avançadas e as simulações teóricas têm permitido a detecção e caracterização desses semimetais exóticos, respectivamente. A descoberta desses materiais tem suscitado uma onda de entusiasmo, pois suas propriedades oferecem perspectivas promissoras para aplicações em dispositivos eletrônicos avançados, spintrônica e computação quântica.

Nesta revisão introdutória, mergulharemos no mundo fascinante dos semimetais de multi-Weyl, explorando suas características distintas, como a alta anisotropia de transporte, a presença de estados de superfície protegidos topologicamente e a rica fenomenologia quântica emergente.

Enquanto avançamos para desvendar os segredos dos semimetais de multi-Weyl, esperamos fornecer uma visão abrangente sobre essa nova fronteira da física de materiais, abrindo caminho para futuras descobertas e aplicações revolucionárias. Esta área de pesquisa promissora está destinada a desencadear uma onda de inovações científicas e tecnológicas que moldarão o futuro da eletrônica e da computação quântica, promovendo avanços fundamentais em nossa compreensão do comportamento da matéria e suas aplicações na vida cotidiana.

Nesta tese, exploraremos em detalhes o papel do *Winding Number* nos semimetais de multi-Weyl, investigando como esse número topológico influencia as propriedades eletrônicas, desta-

cando também o efeitos dos estados de superfície que são topologicamente protegidos.

O sistema teórico proposto é formado por um semimetal de multi-Weyl como meio hospedeiro, no qual uma impureza está enterrada em seu *bulk*, conforme ilustrado na Fig. 4.1 a).

Uma das características dos semimetais de multi-Weyl é a projeção dos nós de Weyl na superfície, os quais são conectados pelos chamados arcos de Fermi [49]. A quantidade de pares de arcos de Fermi está estritamente relacionado ao valor que o *Winding Number* pode assumir, conforme pode ser observado nas Fig. 4.1 (b), (c) e (d) [4].

Neste trabalho, tivemos também como finalidade a verificação do princípio de correspondência “*bulk-boundary*” para os estados superfície (arcos de Fermi) e a carga topológica do *bulk* (J), conforme as Figs. 4.1 (b) - (d). Para este fim, exploramos teoricamente a interferência Fano na LDOS, conforme são exibidos nos painéis (b) - (d).

Observando o painel (b), vemos que o perfil Fano evolui do comportamento ressonante (b) para o tipo antirressonante (d) à medida que J aumenta. A quantidade de pares de arcos de Fermi esta estritamente relacionado com o valor do *Winding Number* J , já que o número de arcos de Fermi é igual a $2J$ [4], modulando a forma de perfil de Fano. Este perfil Fano é determinado pelo valor absoluto do parâmetro de assimetria Fano $|q_J| = \tan(C_{2J})$ [painel (c)], onde $C_{2J} \equiv (360^\circ/2J)$ representa o ângulo do grupo de simetria rotacional. Em resumo, a correspondência “*bulk-boundary*” [4] define perfil Fano em semimetais de multi-Weyl, já que o *Winding Number* está relacionado a quantidade de pares arcos de Fermi e este por sua vez modela o perfil Fano do *Bulk* dos semimetais de multi-Weyl.

4.1 Modelo Adotado: Multi-Weyl

Para a formulação do Hamiltoniano que descreve o sistema exibido na Fig. 4.1 (a), utilizamos premissas análogas as consideradas no modelo de Anderson [39]. Deste modo, o Hamiltoniano total que descreve o sistema proposto é composto de três partes:

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_{\text{Weyl}} + \mathcal{H}_{\text{Imp.}} + \mathcal{H}_{\text{Hyb.}}, \quad (4.1)$$

onde

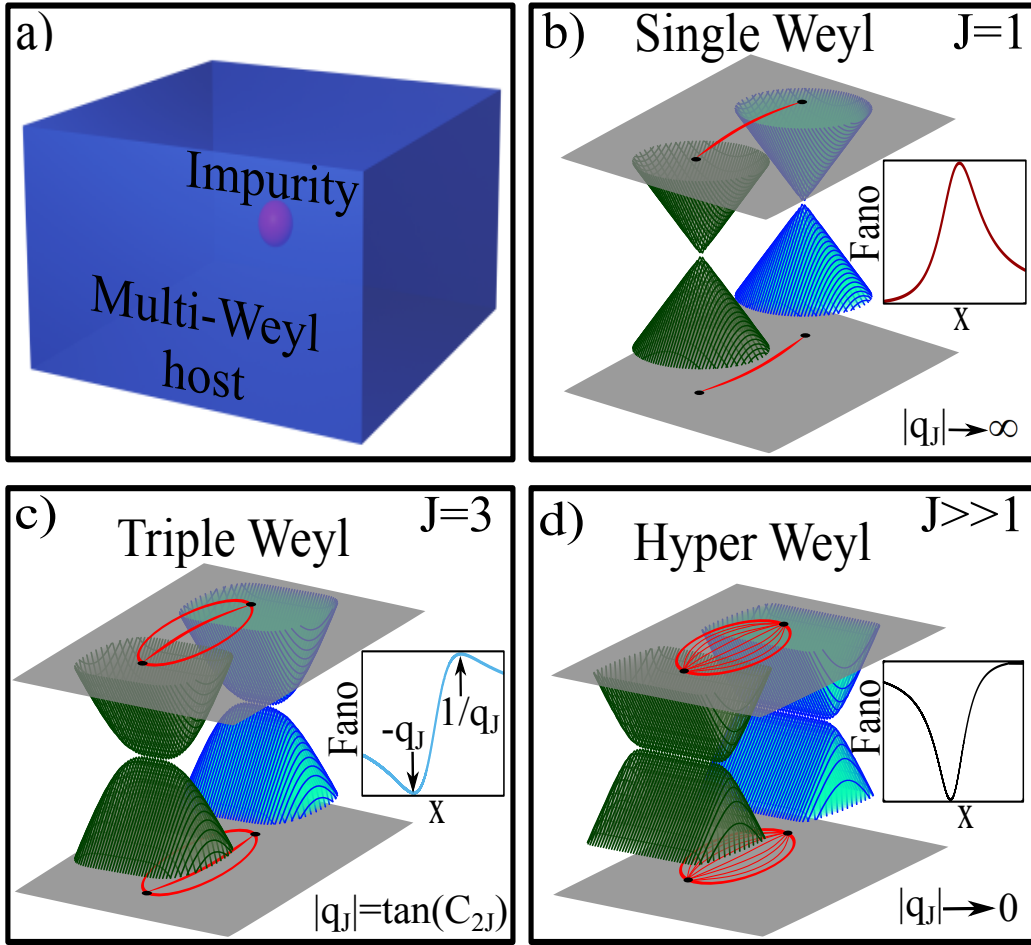


Figura 4.1: Visão geral do efeito Fano oriundo da carga topológica em semimetais de multi-Weyl. (a) Representação esquemática do semimetal de multi-Weyl com uma impureza enterrada. Estruturas de banda correspondentes da Eq.(4.3), com $k_y = 0$ e $Q_0 = 0.4k_D$ são ilustradas nos painéis (b), (c) e (d) para quando $J = 1$ (Weyl), para $J = 2$ (Weyl-duplo) e para $J = 3$ (Weyl-triplo) respectivamente. Nos painéis (b), (c) e (d) são indicados os Perfis Fano versus a energia em coordenadas naturais (adimensional). Note que o perfil Fano evolui do comportamento ressonante (b) para o tipo antirressonante (d) à medida que J aumenta. A quantidade de pares de arcos de Fermi esta estritamente relacionado com o valor do *Winding Number* J , já que o número de arcos de Fermi é igual a $2J$ [4], modulando a forma de perfil de Fano. Este perfil Fano é determinado pelo valor absoluto do parâmetro de assimetria Fano $|q_J| = \tan(C_{2J})$ [painel (c)], onde $C_{2J} \equiv (360^\circ/2J)$ representa o ângulo do grupo de simetria rotacional. Em resumo, a correspondência “*bulk-boundary*” [4] define o perfil Fano em sistemas multi-Weyl (Figura retirada de [12]).

$$\mathcal{H}_{\text{Weyl}} = \sum_{\mathbf{k}s} \psi_{\mathbf{k}s}^\dagger \left[v_\perp k_0 \left(\tilde{k}_-^J \sigma_+ + \tilde{k}_+^J \sigma_- \right) + v_z (k_z - sQ) \sigma_z - Q_0 \sigma_0 \right] \psi_{\mathbf{k}s} \quad (4.2)$$

é a parte que descreve os férmions de multi-Weyl, com os spinores (operadores de campo) sendo expressos por $\psi_{\mathbf{k}s}^\dagger = (c_{\mathbf{k}s\uparrow}^\dagger, c_{\mathbf{k}s\downarrow}^\dagger)$ e $\psi_{\mathbf{k}s} = \begin{pmatrix} c_{\mathbf{k}s\uparrow} \\ c_{\mathbf{k}s\downarrow} \end{pmatrix}$. Note que $c_{\mathbf{k}s\sigma}^\dagger$ e $c_{\mathbf{k}s\sigma}$ são operadores fermiônicos de criação e aniquilação de elétrons em estados quânticos e estes são rotulados pelo vetor de onda \mathbf{k} , spin $\sigma = \uparrow, \downarrow$ e quiralidade $s = \pm 1$. Observe que, $s = \pm 1$ representa o par de nós de Weyl com a quiralidade oposta e $\mathbf{k} = (k_x, k_y, k_z)$. O número topológico J (carga topológica) fornece o número de pares de arcos de Fermi nas fronteiras do sistema, conforme assegurado pelo princípio de correspondência “*bulk-boundary*” [4]. Já o termo v_\perp trata-se de uma velocidade efetiva das quasipartículas no plano perpendicular ao eixo z , enquanto v_z é a velocidade ao longo do mesmo [2].

A parte não relativística é introduzida pelo termo $\tilde{k}_\pm = (k_x \pm ik_y)/k_0$, onde k_0 é um parâmetro que varia conforme o sistema [2], e também é inserido para realizar ajustes de dimensões no problema. Também temos que $\sigma_\pm = \frac{1}{2}(\sigma_x \pm i\sigma_y)$, onde σ_x, σ_y e σ_z são as matrizes de pauli

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \text{ e } \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

Já a matriz σ_0 , indicada juntamente ao termo Q_0 na Eq. (4.2) representa uma matriz identidade de dimensões 2×2 .

A estrutura de bandas da Eq. (4.2) pode ser calculada diretamente, usando à seguinte relação de dispersão

$$\varepsilon_{\mathbf{k}st}^\pm = stv_\perp \sqrt{\frac{v_z^2}{v_\perp^2} k_{zs}^2 + |\tilde{k}_\pm|^{2J} k_0^2 - sQ_0}, \quad (4.3)$$

sendo que $t = +(-)$ corresponde à banda de condução (valência) nos semimetais de multi-Weyl, sendo $k_{zs} = k_z - sQ$ e tais bandas estão representadas nas Figuras 4.1(b)-(d). Note que o espectro de energia $\varepsilon_{\mathbf{k}st}$ exibe uma dependência linear com a componente k_z do momento e uma dependência proporcional à J -ésima potência de $k_{x(y)}$ próximo ao nível de Fermi. Também é importante destacar que, quando $J = 1$ (Weyl), o semimetal Weyl apresenta cones de Dirac claramente definidos em todas as orientações de momento [Fig.4.1(b)], enquanto para $J \gg 1$ temos o caso hipotético semimetal de hiper-Weyl [Fig.4.1(d)], regime este que tem sua estrutura

de banda modulada pelo *Winding Number* (J).

No regime em que $\mathbf{Q} = \mathbf{0}$ e $Q_0 = 0$ os semimetais de multi-Weyl podem também ser chamados de semimetais Multi-Dirac(MDSM) [8]. Note que os termos \mathbf{Q} e Q_0 são responsáveis pela quebra da TRS e quebra da IS, respectivamente. Logo, o caso Multi-Dirac é obtido no regime de preservação da TRS e IS. Quando $\mathbf{Q} \neq \mathbf{0}$ o MDSM transforma-se em um semimetal de multi-Weyl, onde pontos de Dirac são separados em dois nós de Weyl localizados em dois valores distintos de momento, porém com mesma energia. Analogamente, quando $Q_0 \neq 0$ o MDSM transforma-se em um metal de multi-Weyl, onde os pontos de Dirac são separados em dois nós de Weyl, porém agora neste regime os nós de Weyl localizam-se em valores distintos de energia e com mesmo momento. Nas Figs. 4.1 (b), (c) e (d) está ilustrado um esquema em que há quebra da TRS, preservando-se a IS para os casos em que o $J = 1$ (Weyl), $J = 3$ (Weyl-triplo) e $J \gg 1$ (hiper-Weyl).

O termo que descreve o Hamiltoniano ($\mathcal{H}_{\text{Imp.}}$) da impureza é dado por

$$\mathcal{H}_{\text{Imp.}} = -\frac{U}{2} + \sum_{\sigma} (\varepsilon_{d\sigma} + \frac{U}{2}) n_{d\sigma} + \frac{U}{2} (\sum_{\sigma} n_{d\sigma} - 1)^2, \quad (4.4)$$

onde o nível de energia da impureza é $\varepsilon_{d\sigma}$, com operador número $n_{d\sigma} = (n_{d\sigma})^2 = d_{\sigma}^{\dagger} d_{\sigma}$, sendo d_{σ}^{\dagger} (d_{σ}) o operador de criação(Aniquilação) e U é o Coulomb entre estados spins opostos ($\bar{\sigma} = -\sigma$).

Agora o termo que introduz o acoplamento entre hospedeiro e impureza é descrito pelo Hamiltoniano de hibridização,

$$\mathcal{H}_{\text{Hyb.}} = V \sum_{\sigma} (f_{0\sigma}^{\dagger} d_{\sigma} + \text{H.c.}), \quad (4.5)$$

onde o operador de campo é dado por

$$f_{0\sigma} = \frac{1}{\sqrt{\mathcal{N}}} \sum_{\mathbf{k}\sigma} c_{\mathbf{k}\sigma} \quad (4.6)$$

descrevendo o acoplamento local de uma impureza com seu hospedeiro, com V representando a amplitude de hibridização entre os elétrons da banda de condução e a impureza e \mathcal{N} o número de estados delimitados por k_D .

Gostaríamos de ressaltar o seguinte aspecto: Ao adotar $\varepsilon_{d\sigma} = -\frac{U}{2}$ o segundo termo Eq.(4.4) desaparece e o Hamiltoniano \mathcal{H} torna-se invariante sob a transformação partícula-buraco $c_{\mathbf{k}\sigma} \rightarrow c_{-\mathbf{k}\sigma}^{\dagger}$ e $d_{\sigma} \rightarrow -d_{\sigma}^{\dagger}$. Nesse sentido, a decisão de utilizar $\varepsilon_{d\sigma} = -\frac{U}{2}$ caracteriza o regime de

simetria partícula-buraco do modelo, que será empregado sem perda de generalidade, a fim de determinar LDOS do sistema. Conseqüentemente, o perfil LDOS exibe simetria de espelho no domínio de energia ε e, por fim, os perfis Fano podem ser revelados.

4.2 Densidade Local de Estados

Sabe-se que para encontrar a densidade local de estados (LDOS) é necessário determinar a função de Green retardada no espaço das energias. Mas inicialmente a função de Green é definida no espaço temporal

$$\mathcal{G}_\sigma(t) = -i\theta(t) \left\langle \left\{ f_{0\sigma}(t), f_{0\sigma}^\dagger(0) \right\} \right\rangle_{\mathcal{H}}, \quad (4.7)$$

onde $f_{0\sigma} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}s} c_{\mathbf{k}s\sigma}$ e $f_{0\sigma}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}s} c_{\mathbf{k}s\sigma}^\dagger$ são operadores de campo fermiônico. Logo, podemos reescrever a expressão (4.7) na forma

$$\mathcal{G}_\sigma(t) = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{a}} \sum_{ss'} \mathcal{G}_{c_{\mathbf{k}s\sigma} c_{\mathbf{a}s'\sigma'}}(t). \quad (4.8)$$

Mas como já foi dito para obtenção da LDOS é necessário obter a função de Green retardada no domínio da energia, ou seja, o que necessitamos determinar é

$$\tilde{\mathcal{G}}(\varepsilon) = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{a}} \sum_{ss'} \tilde{\mathcal{G}}_{c_{\mathbf{k}s\sigma} c_{\mathbf{a}s'\sigma'}}(\varepsilon). \quad (4.9)$$

Note que a função de Green expressa pela Eq. (4.9) é obtida a partir da Eq. (4.8) usando o formalismo do método da equação de movimento e propriedades das funções de Green exibidos no capítulo 3. A seguir será explicitado em detalhes a obtenção de (4.9).

A partir da Eq. (4.8) percebe-se que para encontrar a LDOS, o primeiro passo é calcular a função de Green

$$\mathcal{G}_{c_{\mathbf{k}s\sigma} c_{\mathbf{a}s'\sigma'}}(t) = -\frac{i}{\hbar} \theta(t) Z^{-1} \sum_n e^{-\beta E_n} \left\langle n \left| \left[c_{\mathbf{k}s\sigma}(t), c_{\mathbf{a}s'\sigma'}^\dagger(0) \right]_+ \right| n \right\rangle, \quad (4.10)$$

com $\sigma = \uparrow, \downarrow$.

Neste momento recorreremos a EOM e assim obtemos

$$\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial t} \mathcal{G}_{c_{\mathbf{k}s\sigma} c_{\mathbf{a}s'\sigma'}}(t) &= -\frac{i}{\hbar} \delta(t) Z^{-1} \sum_n e^{-\beta E_n} \left\langle n \left| \left[c_{\mathbf{k}s\sigma}(t), c_{\mathbf{a}s'\sigma'}^\dagger(0) \right]_+ \right| n \right\rangle \\
&+ \left(-\frac{i}{\hbar} \right) s (\sigma v_z k_{zs} - Q_0) \mathcal{G}_{c_{\mathbf{k}s\sigma} c_{\mathbf{a}s'\sigma'}}(t) \\
&+ \left(-\frac{i}{\hbar} \right) s \frac{v_\perp}{k_0^{J-1}} k_\sigma^J \mathcal{G}_{c_{\mathbf{k}s\bar{\sigma}} c_{\mathbf{a}s'\sigma'}}(t) \\
&+ \left(-\frac{i}{\hbar} \right) \frac{1}{\sqrt{\mathcal{N}}} V \mathcal{G}_{d_\sigma c_{\mathbf{a}s'\sigma'}}(t), \tag{4.11}
\end{aligned}$$

agora realizando a transformada de Fourier de modo que a função de Green fique definida no domínio da energia, obtemos

$$\begin{aligned}
\tilde{\mathcal{G}}_{c_{\mathbf{k}s\sigma} c_{\mathbf{a}s'\sigma'}}(\varepsilon^+) &= \frac{\delta_{\mathbf{k}\mathbf{a}} \delta_{ss'} \delta_{\sigma\sigma'}}{\varepsilon^+ - s(\sigma v_z k_{zs} - Q_0)} + \frac{s \frac{v_\perp}{k_0^{J-1}} k_\sigma^J}{\varepsilon^+ - s(\sigma v_z k_{zs} - Q_0)} \mathcal{G}_{c_{\mathbf{k}s\bar{\sigma}} c_{\mathbf{a}s'\sigma'}}(\varepsilon^+) \\
&+ \frac{V}{\sqrt{\mathcal{N}}(\varepsilon^+ - s(\sigma v_z k_{zs} - Q_0))} \mathcal{G}_{d_\sigma c_{\mathbf{a}s'\sigma'}}(\varepsilon^+), \tag{4.12}
\end{aligned}$$

onde $\varepsilon^+ = \varepsilon + i\eta$, com $\eta \rightarrow 0^+$ (Condição de Convergência). Agora reescrevemos a expressão anterior considerando $\tilde{\varepsilon}_s = \varepsilon^+ + sQ_0$, e assim são obtidas quatro funções de Green fazendo $\sigma = \uparrow, \downarrow$ e $\sigma' = \uparrow, \downarrow$

$$\tilde{\mathcal{G}}_{c_{\mathbf{k}s\uparrow} c_{\mathbf{a}s'\uparrow}}(\varepsilon^+) = \frac{\delta_{\mathbf{k}\mathbf{a}} \delta_{ss'}}{\tilde{\varepsilon}_s - s v_z k_{zs}} + \frac{s \frac{v_\perp}{k_0^{J-1}} k_-^J}{\tilde{\varepsilon}_s - s v_z k_{zs}} \tilde{\mathcal{G}}_{c_{\mathbf{k}s\downarrow} c_{\mathbf{a}s'\uparrow}}(\varepsilon^+) + \frac{V}{\sqrt{\mathcal{N}}(\tilde{\varepsilon}_s - s v_z k_{zs})} \tilde{\mathcal{G}}_{d_\uparrow c_{\mathbf{a}s'\uparrow}}(\varepsilon^+), \tag{4.13}$$

$$\tilde{\mathcal{G}}_{c_{\mathbf{k}s\downarrow} c_{\mathbf{a}s'\uparrow}}(\varepsilon^+) = \frac{s \frac{v_\perp}{k_0^{J-1}} k_+^J}{\tilde{\varepsilon}_s + s v_z k_{zs}} \tilde{\mathcal{G}}_{c_{\mathbf{k}s\uparrow} c_{\mathbf{a}s'\uparrow}}(\varepsilon^+) + \frac{V}{\sqrt{\mathcal{N}}(\tilde{\varepsilon}_s + s v_z k_{zs})} \tilde{\mathcal{G}}_{d_\downarrow c_{\mathbf{a}s'\uparrow}}(\varepsilon^+), \tag{4.14}$$

$$\tilde{\mathcal{G}}_{c_{\mathbf{k}s\downarrow} c_{\mathbf{a}s'\downarrow}}(\varepsilon^+) = \frac{\delta_{\mathbf{k}\mathbf{a}} \delta_{ss'}}{\tilde{\varepsilon}_s + s v_z k_{zs}} + \frac{s \frac{v_\perp}{k_0^{J-1}} k_+^J}{\tilde{\varepsilon}_s + s v_z k_{zs}} \tilde{\mathcal{G}}_{c_{\mathbf{k}s\uparrow} c_{\mathbf{a}s'\downarrow}}(\varepsilon^+) + \frac{V}{\sqrt{\mathcal{N}}(\tilde{\varepsilon}_s + s v_z k_{zs})} \tilde{\mathcal{G}}_{d_\downarrow c_{\mathbf{a}s'\downarrow}}(\varepsilon^+), \tag{4.15}$$

$$\tilde{\mathcal{G}}_{c_{\mathbf{k}s\uparrow} c_{\mathbf{a}s'\downarrow}}(\varepsilon^+) = \frac{s \frac{v_\perp}{k_0^{J-1}} k_-^J}{\tilde{\varepsilon}_s - s v_z k_{zs}} \tilde{\mathcal{G}}_{c_{\mathbf{k}s\downarrow} c_{\mathbf{a}s'\downarrow}}(\varepsilon^+) + \frac{V}{\sqrt{\mathcal{N}}(\tilde{\varepsilon}_s - s v_z k_{zs})} \tilde{\mathcal{G}}_{d_\uparrow c_{\mathbf{a}s'\downarrow}}(\varepsilon^+). \tag{4.16}$$

Substituindo a Eq. (4.14) na Eq. (4.13) e a Eq. (4.16) na Eq. (4.15) obtemos

$$\begin{aligned}
\tilde{\mathcal{G}}_{c_{\mathbf{k}s\uparrow} c_{\mathbf{a}s'\uparrow}}(\varepsilon^+) &= \frac{(\tilde{\varepsilon}_s + s v_z k_{zs}) \delta_{\mathbf{k}\mathbf{a}} \delta_{ss'}}{\tilde{\varepsilon}_s^2 - v_z^2 k_{zs}^2 - \frac{v_\perp^2}{k_0^{2J-2}} k_-^J k_+^J} + \frac{s \frac{v_\perp}{k_0^{J-1}} k_-^J V}{\sqrt{\mathcal{N}} \left(\tilde{\varepsilon}_s^2 - v_z^2 k_{zs}^2 - \frac{v_\perp^2}{k_0^{2J-2}} k_-^J k_+^J \right)} \tilde{\mathcal{G}}_{d_\downarrow c_{\mathbf{a}s'\uparrow}}(\varepsilon^+) \\
&+ \frac{(\tilde{\varepsilon}_s + s v_z k_{zs}) V}{\sqrt{\mathcal{N}} \left(\tilde{\varepsilon}_s^2 - v_z^2 k_{zs}^2 - \frac{v_\perp^2}{k_0^{2J-2}} k_-^J k_+^J \right)} \tilde{\mathcal{G}}_{d_\uparrow c_{\mathbf{a}s'\uparrow}}(\varepsilon^+) \tag{4.17}
\end{aligned}$$

e

$$\begin{aligned}\tilde{\mathcal{G}}_{c_{\mathbf{k}s}\downarrow c_{\mathbf{a}s'}\downarrow}(\varepsilon^+) &= \frac{(\tilde{\varepsilon}_s - sv_z k_{zs}) \delta_{\mathbf{k}\mathbf{a}} \delta_{ss'}}{\tilde{\varepsilon}_s^2 - v_z^2 k_{zs}^2 - \frac{v_{\perp}^2}{k_0^{2J-2}} k_+^J k_-^J} + \frac{s \frac{v_{\perp}}{k_0^{J-1}} k_+^J V}{\sqrt{\mathcal{N}} \left(\tilde{\varepsilon}_s^2 - v_z^2 k_{zs}^2 - \frac{v_{\perp}^2}{k_0^{2J-2}} k_+^J k_-^J \right)} \tilde{\mathcal{G}}_{d_{\uparrow} c_{\mathbf{a}s'}\downarrow}(\varepsilon^+) \\ &+ \frac{V (\tilde{\varepsilon}_s - sv_z k_{zs})}{\sqrt{\mathcal{N}} \left(\tilde{\varepsilon}_s^2 - v_z^2 k_{zs}^2 - \frac{v_{\perp}^2}{k_0^{2J-2}} k_+^J k_-^J \right)} \tilde{\mathcal{G}}_{d_{\downarrow} c_{\mathbf{a}s'}\downarrow}(\varepsilon^+).\end{aligned}\quad (4.18)$$

Agora é necessário determinar a função de Green $\tilde{\mathcal{G}}_{d_{\sigma} c_{\mathbf{a}s'}\sigma'}(\varepsilon^+)$, para isto faremos uso da função de Green avançada, a qual é definida por

$$\mathcal{F}_{d_{\sigma} c_{\mathbf{a}s'}\sigma'}(t) = \frac{i}{\hbar} \theta(-t) Z^{-1} \sum_n e^{-\beta E_n} \left\langle n \left| [d_{\sigma}^{\dagger}(0), c_{\mathbf{a}s'}\sigma'(t)]_+ \right| n \right\rangle, \quad (4.19)$$

e utilizamos a propriedade $\tilde{\mathcal{G}}_{d_{\sigma} c_{\mathbf{a}s'}\sigma'}(\varepsilon^+) = \left[\tilde{\mathcal{F}}_{d_{\sigma} c_{\mathbf{a}s'}\sigma'}(\varepsilon^-) \right]^{\dagger}$, com $\varepsilon^- = \varepsilon - i\eta$. Logo, temos que

$$\tilde{\mathcal{G}}_{d_{\sigma} c_{\mathbf{a}s'}\sigma'}(\varepsilon^+) = \frac{s' \frac{v_{\perp}}{k_0^{J-1}} a_{\sigma'}^J}{\varepsilon_{s'}^+ - s' \sigma' v_z a_{zs}} \tilde{\mathcal{G}}_{d_{\sigma} c_{\mathbf{a}s'}\sigma'}(\varepsilon^+) + \frac{V}{\sqrt{\mathcal{N}} (\varepsilon_{s'}^+ - s' \sigma' v_z k_{zs})} \tilde{\mathcal{G}}_{d_{\sigma} d_{\sigma'}}(\varepsilon^+). \quad (4.20)$$

Fazendo $\sigma' = \uparrow, \downarrow$ na Eq. (4.20), teremos duas equações, onde combinando as mesmas temos que

$$\begin{aligned}\tilde{\mathcal{G}}_{d_{\sigma} c_{\mathbf{a}s'}\uparrow}(\varepsilon^+) &= \frac{s' \frac{v_{\perp}}{a_0^{J-1}} a_+^J V}{\sqrt{\mathcal{N}} \left(\tilde{\varepsilon}_{s'}^2 - v_z^2 a_{zs}^2 - \frac{v_{\perp}^2}{a_0^{2J-2}} a_+^J a_-^J \right)} \tilde{\mathcal{G}}_{d_{\sigma} d_{\downarrow}}(\varepsilon^+) \\ &+ \frac{V (\tilde{\varepsilon}_s + s' v_z a_{zs})}{\sqrt{\mathcal{N}} \left(\tilde{\varepsilon}_{s'}^2 - v_z^2 a_{zs}^2 - \frac{v_{\perp}^2}{a_0^{2J-2}} a_+^J a_-^J \right)} \tilde{\mathcal{G}}_{d_{\sigma} d_{\uparrow}}(\varepsilon^+)\end{aligned}\quad (4.21)$$

e

$$\begin{aligned}\tilde{\mathcal{G}}_{d_{\sigma} c_{\mathbf{a}s'}\downarrow}(\varepsilon^+) &= \frac{s' \frac{v_{\perp}}{a_0^{J-1}} a_-^J V}{\sqrt{\mathcal{N}} \left(\tilde{\varepsilon}_{s'}^2 - v_z^2 a_{zs}^2 - \frac{v_{\perp}^2}{a_0^{2J-2}} a_-^J a_+^J \right)} \tilde{\mathcal{G}}_{d_{\sigma} d_{\uparrow}}(\varepsilon^+) \\ &+ \frac{(\tilde{\varepsilon}_{s'} - s' v_z a_{zs}) V}{\sqrt{\mathcal{N}} \left(\tilde{\varepsilon}_{s'}^2 - v_z^2 a_{zs}^2 - \frac{v_{\perp}^2}{a_0^{2J-2}} a_-^J a_+^J \right)} \tilde{\mathcal{G}}_{d_{\sigma} d_{\downarrow}}(\varepsilon^+).\end{aligned}\quad (4.22)$$

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

$$\begin{aligned}
\tilde{\mathcal{G}}_{d_{\uparrow}c_{\mathbf{a}s'\uparrow}}(\varepsilon^+) &= \frac{s' \frac{v_{\perp}}{a_0^{J-1}} a_+^J V}{\sqrt{\mathcal{N}} \left(\tilde{\varepsilon}_{s'}^2 - v_z^2 a_{zs}^2 - \frac{v_{\perp}^2}{a_0^{2J-2}} a_+^J a_-^J \right)} \tilde{\mathcal{G}}_{d_{\uparrow}d_{\downarrow}}(\varepsilon^+) \\
&+ \frac{V(\tilde{\varepsilon}_{s'} + s' v_z a_{zs})}{\sqrt{\mathcal{N}} \left(\tilde{\varepsilon}_{s'}^2 - v_z^2 a_{zs}^2 - \frac{v_{\perp}^2}{a_0^{2J-2}} a_+^J a_-^J \right)} \tilde{\mathcal{G}}_{d_{\uparrow}d_{\uparrow}}(\varepsilon^+), \tag{4.23}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\tilde{\mathcal{G}}_{d_{\downarrow}c_{\mathbf{a}s'\uparrow}}(\varepsilon^+) &= \frac{s' \frac{v_{\perp}}{a_0^{J-1}} a_+^J V}{\sqrt{\mathcal{N}} \left(\tilde{\varepsilon}_{s'}^2 - v_z^2 a_{zs}^2 - \frac{v_{\perp}^2}{a_0^{2J-2}} a_+^J a_-^J \right)} \tilde{\mathcal{G}}_{d_{\downarrow}d_{\downarrow}}(\varepsilon^+) \\
&+ \frac{V(\tilde{\varepsilon}_s + s' v_z a_{zs})}{\sqrt{\mathcal{N}} \left(\tilde{\varepsilon}_{s'}^2 - v_z^2 a_{zs}^2 - \frac{v_{\perp}^2}{a_0^{2J-2}} a_+^J a_-^J \right)} \tilde{\mathcal{G}}_{d_{\downarrow}d_{\uparrow}}(\varepsilon^+), \tag{4.24}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\tilde{\mathcal{G}}_{d_{\uparrow}c_{\mathbf{a}s'\downarrow}}(\varepsilon^+) &= \frac{s' \frac{v_{\perp}}{a_0^{J-1}} a_-^J V}{\sqrt{\mathcal{N}} \left(\tilde{\varepsilon}_{s'}^2 - v_z^2 a_{zs}^2 - \frac{v_{\perp}^2}{a_0^{2J-2}} a_-^J a_+^J \right)} \tilde{\mathcal{G}}_{d_{\uparrow}d_{\uparrow}}(\varepsilon^+) \\
&+ \frac{(\tilde{\varepsilon}_s - s' v_z a_{zs}) V}{\sqrt{\mathcal{N}} \left(\tilde{\varepsilon}_{s'}^2 - v_z^2 a_{zs}^2 - \frac{v_{\perp}^2}{a_0^{2J-2}} a_-^J a_+^J \right)} \tilde{\mathcal{G}}_{d_{\uparrow}d_{\downarrow}}(\varepsilon^+) \tag{4.25}
\end{aligned}$$

e

$$\begin{aligned}
\tilde{\mathcal{G}}_{d_{\downarrow}c_{\mathbf{a}s'\downarrow}}(\varepsilon^+) &= \frac{s' \frac{v_{\perp}}{a_0^{J-1}} a_-^J V}{\sqrt{\mathcal{N}} \left(\tilde{\varepsilon}_{s'}^2 - v_z^2 a_{zs}^2 - \frac{v_{\perp}^2}{a_0^{2J-2}} a_-^J a_+^J \right)} \tilde{\mathcal{G}}_{d_{\downarrow}d_{\uparrow}}(\varepsilon^+) \\
&+ \frac{(\tilde{\varepsilon}_s - s' v_z a_{zs}) V}{\sqrt{\mathcal{N}} \left(\tilde{\varepsilon}_{s'}^2 - v_z^2 a_{zs}^2 - \frac{v_{\perp}^2}{a_0^{2J-2}} a_-^J a_+^J \right)} \tilde{\mathcal{G}}_{d_{\downarrow}d_{\downarrow}}(\varepsilon^+). \tag{4.26}
\end{aligned}$$

Substituindo as Eq. (4.23) e (4.24) na Eq. (4.17), temos que

$$\begin{aligned}
\tilde{\mathcal{G}}_{c_{\mathbf{k}s\uparrow}c_{\mathbf{a}s'\uparrow}}(\varepsilon^+) &= \frac{(\tilde{\varepsilon}_s + sv_z k_{zs}) \delta_{\mathbf{k}\mathbf{a}} \delta_{ss'}}{\tilde{\varepsilon}_s^2 - v_z^2 k_{zs}^2 - \frac{v_{\perp}^2}{k_0^{2J-2}} k_-^J k_+^J} \\
&+ \left[\frac{s \frac{v_{\perp}}{k_0^{J-1}} k_-^J V}{\tilde{\varepsilon}_s^2 - v_z^2 k_{zs}^2 - \frac{v_{\perp}^2}{k_0^{2J-2}} k_-^J k_+^J} \right] \left[\frac{s' \frac{v_{\perp}}{a_0^{J-1}} a_+^J V}{\tilde{\varepsilon}_{s'}^2 - v_z^2 a_{zs}^2 - \frac{v_{\perp}^2}{a_0^{2J-2}} a_+^J a_-^J} \right] \frac{\tilde{\mathcal{G}}_{d_{\downarrow}d_{\downarrow}}(\varepsilon^+)}{\mathcal{N}} \\
&+ \left[\frac{s \frac{v_{\perp}}{k_0^{J-1}} k_-^J}{\tilde{\varepsilon}_s^2 - v_z^2 k_{zs}^2 - \frac{v_{\perp}^2}{k_0^{2J-2}} k_-^J k_+^J} \right] \left[\frac{(\tilde{\varepsilon}_s + s'v_z a_{zs}) V}{\tilde{\varepsilon}_{s'}^2 - v_z^2 a_{zs}^2 - \frac{v_{\perp}^2}{a_0^{2J-2}} a_+^J a_-^J} \right] \frac{\tilde{\mathcal{G}}_{d_{\downarrow}d_{\uparrow}}(\varepsilon^+)}{\mathcal{N}} \\
&+ \left[\frac{(\tilde{\varepsilon}_s + sv_z k_{zs}) V}{\tilde{\varepsilon}_s^2 - v_z^2 k_{zs}^2 - \frac{v_{\perp}^2}{k_0^{2J-2}} k_-^J k_+^J} \right] \left[\frac{s' \frac{v_{\perp}}{a_0^{J-1}} a_+^J V}{\tilde{\varepsilon}_{s'}^2 - v_z^2 a_{zs}^2 - \frac{v_{\perp}^2}{a_0^{2J-2}} a_+^J a_-^J} \right] \frac{\tilde{\mathcal{G}}_{d_{\uparrow}d_{\downarrow}}(\varepsilon^+)}{\mathcal{N}} \\
&+ \left[\frac{(\tilde{\varepsilon}_s + sv_z k_{zs}) V}{\tilde{\varepsilon}_s^2 - v_z^2 k_{zs}^2 - \frac{v_{\perp}^2}{k_0^{2J-2}} k_-^J k_+^J} \right] \left[\frac{(\tilde{\varepsilon}_{s'} + s'v_z a_{zs}) V}{\tilde{\varepsilon}_{s'}^2 - v_z^2 a_{zs}^2 - \frac{v_{\perp}^2}{a_0^{2J-2}} a_+^J a_-^J} \right] \frac{\tilde{\mathcal{G}}_{d_{\uparrow}d_{\uparrow}}(\varepsilon^+)}{\mathcal{N}} \quad (4.27)
\end{aligned}$$

Agora substituindo as Eq. (4.25) e (4.26) na Eq. (4.18), temos que

$$\begin{aligned}
\tilde{\mathcal{G}}_{c_{\mathbf{k}s\downarrow}c_{\mathbf{a}s'\downarrow}}(\varepsilon^+) &= \frac{(\tilde{\varepsilon}_s - sv_z k_{zs}) \delta_{\mathbf{k}\mathbf{a}} \delta_{ss'}}{\tilde{\varepsilon}_s^2 - v_z^2 k_{zs}^2 - \frac{v_{\perp}^2}{k_0^{2J-2}} k_+^J k_-^J} \\
&+ \left[\frac{V s \frac{v_{\perp}}{k_0^{J-1}} k_+^J}{\tilde{\varepsilon}_s^2 - v_z^2 k_{zs}^2 - \frac{v_{\perp}^2}{k_0^{2J-2}} k_+^J k_-^J} \right] \left[\frac{s' \frac{v_{\perp}}{a_0^{J-1}} a_-^J V}{\tilde{\varepsilon}_{s'}^2 - v_z^2 a_{zs}^2 - \frac{v_{\perp}^2}{a_0^{2J-2}} a_-^J a_+^J} \right] \frac{\tilde{\mathcal{G}}_{d_{\uparrow}d_{\uparrow}}(\varepsilon^+)}{\mathcal{N}} \\
&+ \left[\frac{V s \frac{v_{\perp}}{k_0^{J-1}} k_+^J}{\tilde{\varepsilon}_s^2 - v_z^2 k_{zs}^2 - \frac{v_{\perp}^2}{k_0^{2J-2}} k_+^J k_-^J} \right] \left[\frac{(\tilde{\varepsilon}_{s'} - s'v_z a_{zs}) V}{\tilde{\varepsilon}_{s'}^2 - v_z^2 a_{zs}^2 - \frac{v_{\perp}^2}{a_0^{2J-2}} a_-^J a_+^J} \right] \frac{\tilde{\mathcal{G}}_{d_{\uparrow}d_{\downarrow}}(\varepsilon^+)}{\mathcal{N}} \\
&+ \left[\frac{V (\tilde{\varepsilon}_s - sv_z k_{zs})}{\tilde{\varepsilon}_s^2 - v_z^2 k_{zs}^2 - \frac{v_{\perp}^2}{k_0^{2J-2}} k_+^J k_-^J} \right] \left[\frac{s' \frac{v_{\perp}}{a_0^{J-1}} a_-^J V}{\tilde{\varepsilon}_{s'}^2 - v_z^2 a_{zs}^2 - \frac{v_{\perp}^2}{a_0^{2J-2}} a_-^J a_+^J} \right] \frac{\tilde{\mathcal{G}}_{d_{\downarrow}d_{\uparrow}}(\varepsilon^+)}{\mathcal{N}} \\
&+ \left[\frac{V (\tilde{\varepsilon}_s - sv_z k_{zs})}{\tilde{\varepsilon}_s^2 - v_z^2 k_{zs}^2 - \frac{v_{\perp}^2}{k_0^{2J-2}} k_+^J k_-^J} \right] \left[\frac{(\tilde{\varepsilon}_{s'} - s'v_z a_{zs}) V}{\tilde{\varepsilon}_{s'}^2 - v_z^2 a_{zs}^2 - \frac{v_{\perp}^2}{a_0^{2J-2}} a_-^J a_+^J} \right] \frac{\tilde{\mathcal{G}}_{d_{\downarrow}d_{\downarrow}}(\varepsilon^+)}{\mathcal{N}} \quad (4.28)
\end{aligned}$$

A partir das Eq. (4.27) e (4.28) podemos reescrever a Eq. (4.9) da seguinte maneira

$$\begin{aligned}
\tilde{\mathcal{G}}_{\psi_R\psi_R}^\sigma(\varepsilon) &= \frac{1}{\mathcal{N}} \sum_{\mathbf{ka}} \sum_{ss'} \tilde{\mathcal{G}}_{c_{\mathbf{k}s\sigma}c_{\mathbf{a}s'\sigma'}}(\varepsilon) \\
&= \frac{1}{\mathcal{N}} \sum_{\mathbf{k}} \sum_s \frac{\tilde{\varepsilon}_s}{\tilde{\varepsilon}_s^2 - v_z^2 k_{zs}^2 - \frac{v_\perp^2}{k_0^{2J-2}} k_-^J k_+^J} \\
&\quad + \left[\Sigma_{k\sigma z}^s V \tilde{\mathcal{G}}_{d_\uparrow d_\uparrow}(\varepsilon) V \Sigma_{a\sigma z}^{s'} \right] \\
&\quad + \left[\Sigma_{k\sigma}^s V \tilde{\mathcal{G}}_{d_\uparrow d_\uparrow}(\varepsilon) V \Sigma_{a\bar{\sigma}}^{s'} \right] \\
&\quad + \left[\Sigma_{k\sigma z}^s V \tilde{\mathcal{G}}_{d_\uparrow d_\downarrow}(\varepsilon) V \Sigma_{a\sigma}^{s'} \right] \\
&\quad + \left[\Sigma_{k\sigma}^s V \tilde{\mathcal{G}}_{d_\uparrow d_\downarrow}(\varepsilon) V \Sigma_{a\bar{\sigma}z}^{s'} \right] \\
&\quad + \left[\Sigma_{k\sigma}^s V \tilde{\mathcal{G}}_{d_\downarrow d_\uparrow}(\varepsilon) V \Sigma_{a\bar{\sigma}z}^{s'} \right] \\
&\quad + \left[\Sigma_{k\sigma z}^s V \tilde{\mathcal{G}}_{d_\downarrow d_\uparrow}(\varepsilon) V \Sigma_{a\sigma}^{s'} \right] \\
&\quad + \left[\Sigma_{k\sigma}^s V \tilde{\mathcal{G}}_{d_\downarrow d_\downarrow}(\varepsilon) V \Sigma_{a\bar{\sigma}}^{s'} \right] \\
&\quad + \left[\Sigma_{k\sigma z}^s V \tilde{\mathcal{G}}_{d_\downarrow d_\downarrow}(\varepsilon) V \Sigma_{a\sigma z}^{s'} \right], \tag{4.29}
\end{aligned}$$

com as seguintes auto-energias definidas

$$\Sigma_{k\sigma z}^s = \frac{1}{\mathcal{N}} \sum_{\mathbf{ks}} \frac{\tilde{\varepsilon}_s + \sigma s v_z k_{zs}}{\tilde{\varepsilon}_s^2 - v_z^2 k_{zs}^2 - \frac{v_\perp^2}{k_0^{2J-2}} k_-^J k_+^J}, \tag{4.30}$$

$$\Sigma_{a\sigma z}^{s'} = \frac{1}{\mathcal{N}} \sum_{\mathbf{as}} \frac{\tilde{\varepsilon}_{s'} + \sigma s' v_z a_{zs}}{\tilde{\varepsilon}_{s'}^2 - v_z^2 a_{zs}^2 - \frac{v_\perp^2}{a_0^{2J-2}} a_+^J a_-^J}, \tag{4.31}$$

$$\Sigma_{k\sigma}^s = \frac{1}{\mathcal{N}} \sum_{\mathbf{ks}} \frac{s \frac{v_\perp}{k_0^{J-1}} k_\sigma^J}{\tilde{\varepsilon}_s^2 - v_z^2 k_{zs}^2 - \frac{v_\perp^2}{k_0^{2J-2}} k_+^J k_-^J} \tag{4.32}$$

e

$$\Sigma_{a\sigma}^{s'} = \frac{1}{\mathcal{N}} \sum_{\mathbf{as}} \frac{s' \frac{v_\perp}{a_0^{J-1}} a_\sigma^J}{\tilde{\varepsilon}_{s'}^2 - v_z^2 a_{zs}^2 - \frac{v_\perp^2}{a_0^{2J-2}} a_-^J a_+^J}. \tag{4.33}$$

Como já foi dito a LDOS(ε) do sistema é definida pela parte imaginária da função de Green

retardada, ou seja, $\text{LDOS}(\varepsilon) = -\frac{1}{\pi}\text{Im}\left[\sum_{\sigma}\tilde{\mathcal{G}}_{\psi_R\psi_R}^{\sigma}(\varepsilon)\right]$. Assim, temos que

$$\begin{aligned}
\text{LDOS}(\varepsilon) &= \rho_0 \\
&- \frac{1}{\pi}\text{Im}\left[\sum_{k\sigma z}^s V\tilde{\mathcal{G}}_{d_{\uparrow}d_{\uparrow}}(\varepsilon)V\Sigma_{a\sigma z}^{s'}\right] \\
&- \frac{1}{\pi}\text{Im}\left[\sum_{k\sigma}^s V\tilde{\mathcal{G}}_{d_{\uparrow}d_{\uparrow}}(\varepsilon)V\Sigma_{a\bar{\sigma}}^{s'}\right] \\
&- \frac{1}{\pi}\text{Im}\left[\sum_{k\sigma z}^s V\tilde{\mathcal{G}}_{d_{\uparrow}d_{\downarrow}}(\varepsilon)V\Sigma_{a\sigma}^{s'}\right] \\
&- \frac{1}{\pi}\text{Im}\left[\sum_{k\sigma}^s V\tilde{\mathcal{G}}_{d_{\uparrow}d_{\downarrow}}(\varepsilon)V\Sigma_{a\bar{\sigma}z}^{s'}\right] \\
&- \frac{1}{\pi}\text{Im}\left[\sum_{k\sigma}^s V\tilde{\mathcal{G}}_{d_{\downarrow}d_{\uparrow}}(\varepsilon)V\Sigma_{a\bar{\sigma}z}^{s'}\right] \\
&- \frac{1}{\pi}\text{Im}\left[\sum_{k\sigma z}^s V\tilde{\mathcal{G}}_{d_{\downarrow}d_{\uparrow}}(\varepsilon)V\Sigma_{a\sigma}^{s'}\right] \\
&- \frac{1}{\pi}\text{Im}\left[\sum_{k\sigma}^s V\tilde{\mathcal{G}}_{d_{\downarrow}d_{\downarrow}}(\varepsilon)V\Sigma_{a\bar{\sigma}}^{s'}\right] \\
&- \frac{1}{\pi}\text{Im}\left[\sum_{k\sigma z}^s V\tilde{\mathcal{G}}_{d_{\downarrow}d_{\downarrow}}(\varepsilon)V\Sigma_{a\sigma z}^{s'}\right], \tag{4.34}
\end{aligned}$$

onde

$$\rho_0 = -\frac{1}{\pi}\text{Im}\left[\frac{1}{\mathcal{N}}\sum_{\mathbf{k}}\sum_s\frac{\tilde{\varepsilon}_s}{\tilde{\varepsilon}_s^2 - v_z^2k_{zs}^2 - \frac{v_{\perp}^2}{k_0^{2J-2}}k_{-}^Jk_{+}^J}\right] \tag{4.35}$$

é responsável pela DOS do hospedeiro (Multi-Weyl) sem a presença da impureza.

4.3 Auto-Energia local

O objetivo desta seção consiste em apresentar uma solução analítica para as autoenergias com J genérico e resolver de forma analítica a expressão indicada na Eq. (4.35) para qualquer valor inteiro de J . Embora diversos estudos tenham se dedicado à investigação e análise do semimetal de multi-Weyl, muitos deles restringiram-se aos casos em que $J = 1$, $J = 2$ e $J = 3$, alegando que as expressões analíticas tornam-se excessivamente complexas, dificultando sua resolução [2, 8, 18]. Cumpre salientar que, embora haja trabalhos que tenham abordado numericamente as autoenergias e a expressão fornecida na Eq. (4.35), estes também se limitaram aos casos em que $J = 1$, $J = 2$ e $J = 3$ [8].

Primeiramente vamos calcular $\Sigma_{k\sigma z}^s$, para isto escrevemos

$$\begin{aligned}
\Sigma_{k\sigma z}^s &= \frac{1}{\mathcal{N}} \sum_{\mathbf{ks}} \frac{\tilde{\varepsilon}_s + \sigma s v_z k_{zs}}{\tilde{\varepsilon}_s^2 - v_z^2 k_{zs}^2 - \frac{v_{\perp}^2}{k_0^{2J-2}} k_{-}^J k_{+}^J} \\
&= \frac{1}{\mathcal{N}} \sum_{\mathbf{ks}} \frac{\tilde{\varepsilon}_s}{\tilde{\varepsilon}_s^2 - v_z^2 k_{zs}^2 - \frac{v_{\perp}^2}{k_0^{2J-2}} k_{-}^J k_{+}^J} \\
&\quad + \frac{1}{\mathcal{N}} \sum_{\mathbf{ks}} \frac{\sigma s v_z k_{zs}}{\tilde{\varepsilon}_s^2 - v_z^2 k_{zs}^2 - \frac{v_{\perp}^2}{k_0^{2J-2}} k_{-}^J k_{+}^J} \\
&= \frac{1}{\mathcal{N}} \sum_{\mathbf{ks}} \frac{\tilde{\varepsilon}_s}{\tilde{\varepsilon}_s^2 - v_z^2 k_{zs}^2 - \frac{v_{\perp}^2}{k_0^{2J-2}} k_{-}^J k_{+}^J}.
\end{aligned} \tag{4.36}$$

Note que vamos considerar o regime em que $Q_0 = 0$, assim podemos escrever $\tilde{\varepsilon}_s = \varepsilon^+ + sQ_0 = \varepsilon^+$, logo a auto-energia $\Sigma_{k\sigma z}^s$ pode ser reescrita na forma:

$$\Sigma_{k\sigma z}^s = \frac{1}{\mathcal{N}} \sum_{\mathbf{k}} \frac{\tilde{\varepsilon}}{\tilde{\varepsilon}^2 - v_z^2 k_{zs}^2 - \frac{v_{\perp}^2}{k_0^{2J-2}} k_{-}^J k_{+}^J} = \frac{1}{\mathcal{N}} \sum_{\mathbf{k}} \left[\frac{\varepsilon + i\eta}{(\varepsilon + i\eta)^2 - \varepsilon_{\mathbf{k}}^2} \right], \tag{4.37}$$

onde $\varepsilon_{\mathbf{k}} = v_{\perp} \sqrt{\frac{v_z^2}{v_{\perp}^2} k_{zs}^2 + \frac{k_{\perp}^{2J}}{k_0^{2J-2}}}$ e $k_{\perp}^2 = k_x^2 + k_y^2$. Então,

$$\begin{aligned}
\Sigma_{k\sigma z}^s &= \frac{1}{\mathcal{N}} \sum_{\mathbf{ks}} \left[\frac{\varepsilon + i\eta}{(\varepsilon + i\eta)^2 - \varepsilon_{\mathbf{k}}^2} \right] \\
&= \frac{1}{\mathcal{N}} \sum_{\mathbf{ks}} \left[\frac{\varepsilon}{\varepsilon^2 - \varepsilon_{\mathbf{k}}^2} - i \frac{|\varepsilon| \eta}{(\varepsilon^2 - \varepsilon_{\mathbf{k}}^2)^2 + \eta^2} \right] \\
&= \frac{1}{\mathcal{N}} \sum_{\mathbf{ks}} \left[\frac{\varepsilon}{\varepsilon^2 - \varepsilon_{\mathbf{k}}^2} \right] - i \frac{1}{\mathcal{N}} \sum_{\mathbf{k}} [\pi \delta(\varepsilon^2 - \varepsilon_{\mathbf{k}}^2) |\varepsilon|] \\
&= \frac{1}{\mathcal{N}} \sum_{\mathbf{ks}} \left[\frac{\varepsilon}{\varepsilon^2 - \varepsilon_{\mathbf{k}}^2} \right] - i \frac{1}{\mathcal{N}} \sum_{\mathbf{ks}} \left[\frac{\pi}{2} (\delta(\varepsilon - \varepsilon_{\mathbf{k}}) + \delta(\varepsilon + \varepsilon_{\mathbf{k}})) \right] \\
&= \text{Re}(\Sigma_{k\sigma z}^s) + i \text{Im}(\Sigma_{k\sigma z}^s),
\end{aligned} \tag{4.38}$$

sendo que $\text{Re}(\Sigma_{k\sigma z}^s) = \frac{1}{\mathcal{N}} \sum_{\mathbf{ks}} \left[\frac{\varepsilon}{\varepsilon^2 - \varepsilon_{\mathbf{k}}^2} \right]$ e $\text{Im}(\Sigma_{k\sigma z}^s) = -\frac{1}{\mathcal{N}} \sum_{\mathbf{ks}} \left[\frac{\pi}{2} (\delta(\varepsilon - \varepsilon_{\mathbf{k}}) + \delta(\varepsilon + \varepsilon_{\mathbf{k}})) \right]$. Para encontrar a Eq. (4.38) usamos as identidades $\frac{\eta}{(\varepsilon^2 - \varepsilon_{\mathbf{k}}^2)^2 + \eta^2} = \pi \delta(\varepsilon^2 - \varepsilon_{\mathbf{k}}^2)$ e $\delta(\varepsilon^2 - \varepsilon_{\mathbf{k}}^2) = \frac{1}{2|\varepsilon|} (\delta(\varepsilon - \varepsilon_{\mathbf{k}}) + \delta(\varepsilon + \varepsilon_{\mathbf{k}}))$.

Agora para prosseguir no cálculo de (4.38), vamos determinar separadamente $\text{Re}(\Sigma_{k\sigma z}^s)$ e $\text{Im}(\Sigma_{k\sigma z}^s)$. Iniciamos o cálculo da parte imaginária de $\Sigma_{k\sigma z}^s$, transformando a somatória discreta em uma integral contínua, além disso vamos omitir a soma sobre a quiralidade e considerar a

mesma apenas ao final do cálculo analítico das auto-energias.

$$\sum_{\mathbf{k}} \rightarrow \frac{\Omega}{(2\pi)^3} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} dk_x dk_y dk_z, \quad (4.39)$$

daí obtemos

$$\text{Im}(\Sigma_{k\sigma z}^s) = -\frac{1}{\mathcal{N}} \left(\frac{\Omega}{(2\pi)^3} \right) \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \left[\frac{\pi}{2} (\delta(\varepsilon - \varepsilon_{\mathbf{k}}) + \delta(\varepsilon + \varepsilon_{\mathbf{k}})) \right] dk_x dk_y dk_{zs}. \quad (4.40)$$

Agora, vamos realizar a seguinte mudança de variável:

$$\begin{cases} k_x = k_0 k'_x, \\ k_y = k_0 k'_y, \\ k_{zs} = k'_z. \end{cases} \quad (4.41)$$

Assim, temos:

$$\text{Im}(\Sigma_{k\sigma z}^s) = -\frac{\Omega k_0^2}{\mathcal{N} (2\pi)^3} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \left[\frac{\pi}{2} (\delta(\varepsilon - \varepsilon_{\mathbf{k}}) + \delta(\varepsilon + \varepsilon_{\mathbf{k}})) \right] dk'_x dk'_y dk'_z, \quad (4.42)$$

com $\varepsilon_{\mathbf{k}} = \sqrt{v_z^2 k_z'^2 + v_{\perp}^2 k_0^2 (k_x'^2 + k_y'^2)^J}$. Agora faremos outra mudança de variável [18],

$$\begin{cases} k'_x = \left(\frac{\varepsilon_{\mathbf{k}} \sin \theta}{v_{\perp} k_0} \right)^{\frac{1}{J}} \cos \phi, \\ k'_y = \left(\frac{\varepsilon_{\mathbf{k}} \sin \theta}{v_{\perp} k_0} \right)^{\frac{1}{J}} \sin \phi, \\ k'_z = \frac{\varepsilon_{\mathbf{k}}}{v_z} \cos \theta, \end{cases} \quad (4.43)$$

Logo,

$$\text{Im}(\Sigma_{k\sigma z}^s) = -\frac{\Omega k_0^2}{\mathcal{N} (2\pi)^3} \int_0^{\infty} \int_0^{2\pi} \int_0^{\pi} J(\varepsilon_{\mathbf{k}}, \theta, \phi) \left[\frac{\pi}{2} (\delta(\varepsilon - \varepsilon_{\mathbf{k}}) + \delta(\varepsilon + \varepsilon_{\mathbf{k}})) \right] d\theta d\phi d\varepsilon_{\mathbf{k}}, \quad (4.44)$$

com

$$J(\varepsilon_{\mathbf{k}}, \theta, \phi) = \begin{vmatrix} \frac{\partial k_x}{\partial \varepsilon_{\mathbf{k}}} & \frac{\partial k_x}{\partial \theta} & \frac{\partial k_x}{\partial \phi} \\ \frac{\partial k_y}{\partial \varepsilon_{\mathbf{k}}} & \frac{\partial k_y}{\partial \theta} & \frac{\partial k_y}{\partial \phi} \\ \frac{\partial k_z}{\partial \varepsilon_{\mathbf{k}}} & \frac{\partial k_z}{\partial \theta} & \frac{\partial k_z}{\partial \phi} \end{vmatrix} = \frac{\varepsilon_{\mathbf{k}}^{2/J} (\sin \theta)^{\frac{2}{J}-1}}{J v_z (v_{\perp} k_0)^{2/J}}, \quad (4.45)$$

assim temos

$$\begin{aligned}
\text{Im}(\Sigma_{k\sigma z}^s) &= -\frac{\Omega k_0^2}{\mathcal{N}(2\pi)^3} \int_0^\infty \int_0^{2\pi} \int_0^\pi \frac{\varepsilon_{\mathbf{k}}^{2/J} (\sin \theta)^{\frac{2}{J}-1}}{Jv_z(v_\perp k_0)^{2/J}} \left[\frac{\pi}{2} (\delta(\varepsilon - \varepsilon_{\mathbf{k}}) + \delta(\varepsilon + \varepsilon_{\mathbf{k}})) \right] d\theta d\phi d\varepsilon_{\mathbf{k}} \\
&= -\frac{\Omega k_0^{\frac{2J-2}{J}} |\varepsilon|^{2/J}}{8\mathcal{N}\pi Jv_z v_\perp^{2/J}} \int_0^\pi (\sin \theta)^{\frac{2-J}{J}} d\theta.
\end{aligned} \tag{4.46}$$

Fazendo $\sin \theta = u^{\frac{J}{2-J}}$, temos $du = \frac{2-J}{J} u^{\frac{2-2J}{2-J}} (1 - u^{\frac{2J}{2-J}})^{1/2} d\theta$ ou $d\theta = \frac{J}{2-J} \left(\frac{1}{u^{\frac{2-2J}{2-J}} (1 - u^{\frac{2J}{2-J}})^{1/2}} \right) du$,
então

$$\begin{aligned}
\text{Im}(\Sigma_{k\sigma z}^s) &= -\frac{\Omega k_0^{\frac{2J-2}{J}} |\varepsilon|^{2/J}}{8\mathcal{N}\pi Jv_z v_\perp^{2/J}} \int_0^\pi (\sin \theta)^{\frac{2-J}{J}} d\theta \\
&= -\frac{\Omega k_0^{\frac{2J-2}{J}} |\varepsilon|^{2/J}}{8\mathcal{N}\pi Jv_z v_\perp^{2/J}} 2 \int_0^{\pi/2} (\sin \theta)^{\frac{2-J}{J}} d\theta \\
&= -\frac{\Omega k_0^{\frac{2J-2}{J}} |\varepsilon|^{2/J}}{8\mathcal{N}\pi Jv_z v_\perp^{2/J}} \left(\frac{2J}{2-J} \right) \int_0^1 u^{\frac{J}{2-J}} (1 - u^{\frac{2J}{2-J}})^{-1/2} du.
\end{aligned} \tag{4.47}$$

Agora fazendo $u^{\frac{2J}{2-J}} = v \implies u = v^{\frac{2-J}{2J}}$ e $du = \frac{2-J}{2J} v^{\frac{2-3J}{2J}} dv$, temos

$$\begin{aligned}
\text{Im}(\Sigma_{k\sigma z}^s) &= -\frac{\Omega k_0^{\frac{2J-2}{J}} |\varepsilon|^{2/J}}{8\mathcal{N}\pi Jv_z v_\perp^{2/J}} \left(\frac{2J}{2-J} \right) \int_0^1 u^{\frac{J}{2-J}} (1 - u^{\frac{2J}{2-J}})^{-1/2} du \\
&= -\frac{\Omega k_0^{\frac{2J-2}{J}} |\varepsilon|^{2/J}}{8\mathcal{N}\pi Jv_z v_\perp^{2/J}} \int_0^1 v^{\frac{1-J}{J}} (1 - v)^{-1/2} dv,
\end{aligned} \tag{4.48}$$

sabendo que a função Beta é definida como $\beta(x, y) = \int_0^1 t^{x-1} (1-t)^{y-1} dt$, reescrevemos a expressão anterior na forma:

$$\begin{aligned}
\text{Im}(\Sigma_{k\sigma z}^s) &= -\frac{\Omega k_0^{\frac{2J-2}{J}} |\varepsilon|^{2/J}}{8\mathcal{N}\pi Jv_z v_\perp^{2/J}} \beta\left(\frac{1}{J}, \frac{1}{2}\right) \\
&= -\left(\frac{\Omega k_0^{\frac{2J-2}{J}} \Gamma\left(\frac{1}{J}\right)}{8\mathcal{N}\pi^{1/2} Jv_z v_\perp^{2/J} \Gamma\left(\frac{2+J}{2J}\right)} \right) (\varepsilon^2)^{1/J} \\
&= -\left(\frac{3\pi^{3/2} \Gamma\left(\frac{1}{J}\right)}{4JD^{\frac{2+J}{J}} \Gamma\left(\frac{2+J}{2J}\right)} \right) (\varepsilon^2)^{1/J},
\end{aligned} \tag{4.49}$$

com $\Gamma(x)$ sendo a função Gamma e a lei de potência $(\varepsilon^2)^{1/J}$ é caracterizando o pseudo-gap no nível de Fermi ($\varepsilon = 0$). Agora fazendo uso das relações $\beta(x, y) = \frac{\Gamma(x)\Gamma(y)}{\Gamma(x+y)}$, $\Gamma\left(\frac{1}{2}\right) = \sqrt{\pi}$,

$\mathcal{N} = \frac{\Omega}{6\pi^2} k_F^3$, $k_D = k_0 = D/v_F (D)$, sendo este último o corte do momento (energia), obtemos:

$$\text{Im}(\Sigma_{k\sigma z}^s) = - \left(\frac{3\pi^{3/2}\Gamma\left(\frac{1}{J}\right)}{2JD^{\frac{2+J}{J}}\Gamma\left(\frac{2+J}{2J}\right)} \right) (\varepsilon^2)^{1/J}, \quad (4.50)$$

com $v_F = v_z = v_\perp$. Para está última expressão foi levado em consideração a soma sobre a quiralidade, inicialmente omitida.

Para determinar a parte real da auto-energia $\Sigma_{k\sigma z}^s$ seguimos processo análogo ao construído para a parte imaginária, ou seja, escrevemos

$$\text{Re}(\Sigma_{k\sigma z}^s) = \frac{\Omega}{\mathcal{N}(2\pi)^3} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \left[\frac{\varepsilon}{\varepsilon^2 - \varepsilon_{\mathbf{k}}^2} \right] dk_x dk_y dk_z. \quad (4.51)$$

Realizando as mesmas mudanças de variáveis propostas nas Eq. (4.41) e (4.43), obtemos

$$\text{Re}(\Sigma_{k\sigma z}^s) = \frac{\Omega k_0^{\frac{2J-2}{J}} \Gamma\left(\frac{1}{J}\right)}{4\pi^{3/2} \mathcal{N} J v_z v_\perp^{\frac{2}{J}} \Gamma\left(\frac{2+J}{2J}\right)} \int_0^\infty \varepsilon_{\mathbf{k}}^{2/J} \left[\frac{\varepsilon}{\varepsilon^2 - \varepsilon_{\mathbf{k}}^2} \right] d\varepsilon_{\mathbf{k}} \quad (4.52)$$

Diferente do que foi feito para a parte imaginária de $\Sigma_{k\sigma z}^s$, para finalizar o cálculo analítico da parte real de $\Sigma_{k\sigma z}^s$ necessitamos separar a análise do mesmo nos casos em que $J = 1$, $J = 2$ e $J \geq 3$.

Deste modo, quando $J = 1$ obtemos

$$\text{Re}(\Sigma_{k\sigma z}^s) = \frac{3\varepsilon}{D^3} \left[\varepsilon \left(\ln \left| \frac{D + \varepsilon}{D - \varepsilon} \right| \right) - 2D \right]. \quad (4.53)$$

Quando $J = 2$, temos

$$\text{Re}(\Sigma_{k\sigma z}^s) = \frac{3\pi}{4D^2} \varepsilon \ln \left(\frac{\varepsilon^2}{|\varepsilon^2 - D^2|} \right) \quad (4.54)$$

e por fim para $J \geq 3$, temos duas soluções que operam em regimes energéticos distintos

$$\begin{aligned} \text{Re}(\Sigma_{k\sigma z}^s) &= \frac{3\pi^{1/2}\Gamma\left(\frac{1}{J}\right)}{4JD^{\frac{J+2}{J}}\Gamma\left(\frac{2+J}{2J}\right)} \left[\int_0^\infty \left[\frac{\varepsilon_{\mathbf{k}}^{2/J}}{1 + \varepsilon'_{\mathbf{k}}} \right] d\varepsilon'_{\mathbf{k}} + \int_0^\infty \left[\frac{\varepsilon_{\mathbf{k}}^{2/J}}{1 - \varepsilon'_{\mathbf{k}}} \right] d\varepsilon'_{\mathbf{k}} \right] (\varepsilon^2)^{1/J} \\ &= \frac{3\pi^{1/2}\Gamma\left(\frac{1}{J}\right)}{4JD^{\frac{J+2}{J}}\Gamma\left(\frac{2+J}{2J}\right)} \left[\pi \cot \left(\frac{(2+J)\pi}{J} \right) + \pi \csc \left(\frac{(2+J)\pi}{J} \right) \right] (\varepsilon^2)^{1/J} \\ &= - \frac{3\pi^{1/2}\Gamma\left(\frac{1}{J}\right) (\varepsilon^2)^{1/J}}{4JD^{\frac{J+2}{J}}\Gamma\left(\frac{2+J}{2J}\right)} \pi \tan \left(\frac{\pi}{J} \right), \end{aligned} \quad (4.55)$$

com $\varepsilon > 0$ e

$$\begin{aligned}
\text{Re}(\Sigma_{k\sigma z}^s) &= \frac{3\pi^{1/2}\Gamma(\frac{1}{J})}{4JD^{\frac{J+2}{J}}\Gamma(\frac{2+J}{2J})} \left[\int_0^\infty \left[\frac{\varepsilon_{\mathbf{k}}'^{2/J}}{-1 + \varepsilon'_{\mathbf{k}}} \right] d\varepsilon'_{\mathbf{k}} - \int_0^\infty \left[\frac{\varepsilon_{\mathbf{k}}'^{2/J}}{1 + \varepsilon'_{\mathbf{k}}} \right] d\varepsilon'_{\mathbf{k}} \right] (\varepsilon^2)^{1/J} \\
&= -\frac{3\pi^{1/2}\Gamma(\frac{1}{J})}{4JD^{\frac{J+2}{J}}\Gamma(\frac{2+J}{2J})} \left[\pi \cot\left(\frac{(2+J)\pi}{J}\right) + \pi \csc\left(\frac{(2+J)\pi}{J}\right) \right] (\varepsilon^2)^{1/J} \\
&= \frac{3\pi^{1/2}\Gamma(\frac{1}{J})}{4JD^{\frac{J+2}{J}}\Gamma(\frac{2+J}{2J})} (\varepsilon^2)^{1/J} \pi \tan\left(\frac{\pi}{J}\right), \tag{4.56}
\end{aligned}$$

com $\varepsilon < 0$. Estas duas últimas expressões dependem de integrais divergentes, por isso estaremos considerando apenas seus valores principais.

Da mesma forma que calculamos $\Sigma_{k\sigma z}^s$ pode-se mostrar que $\Sigma_{k\sigma}^s = \Sigma_{a\sigma}^{s'} = \Sigma_{a\bar{\sigma}}^{s'} = 0$. Assim, a eq. (4.29) pode ser reescrita como:

$$\tilde{\mathcal{G}}_\sigma = \tilde{\mathcal{G}}_\sigma^0 + \tilde{\mathcal{G}}_\sigma^0 \nu \tilde{\mathcal{G}}_{\text{Imp.}\sigma} \nu \tilde{\mathcal{G}}_\sigma^0, \tag{4.57}$$

verificando a validade da Equação de Dyson, com

$$\begin{aligned}
\tilde{\mathcal{G}}_\sigma^0 = \Sigma_{k\sigma z}^s &= \frac{1}{\mathcal{N}} \sum_{\mathbf{k}s} \frac{\varepsilon + i0^+}{(\varepsilon + i0^+)^2 + (\varepsilon_{\mathbf{k}s}^+)^2} = \text{Re}\tilde{\mathcal{G}}_\sigma^0 + i\text{Im}\tilde{\mathcal{G}}_\sigma^0 \\
&= \left| \tilde{\mathcal{G}}_\sigma^0 \right| \exp(i\delta_J), \tag{4.58}
\end{aligned}$$

$\tilde{\mathcal{G}}_{\text{Imp.}\sigma} = \mathcal{G}_{d_\sigma d_{\sigma'}}$, $\text{Re}\tilde{\mathcal{G}}_\sigma^0 = \text{Re}\Sigma_{k\sigma z}^s$ e $\text{Im}\tilde{\mathcal{G}}_\sigma^0 = \text{Im}\Sigma_{k\sigma z}^s$. O termo δ_J representa a fase do propagador, em particular na ausência da impureza, o que se espera que dependa da carga topológica J , através da relação de dispersão $\varepsilon_{\mathbf{k}s}^+$ da Eq.(4.3). Assim, temos que:

$$\tan \delta_J = \frac{\text{Im}\tilde{\mathcal{G}}_\sigma^0}{\text{Re}\tilde{\mathcal{G}}_\sigma^0}. \tag{4.59}$$

Esta quantidade, como veremos mais adiante, está estritamente ligada ao parâmetro de assimetria Fano q_J do sistema, sendo este responsável pela modulação dos perfis Fano para o LDOS.

Então, temos que a LDOS(ε) passa a ser expressa como:

$$\text{LDOS}(\varepsilon) = \frac{1}{\pi} \tilde{\mathcal{G}}_\sigma. \tag{4.60}$$

4.4 Função de Green das Impurezas

Observando a expressão (4.57), percebe-se que agora é necessário determinar as funções de Green da Impureza ($\tilde{\mathcal{G}}_{\text{Imp},\sigma} = \mathcal{G}_{d_\sigma d_{\sigma'}}(\varepsilon)$), a qual é definida por

$$\mathcal{G}_{d_\sigma d_{\sigma'}}(t) = -\frac{i}{\hbar} \theta(t) Z^{-1} \sum_n e^{-\beta E_n} \left\langle n \left| \left[d_\sigma(t); d_{\sigma'}^\dagger(0) \right]_+ \right| n \right\rangle, \quad (4.61)$$

e novamente seguindo raciocínio análogo ao que foi realizado na seção anterior, aplicamos a EOM e realizamos a transformada de Fourier e obtemos que

$$(\varepsilon^+ - \varepsilon_{d_\sigma}) \tilde{\mathcal{G}}_{d_\sigma d_\sigma}(\varepsilon^+) = 1 + U \mathcal{G}_{d_\sigma n_{d\bar{\sigma}} d_{\sigma'}}(\varepsilon^+) + \sum_{\mathbf{k}\sigma z}^s \tilde{\mathcal{G}}_{d_\sigma d_\sigma}(\varepsilon^+). \quad (4.62)$$

Agora devemos calcular

$$\mathcal{G}_{d_\sigma n_{d\bar{\sigma}} d_{\sigma'}}(t) = \frac{-i}{\hbar} \theta(t) \sum_n e^{-\beta E_n} \langle n | [d_\sigma(t) n_{d\bar{\sigma}}(t), d_{\sigma'}^\dagger(0)]_+ | n \rangle. \quad (4.63)$$

Novamente aplicando a EOM e a transformada de Fourier obtemos

$$\begin{aligned} (\varepsilon^+ - \varepsilon_{d_\sigma} - U) \tilde{\mathcal{G}}_{d_\sigma n_{d\bar{\sigma}} d_{\sigma'}}(\varepsilon^+) &= \langle n_{d\bar{\sigma}} \rangle + \left(-\frac{1}{\sqrt{\mathcal{N}}} \sum_{\mathbf{k}s} V \right) \tilde{\mathcal{G}}_{c_{\mathbf{k}s\bar{\sigma}}^\dagger d_{\bar{\sigma}} d_{\sigma'}}(\varepsilon) \\ &+ \left(\frac{1}{\sqrt{\mathcal{N}}} \sum_{\mathbf{k}s} V \right) \tilde{\mathcal{G}}_{c_{\mathbf{k}s\sigma} d_{\bar{\sigma}}^\dagger d_{\sigma'}}(\varepsilon) \\ &+ \left(\frac{1}{\sqrt{\mathcal{N}}} \sum_{\mathbf{k}s} V \right) \tilde{\mathcal{G}}_{d_{\bar{\sigma}}^\dagger c_{\mathbf{k}s\bar{\sigma}} d_{\sigma'}}(\varepsilon). \end{aligned} \quad (4.64)$$

Agora usaremos a aproximação de Hubbard I, dada por:

$$\tilde{\mathcal{G}}_{c_{\mathbf{k}s\bar{\sigma}}^\dagger d_{\bar{\sigma}} d_{\sigma'}}(\varepsilon) \simeq \langle c_{\mathbf{k}s\bar{\sigma}}^\dagger d_{\bar{\sigma}} \rangle \tilde{\mathcal{G}}_{d_\sigma d_{\sigma'}}(\varepsilon) \quad (4.65)$$

e

$$\tilde{\mathcal{G}}_{d_{\bar{\sigma}}^\dagger c_{\mathbf{k}s\bar{\sigma}} d_{\sigma'}}(\varepsilon) \simeq \langle d_{\bar{\sigma}}^\dagger c_{\mathbf{k}s\bar{\sigma}} \rangle \tilde{\mathcal{G}}_{d_\sigma d_{\sigma'}}(\varepsilon) = \langle c_{\mathbf{k}s\bar{\sigma}}^\dagger d_{\bar{\sigma}} \rangle \tilde{\mathcal{G}}_{d_\sigma d_{\sigma'}}(\varepsilon), \quad (4.66)$$

logo, podemos escrever:

$$(\varepsilon^+ - \varepsilon_{d_\sigma} - U) \tilde{\mathcal{G}}_{d_\sigma n_{d\bar{\sigma}} d_{\sigma'}}(\varepsilon^+) = \langle n_{d\bar{\sigma}} \rangle + \left(\frac{1}{\sqrt{\mathcal{N}}} \sum_{\mathbf{k}s} V \right) \tilde{\mathcal{G}}_{c_{\mathbf{k}s\sigma} d_{\bar{\sigma}}^\dagger d_{\sigma'}}(\varepsilon). \quad (4.67)$$

Agora aplicaremos a EOM e realizaremos a transformada de Fourier para encontrar $\mathcal{G}_{c_{\mathbf{k}s\sigma}d_{\bar{\sigma}}^{\dagger}d_{\sigma}}(\varepsilon)$.

Assim, temos que

$$\begin{aligned}\tilde{\mathcal{G}}_{c_{\mathbf{k}s\sigma}n_{d\bar{\sigma}}d_{\sigma}}(\varepsilon) &= \frac{s \frac{v_{\perp}}{k_0^{J-1}} k_{\bar{\sigma}}^J \frac{1}{\sqrt{N}} V}{\left((\varepsilon_s^+)^2 - (v_z k_{zs})^2 - \left(\frac{v_{\perp}}{k_0^{J-1}} \right)^2 k_+^J k_-^J \right)} \tilde{\mathcal{G}}_{d_{\bar{\sigma}}n_{d\bar{\sigma}}d_{\sigma}}(\varepsilon) \\ &+ \frac{\frac{1}{\sqrt{N}} V (\varepsilon_s^+ + s\sigma v_z k_{zs})}{\left((\varepsilon_s^+)^2 - (v_z k_{zs})^2 - \left(\frac{v_{\perp}}{k_0^{J-1}} \right)^2 k_+^J k_-^J \right)} \tilde{\mathcal{G}}_{d_{\sigma}n_{d\bar{\sigma}}d_{\sigma}}(\varepsilon).\end{aligned}\quad (4.68)$$

Usando a aproximação $\tilde{\mathcal{G}}_{d_{\bar{\sigma}}n_{d\bar{\sigma}}d_{\sigma}}(\varepsilon) \simeq \langle n_{d\bar{\sigma}} \rangle \tilde{\mathcal{G}}_{d_{\bar{\sigma}}d_{\sigma}}(\varepsilon)$ e $\tilde{\mathcal{G}}_{d_{\sigma}n_{d\bar{\sigma}}d_{\sigma}}(\varepsilon) \simeq \langle n_{d\bar{\sigma}} \rangle \tilde{\mathcal{G}}_{d_{\sigma}d_{\sigma}}(\varepsilon)$ temos que

$$\begin{aligned}\tilde{\mathcal{G}}_{c_{\mathbf{k}s\sigma}n_{d\bar{\sigma}}d_{\sigma}}(\varepsilon) &= \frac{s \frac{v_{\perp}}{k_0^{J-1}} k_{\bar{\sigma}}^J \frac{1}{\sqrt{N}} V}{\left((\varepsilon_s^+)^2 - (v_z k_{zs})^2 - \left(\frac{v_{\perp}}{k_0^{J-1}} \right)^2 k_+^J k_-^J \right)} \langle n_{d\bar{\sigma}} \rangle \tilde{\mathcal{G}}_{d_{\bar{\sigma}}d_{\sigma}}(\varepsilon) \\ &+ \frac{\frac{1}{\sqrt{N}} V (\varepsilon_s^+ + s\sigma v_z k_{zs})}{\left((\varepsilon_s^+)^2 - (v_z k_{zs})^2 - \left(\frac{v_{\perp}}{k_0^{J-1}} \right)^2 k_+^J k_-^J \right)} \langle n_{d\bar{\sigma}} \rangle \tilde{\mathcal{G}}_{d_{\sigma}d_{\sigma}}(\varepsilon),\end{aligned}\quad (4.69)$$

sendo que

$$\langle n_{d\sigma} \rangle = \int_{-D}^0 \text{DOS} d\varepsilon. \quad (4.70)$$

Combinando as Eq. (4.69), (4.67) e (4.62), temos

$$\tilde{\mathcal{G}}_{d_{\sigma}d_{\sigma}}(\varepsilon) = \frac{1 - \langle n_{d\bar{\sigma}} \rangle}{\varepsilon - \varepsilon_{d\sigma} - \Sigma_{\mathbf{k}\sigma z}^s} + \frac{\langle n_{d\bar{\sigma}} \rangle}{\varepsilon - \varepsilon_{d\sigma} - U - \Sigma_{\mathbf{k}\sigma z}^s} \quad (4.71)$$

Ao considerarmos o caso em que $T \ll T_K \rightarrow 0$ (Temperatura Kondo) [50] e levando em conta que o sistema tem um pseudogap no nível de Fermi, as correlações de Kondo não emergem [8] e conseqüentemente, ocorre o regime de bloqueio de Coulomb. Este último é caracterizado apenas pelos estados ressonantes [46] $\varepsilon_{d\sigma}$ e $\varepsilon_{d\sigma} + U$, assim a correlação U em $\tilde{\mathcal{G}}_{d_{\sigma}d_{\sigma}}(\varepsilon)$, pode ser tratada com a aproximação de Hubbard-I [46, 51, 52]. A aproximação de Hubbard-I é de fato um cálculo de campo médio, ou seja, a mesma possibilita uma truncagem das GFs, permitindo determinar a GF da impureza ($\tilde{\mathcal{G}}_{d_{\sigma}d_{\sigma}}(\varepsilon)$), conforme foi obtido na Eq. (4.71).

Ainda podemos, reescrever a Eq. (4.71),

$$\tilde{\mathcal{G}}_{d_\sigma d_\sigma}(\varepsilon) = -\frac{1}{v^2 \text{Im}\tilde{\mathcal{G}}_\sigma^0} \left(\frac{w_x}{x+i} + \frac{w_{\bar{x}}}{\bar{x}+i} \right). \quad (4.72)$$

Isto garante, como esperado, a forma de linha lorentziana na DOS, com $w_x = 1 - \langle n_{d\bar{\sigma}} \rangle$ e $w_{\bar{x}} = 1 - w_x$ sendo pesos espectrais para as energias ressonantes adimensionais

$$x = \frac{\varepsilon - \varepsilon_{d\sigma} - v^2 \text{Re}\tilde{\mathcal{G}}_\sigma^0}{-v^2 \text{Im}\tilde{\mathcal{G}}_\sigma^0} \quad (4.73)$$

e

$$\bar{x} = \frac{\varepsilon - \varepsilon_{d\sigma} - U - v^2 \text{Re}\tilde{\mathcal{G}}_\sigma^0}{-v^2 \text{Im}\tilde{\mathcal{G}}_\sigma^0}, \quad (4.74)$$

lembrando que $\text{Re}\tilde{\mathcal{G}}_\sigma^0 = \text{Re}\Sigma_{k\sigma z}^s$ e $\text{Im}\tilde{\mathcal{G}}_\sigma^0 = \text{Im}\Sigma_{k\sigma z}^s$.

4.5 Perfil Natural Fano

Podemos finalmente obter o perfil Fano, que a partir daqui chamamos de perfil Natural Fano (NFP), uma vez expresso em termos de suas coordenadas naturais x e \bar{x} . Levando em conta o grau de liberdade por spin, encontramos $\text{NFP}=2\text{LDOS}/\rho_0(1+q_J^2)$, com

$$\rho_0 = -\frac{1}{\pi} \text{Im}\tilde{\mathcal{G}}_\sigma^0 \quad (4.75)$$

sendo a DOS do hospedeiro (multi-Weyl) e

$$\text{NFP} = \frac{2}{1+q_J^2} \left[w_x \frac{(x+q_J)^2}{x^2+1} + w_{\bar{x}} \frac{(\bar{x}+q_J)^2}{\bar{x}^2+1} \right], \quad (4.76)$$

que se mantém no limite da banda larga $D/\varepsilon \rightarrow \infty$. Da Eq. (4.76) e para $\varepsilon < 0$ ($\varepsilon > 0$) o NFP indica pontos de mínimo e máximo em $x = -q_J$ ($\bar{x} = -q_J$) e $x = 1/q_J$ ($\bar{x} = 1/q_J$), respectivamente.

Destacamos que a própria linha espectral da LDOS, como veremos na análise numérica, não exibirá um perfil de Fano em função da energia ε para um determinado q_J , como ocorre para metais [41, 53, 54]. Assim, mostraremos que para a revelação de tal comportamento deve-se analisar o perfil Fano em função de x ou \bar{x} , ou seja, devemos adotar as coordenadas naturais para o surgimento e observação do perfil Fano.

O parâmetro de assimetria Fano exibido em (4.76) é dado por

$$q_J = -\frac{\text{Re}\tilde{\mathcal{G}}_\sigma^0}{\text{Im}\tilde{\mathcal{G}}_\sigma^0} = -\cot \delta_J. \quad (4.77)$$

e mais especificamente temos que

$$q_{J \leq 2} = -\frac{\text{Re}\tilde{\mathcal{G}}_\sigma^0(J \leq 2)}{\text{Im}\tilde{\mathcal{G}}_\sigma^0(J \leq 2)} = -\cot \delta_{J \leq 2} \quad (4.78)$$

como dependente tanto da energia para $\varepsilon/D \ll 1$, quanto da carga topológica J . Para $J \geq 3$, obtemos um parâmetro de Fano discretizado e estritamente dependente apenas da carga topológica J .

$$q_{J \geq 3} = -\text{sgn}(\varepsilon) \tan(C_{2J \geq 6}), \quad (4.79)$$

onde definimos $C_{2J} \equiv (360^\circ/2J)$ como o ângulo correspondente do grupo de simetria rotacional. Note que para $J = 3$, $q_{J=3} = -\text{sgn}(\varepsilon) \tan(C_{2J=6}) = -\text{sgn}(\varepsilon)\sqrt{3}$, enquanto para $J \gg 1$, temos $|q_{J \gg 1}| \rightarrow 0$, os quais correspondem ao caso máximo permitido com proteção pela simetria de grupo pontual, ou seja, o grupo de simetria rotacional $C_{2J=6}$, e o hipotético semimetal hiper-Weyl, respectivamente.

Capítulo 5

Grafeno Multicamadas Romboédrico

De maneira análoga ao que foi proposto no capítulo anterior, o Hamiltoniano total que descreve o sistema descrito na Fig. 5.1 (a) proposto é constituído de três partes, sendo

$$\mathcal{H}_{\text{ch.-ABC}} = \sum_{\mathbf{k}s} \psi_{\mathbf{k}s}^\dagger [D_J(\tilde{k}_-^J \sigma_+ + \tilde{k}_+^J \sigma_-)] \psi_{\mathbf{k}s} \quad (5.1)$$

descreve o termo quiral do grafeno multicamadas ABC por um conjunto de $J \geq 3$ monocamadas independentes com dupletos de *pseudospin*, sendo $J\pi$ a fase de Berry. Além disso, J representa o total de monocamadas. O termo quiral exibido em 5.1 leva em conta apenas os acoplamentos γ_0 e γ_1 , desprezando os demais acoplamentos ($\gamma_2 = \gamma_3 = \gamma_4 = 0$), conforme pode ser observado na Fig. 5.1 a). Note que $\psi_{\mathbf{k}s}^\dagger = (c_{\mathbf{k}s\uparrow}^\dagger c_{\mathbf{k}s\downarrow}^\dagger)$ representam os spinores (ou operadores de campo), com $c_{\mathbf{k}s\sigma}^\dagger$ ($c_{\mathbf{k}s\sigma}$) sendo os operadores de criação (aniquilação) de um elétron com momento \mathbf{k} , spin $\sigma = \uparrow, \downarrow$ e quiralidade $s = \pm 1$ em um único duplete de *pseudospin* [26]. O termo não relativístico é introduzido por $\tilde{k}_\pm = (k_x \pm ik_y)/k_{D_J}$, com $k_{D_J} = D_J/v_F$ ($D_{J \geq 3} \approx \gamma_1 = 0.1\gamma_0$ e $\gamma_0 = 3\text{eV}$ 4.1 (a), [26]). Assim, o corte k_{D_J} (D_J) do momento (energia) é expresso em termos da parametrização de Slonczewski-Weiss-McClure [35, 55], com v_F sendo a velocidade de Fermi e $\sigma_\pm = \frac{1}{2}(\sigma_x \pm i\sigma_y)$ as matrizes de Pauli. A estrutura de bandas da Eq. (5.1) é dada pela relação de dispersão

$$\varepsilon_{\mathbf{k}s}^\pm = \pm s v_F |\tilde{k}_+|^J k_{D_J}, \quad (5.2)$$

os sinais + e - correspondem às bandas de condução e valência, respectivamente. Além disso, é importante destacar que para $J = 1$ recuperamos o caso em que temos apenas uma folha de grafeno [56], com cones de Dirac bem definidos no espaço dos momentos e $D_{J=1} \approx \gamma_0$, enquanto que para $J \geq 3$ temos o grafeno multicamadas quiral, que é caracterizado por uma banda chata

com uma singularidade de van Hove devido a um estado sem dispersão no nível de Fermi.

É importante destacar que o Hamiltoniano que descreve o grafeno multicamadas ABC com um conjunto de $J \geq 3$ monocamadas é obtido a partir do (4.1) que descreve os férmions de multi-Weyl, considerando $v_z = 0$ [26].

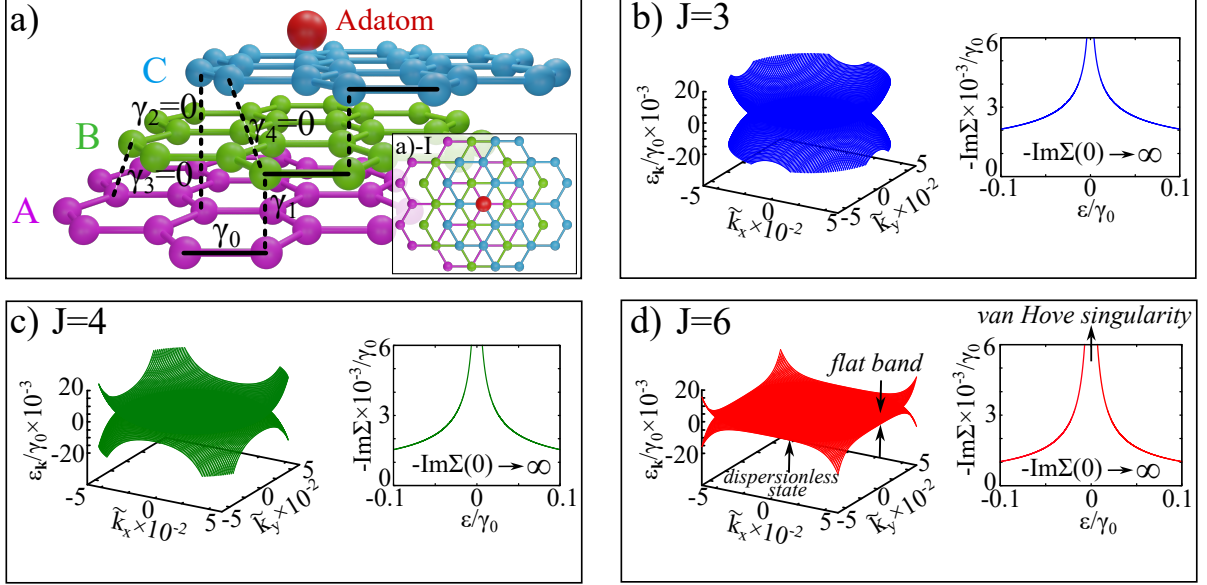


Figura 5.1: (a) Representação numa perspectiva lateral do grafeno multicamadas seguindo o empilhamento do tipo ABC e um átomo adsorvido no seu topo[painel (a)-I].(b) – (d) Nestes painéis são registrados as estruturas de bandas para $J = 3, 4$ e 6 , sendo tais estruturas obtidas a partir da relação de dispersão 5.2. Nos painéis também são ilustrados o alargamento de quasipartículas versus energia, sendo possível identificar um estado sem dispersão e uma singularidade de van Hove na energia de Fermi, respectivamente. Ao aumentar a fase Berry $J\pi$, a extensão da banda chata no espaço recíproco também aumenta. Além disso, J representa o total de monocamadas.(Figura retirada de [28]).

Os termos que descrevem os Hamiltonianos ($\mathcal{H}_{\text{Ada.}}$ e $\mathcal{H}_{\text{Hyb.}}$) da impureza e de hibridização são expressos de maneira análoga como nas Eq. (4.4) e (4.5) respectivamente.

É importante enfatizar que de acordo com a Ref. [57], no regime paramagnético, a singularidade de van Hove para $J \geq 6$ se transforma em um pico estreito assimétrico em torno da energia de Fermi quando as correlações de Coulomb são levadas em consideração por uma abordagem da teoria funcional de densidade (DFT). Neste caso, os parâmetros γ_2, γ_3 e γ_4 não são desprezíveis, assumindo valores finitos, produzindo uma banda quase chata próxima ao nível de Fermi [57]. Este cenário é capturado qualitativamente pela Eq.(5.1), como será discutido no capítulo 6.

Note que o termo de hibridização indica que o átomo adsorvido é colocado diretamente sobre um átomo de carbono, ou seja, é adotado uma adsorção *Top*, conforme é representado

na Fig. 5.1 (a), como *Au* e *Sn* preferem [58]. No entanto, há outras configurações de adsorção que poderiam ser adotadas, como um átomo adsorvido no centro do hexágono ou no meio da ligação em entre dois átomos de carbono [58], conforme é indicado na Fig. 5.2.

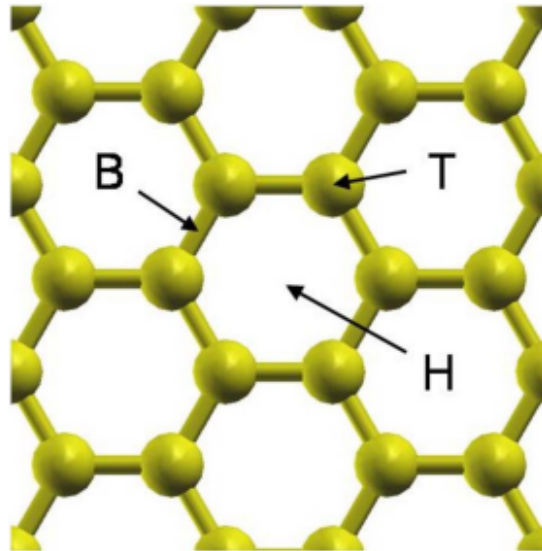


Figura 5.2: Os três locais de adsorção que podem ser considerados são: *Hollow* (H) que é indicado no centro do hexágono, *Bridge* (B) que corresponde ao meio da ligação em entre dois átomos de carbono, e *Top* (T) indicado sobre um átomo de carbono.(Figura retirada de [58]).

Para $J \geq 3$ verificamos regimes de colapso atômico semelhantes ao que verificado na Ref. [59]: (i) Regime subcrítico caracterizado por $v \equiv 0$ não exibindo estados ressonantes do hospedeiro; (ii) criticalidade de carga é o ponto de partida de \mathcal{H} , com $v \neq 0$ naturalmente e $\varepsilon_{d\sigma} = U = 0$ representando o regime de simetria partícula buraco sem correlação. Ainda na condição de simetria partícula buraco, a super criticalidade emerge ao enterrar $\varepsilon_{d\sigma} = -\frac{U}{2} \neq 0$ no mar de Fermi. Ele aumenta a carga efetiva do átomo adsorvido em analogia aos íons de cálcio depositados gradualmente na monocamada de grafeno até a localização eletrônica [22,29]. Consequentemente, observamos dois picos localizados exatamente na região de bloqueio de Coulomb $-|\varepsilon_{d\sigma}| < \varepsilon < 0$ e $0 < \varepsilon < |\varepsilon_{d\sigma}|$ como estados semelhantes ao do colapso atômico e de pósitron, respectivamente.

Para obtenção da descrição eletrônica do modelo proposto neste capítulo recorreremos aos formalismos das funções de *Green* e EOM de maneira análoga ao que foi realizado no capítulo anterior.

Capítulo 6

Resultados e discussão

6.1 Topological charge Fano effect in multi-Weyl semi-metals

W. C. Silva, W. N. Mizobata, J. E. Sanches, L. S. Ricco, I. A. Shelykh, M. de Souza, M. S. Figueira, E. Vernek, and A. C. Seridonio, Phys. Rev. B 105, 235135 – Published 24 June 2022.

Uma análise teórica da interferência Fano em um sistema híbrido, composto por um semimetal multi-Weyl com uma impureza única, foi conduzida neste trabalho. Destacamos a manifestação do efeito Fano de carga topológica na densidade local de estados. A determinação do número de arcos de Fermi na fronteira de um sistema de semimetais multi-Weyl está intrinsecamente ligada à carga topológica J , a qual é uma consequência imediata do princípio de correspondência “*bulk-boundary*”. Analogamente, constatamos que a carga topológica (J) também modula o perfil Fano de um sistema com uma impureza incorporada no mesmo. Dessa maneira, à medida que J aumenta, a configuração da linha Fano passa de ressonante, característica de $J = 1$, para antirressonante, estendendo-se aos semimetais denominados hiper-Weyl, nos quais $J \gg 1$. Especialmente para o caso máximo protegido pela simetria rotacional $C_{2J=6}$, denominado por $J = 3$ (Weyl-triplo), que adquire perfil Fano assimétrico, o valor absoluto do parâmetro de Fano é previsto como $\tan(C_{2J=6})$, onde $C_{2J} \equiv (360^\circ/2J)$ define o ângulo de rotação. Portanto, a discretização do parâmetro de Fano no termo J introduz o efeito Fano de carga topológica em semimetais multi-Weyl. Também sugerimos um dispositivo de transporte onde esperamos que o efeito Fano proposto possa ser detectado.

Os resultados apresentados nesta seção foram baseados no modelo e cálculos desenvolvidos no Capítulo 4.

Topological charge Fano effect in multi-Weyl semimetals

W.C. Silva,¹ W.N. Mizobata,¹ J.E. Sanches,¹ L.S. Ricco,² I.A. Shelykh,^{2,3}
M. de Souza,⁴ M.S. Figueira,⁵ E. Vernek,⁶ and A.C. Seridonio^{1,*}

¹*São Paulo State University (Unesp), School of Engineering,*

Department of Physics and Chemistry, 15385-000, Ilha Solteira-SP, Brazil

²*Science Institute, University of Iceland, Dunhagi-3, IS-107, Reykjavik, Iceland*

³*ITMO University, St. Petersburg, 197101, Russia*

⁴*São Paulo State University (Unesp), IGCE, Department of Physics, 13506-970, Rio Claro-SP, Brazil*

⁵*Instituto de Física, Universidade Federal Fluminense, 24210-340, Niterói, Rio de Janeiro, Brazil*

⁶*Instituto de Física, Universidade Federal de Uberlândia, Uberlândia, 38400-902, Minas Gerais, Brazil*

We theoretically analyze the Fano interference in a single impurity multi-Weyl semimetal hybrid system and show the emergence of the topological charge Fano effect in the bulk local density of states. In multi-Weyl semimetals, the number of Fermi arcs at the system boundaries is determined by the topological charge J , a direct consequence of the “bulk-boundary” correspondence principle. Analogously, we find that J also modulates the bulk Fano profile of the system with an embedded quantum impurity. Thus, by increasing J , the Fano lineshape evolves from resonant, typical for $J = 1$ (single Weyl), towards antiresonant, extrapolating to the so-called hyper Weyl semimetals with $J \gg 1$. Specially for the maximum case protected by the rotational symmetry $C_{2J=6}$, namely the $J = 3$ (triple Weyl), which acquires asymmetric Fano profile, the Fano parameter absolute value is predicted to be $\tan(C_{2J=6})$, where $C_{2J} \equiv (360^\circ/2J)$ defines the rotational angle. Hence, the Fano discretization in the J term introduces the topological charge Fano effect in multi-Weyl semimetals. We also suggest a transport device where we expect that the proposed Fano effect could be detected.

I. INTRODUCTION

Multi-Weyl semimetals[1–8] are intriguing generalizations of standard Weyl semimetals[9–19], once they can lead to a plethora of fascinating effects, such as chiral, optical and transport anomalous properties[7–9, 11, 16–18, 20–22]. In multi-Weyl semimetals, the band-structures at the so-called Weyl crossing points, show highly anisotropic dispersion relations, being relativistic exclusively in one momentum direction, while in the other two, a power-law dependence is ruled by the topological charge J [19]. This topological number corresponds to the quantized Berry phase of the Dirac fermions in graphene[23]. As Weyl points appear in pairs with opposite chiralities, they behave as source and drain of an Abelian Berry curvature, thus mimicking (anti)monopoles placed far apart in the reciprocal space. Amazingly, such points are connected to each other via crystal boundaries, in particular, by opened surface states known as Fermi arcs. Notably, these exotic states can be observed by ARPES[1, 2] and turn into the experimental proof of the magnetic monopoles existence in the momenta space.

In multi-Weyl semimetals, the winding number also plays the role of a higher topological charge $J > 1$ [1]. This charge arises from the merging of J single chiral-degenerate Weyl nodes into multi-Weyl points, which are point group symmetry protected up to $J = 3$ [15], namely, by means of the rotational symmetry C_{2J} . In this manner, the “bulk-boundary” correspondence dictates that

for a given J value determined in an infinite bulk system, J pairs of Fermi arcs appear in the corresponding finite version of the setup[10]. Some examples of multi-Weyl materials are HgCr_2Se_4 and SrSi_2 with $J = 2$ (double Weyl)[12, 15, 20, 24], and $\text{A}(\text{MoX})_3$ ($\text{A}=\text{Rb}$ or Tl and $\text{X}=\text{Te}$) with $J = 3$ (triple Weyl)[13].

In this work, we focus on the “bulk-boundary” correspondence for Fermi arcs surface states and the topological charge from the bulk, in order to present the concept of the topological charge Fano effect in multi-Weyl semimetals. To this end, we theoretically explore the bulk Fano interference[25, 26] in the LDOS (*local density of states*) for a single impurity multi-Weyl semimetal hybrid system, as sketched in Fig.1(a). As a matter of fact, the Fano interference arises from the coupling between a discrete energy level and an energy continuum[26]. It has been widely investigated in several platforms, ranging from classical mechanics[27] to topological superconductivity[28, 29]. Coupled harmonic oscillators with a driving force[27], photonic systems[30], Jaynes-Cummings-like cavities[31], electronic quantum transport setups made of Anderson adatoms[32–35], atomically frustrated molecules in Weyl metals[8] and topological superconducting nanowires with quantum dots[29], among others[26], constitute the broad variety of examples where Fano interference manifests itself.

Here, we reveal that the increase of J modifies the bulk Fano profile of a multi-Weyl semimetal with a single impurity, by means of the tuning of Fano asymmetry parameter q_J , from resonant lineshape ($|q_{J=1}| \rightarrow \infty$) towards antiresonant one ($|q_{J \gg 1}| \rightarrow 0$). We highlight that while the former identifies $J = 1$ case (single Weyl) [inset panel of Fig.1(b)], the latter predicts a Fano antiresonant profile characterized by $J \gg 1$. For such a

* corresponding author: antonio.seridonio@unesp.br

case, we relax, as we shall clarify later on, the aforementioned crystalline protection[15] and make explicit that the fingerprint for this situation, which we introduce as the hyper Weyl semimetal, is represented by a suppressed Fano parameter ($|q_J \gg 1| \rightarrow 0$) [inset panel of Fig.1(d)].

We clarify that hyper Weyl semimetals should be understood as a conjecture, being a hypothetical case corresponding to a huge topological charge. However, some research groups have reported spinless platforms with $J = 4$ [36, 37], pointing out that it is still capital to consider a generalized description. Noteworthy, for $J \geq 3$, the Fano parameter becomes finite, discretized in J and shows a decaying behavior. Particularly for the maximum allowed case by the point symmetry group protection, i.e., the $J = 3$ value for the $C_{2J=6}$ rotational symmetry group, we predict $|q_{J=3}| = \tan(C_{2J=6})$, with the rotational angle $C_{2J} \equiv (360^\circ/2J)$ and an asymmetric Fano lineshape [inset panel of Fig.1(c)]. Thereby, our findings introduce the idea of the topological charge Fano effect in multi-Weyl semimetals.

II. THE MODEL

The Hamiltonian mimicking our system [Fig.1(a)], with $\hbar = 1$, reads

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_{\text{Weyl}} + \mathcal{H}_{\text{Imp.}} + \mathcal{H}_{\text{Hyb.}}, \quad (1)$$

where

$$\mathcal{H}_{\text{Weyl}} = \sum_{\mathbf{k}s} \psi_{\mathbf{k}s}^\dagger s [D(\tilde{k}_-^J \sigma_+ + \tilde{k}_+^J \sigma_-) + v_F(k_z - sQ)\sigma_z] \psi_{\mathbf{k}s} \quad (2)$$

is the part describing multi-Weyl fermions with spinor $\psi_{\mathbf{k}s}^\dagger = (c_{\mathbf{k}s\uparrow}^\dagger, c_{\mathbf{k}s\downarrow}^\dagger)$, $c_{\mathbf{k}s\sigma}^\dagger$ ($c_{\mathbf{k}s\sigma}$) for creation (annihilation) of an electron carrying winding number J , momentum \mathbf{k} , spin $\sigma = \uparrow, \downarrow$ and chirality $s = \pm 1$ for the Weyl nodes sQ , which break time-reversal symmetry. The nonrelativistic part is expressed in terms of $\tilde{k}_\pm = (k_x \pm ik_y)/k_D$, being $k_D = D/v_F$ (D) the *Debye-like* momentum (energy) cut-off as in graphene system[38], $\sigma_\pm = \frac{1}{2}(\sigma_x \pm i\sigma_y)$ and σ_z are the Pauli matrices. We stress that the winding number J , namely the topological charge, gives the number of Fermi arcs pairs at the system boundaries, as ensured by the ‘‘bulk-boundary’’ correspondence principle[10]. In the last term of Eq.(2), which is of relativistic-type, the slope of the Dirac cones in the z -direction of the momentum space is the Fermi velocity v_F .

The band-structure of Eq.(2) can be computed straightforwardly and leads to the following dispersion relation

$$\varepsilon_{\mathbf{k}s}^\pm = \pm v_F \sqrt{k_{zs}^2 + |\tilde{k}_+|^{2J} k_D^2}, \quad (3)$$

wherein $+(-)$ corresponds to the conduction (valence) band, with $k_{zs} = k_z - sQ$ and it is depicted in Figs.1(b)-(d). Additionally, it is worth mentioning that for $J = 1$

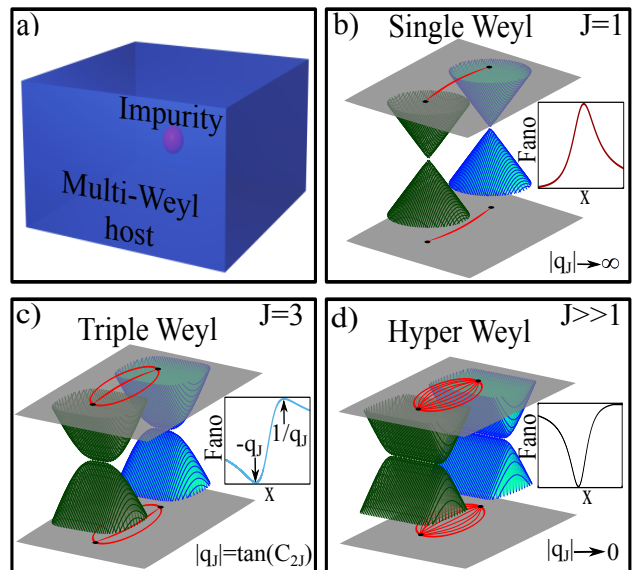


Figure 1. (Color online) Overview of the topological charge Fano effect in multi-Weyl semimetals: (a) Slab of a bulk multi-Weyl semimetal system hosting an impurity. (b)-(d) Qualitative summary of our findings: corresponding band-structures from Eq.(3) with $k_y = 0$, $Q = 0.4k_D$ and Fermi arcs surface states upon changing the topological charge J . Related bulk Fano profiles versus the dimensionless resonant energy detuning x of the impurity appear depicted at the inset panels. The Fano profile evolves from resonant behavior [panel (b)] to the antiresonant-type [panel (d)] as J increases. The pairs of Fermi arcs are determined by the J value, which imposes the bulk Fano lineshape. This profile is determined by the absolute value of the Fano asymmetry parameter $|q_J| = \tan(C_{2J})$ [panel (c)], where $C_{2J} \equiv (360^\circ/2J)$ stands for the angle of the rotational symmetry group. In summary, the ‘‘bulk-boundary’’ correspondence[10] defines the grounds of the topological charge Fano effect in multi-Weyl systems.

(single Weyl) the Weyl semimetal has well-defined Dirac cones in all momentum directions [Fig.1(b)], while for $J \gg 1$ we have a hypothetical hyper Weyl semimetal case [Fig.1(d)], in which its band-structure shape saturates due to a huge topological charge. Further, a single Anderson-like impurity[32] can be described by the Hamiltonian

$$\mathcal{H}_{\text{Imp.}} = -\frac{U}{2} + \sum_{\sigma} (\varepsilon_{d\sigma} + \frac{U}{2}) n_{d\sigma} + \frac{U}{2} (\sum_{\sigma} n_{d\sigma} - 1)^2, \quad (4)$$

where the impurity electronic energy level is $\varepsilon_{d\sigma}$, with number operator $n_{d\sigma} = (n_{d\sigma})^2 = d_{\sigma}^\dagger d_{\sigma}$, being d_{σ}^\dagger (d_{σ}) the corresponding creation (annihilation) operator and U is the Coulomb repulsion between two electrons with opposite spins ($\bar{\sigma} = -\sigma$). The hybridization term, which accounts for the host-impurity coupling, reads

$$\mathcal{H}_{\text{Hyb.}} = v \sum_{\sigma} (f_{0\sigma}^{\dagger} d_{\sigma} + \text{H.c.}), \quad (5)$$

where the field operator

$$f_{0\sigma} = \frac{1}{\sqrt{\mathcal{N}}} \sum_{\mathbf{k}s} c_{\mathbf{k}s\sigma} \quad (6)$$

describes the host site locally coupled to an embedded quantum impurity, with v being the impurity-host coupling strength and \mathcal{N} the number of states delimited by k_D .

We would like to call attention to the following: by making the choice $\varepsilon_{d\sigma} = -\frac{U}{2}$, the second term of Eq.(4) disappears and the Hamiltonian \mathcal{H} becomes invariant under the particle-hole transformation $c_{\mathbf{k}s\sigma} \rightarrow c_{-\mathbf{k}s\sigma}^{\dagger}$ and $d_{\sigma} \rightarrow -d_{\sigma}^{\dagger}$. This characterizes the particle-hole symmetric regime of the model, which will be employed without loss of generality, in order to determine the system bulk LDOS. Consequently, the LDOS profile exhibits mirror symmetry in the energy domain ε and the bulk Fano profile can be finally known.

III. LDOS AND FANO PROFILE

From the time Fourier transform of the retarded Green's function (GF)

$$\mathcal{G}_{\sigma} = -i\theta(t) \left\langle \left\{ f_{0\sigma}(t), f_{0\sigma}^{\dagger}(0) \right\} \right\rangle_{\mathcal{H}}, \quad (7)$$

i.e. $\tilde{\mathcal{G}}_{\sigma}$, we verify the validity of the Dyson equation

$$\tilde{\mathcal{G}}_{\sigma} = \tilde{\mathcal{G}}_{\sigma}^0 + \tilde{\mathcal{G}}_{\sigma}^0 v \tilde{\mathcal{G}}_{\text{Imp.}\sigma} v \tilde{\mathcal{G}}_{\sigma}^0 \quad (8)$$

via the equation-of-motion approach[39], with \mathcal{G}_{σ}^0 and

$$\mathcal{G}_{\text{Imp.}\sigma} = -i\theta(t) \left\langle \left\{ d_{\sigma}(t), d_{\sigma}^{\dagger}(0) \right\} \right\rangle_{\mathcal{H}} \quad (9)$$

representing the pristine multi-Weyl and impurity GFs, respectively. Thus, the Fano formula[25, 26] in the bulk

$$\text{LDOS} = -\frac{1}{\pi} \text{Im} \tilde{\mathcal{G}}_{\sigma} \quad (10)$$

is expected to emerge, if in the impurity

$$\text{DOS} = -\frac{1}{\pi} \text{Im} \tilde{\mathcal{G}}_{\text{Imp.}\sigma}, \quad (11)$$

their resonant states[39] exhibit a lorentzian profile.

As we consider the case of $T \ll T_K \rightarrow 0$ (Kondo temperature)[40] and the system has a pseudogap at

the Fermi level, Kondo correlations do not emerge[14] and consequently, the Coulomb blockade regime[39] takes place. The latter is characterized solely by the resonant states $\varepsilon_{d\sigma}$ and $\varepsilon_{d\sigma} + U$, and the correlation U in $\tilde{\mathcal{G}}_{\text{Imp.}\sigma}$, can be safely treated in the framework of the Hubbard-I approximation[7, 8, 39]. The Hubbard-I approximation is indeed, a mean-field calculation, i.e., a truncation scheme on the system GFs, which determines the impurity GF $\tilde{\mathcal{G}}_{\text{Imp.}\sigma}$, in particular, by accounting for the electronic correlation U in Eq.(4) within a certain regime of validity. We stress that the presence of the Hubbard term U in Eq.(4), which shows a quadratic dependence on the number operator $n_{d\sigma}$, prevents inevitably, the analytical and exact evaluation of $\tilde{\mathcal{G}}_{\text{Imp.}\sigma}$. This lack of completeness, naturally, does not catch the complete low-energy regime of the single impurity Anderson model[32]. More specifically, the one characterized by $T \ll T_K$, $\varepsilon_{d\sigma} < 0$, $\varepsilon_{d\sigma} + U > 0$ and, as a result, the Kondo peak present in Eq.(11). We call the attention that such a resonance is a many-body effect, which is due to a spin-flip process between the electrons from the impurity and the host conduction states.

It is worth mentioning that one of us in Ref.[14] has demonstrated, by employing the Numerical Renormalization Group[14], that the Kondo peak emerges solely in multi-Weyl semimetals when the Fermi level is off resonance from the Dirac point, i.e., the so-called charge neutrality point $\varepsilon = 0$. By approaching this spot, the multi-Weyl semimetal presents a pseudogap, as we will verify later on, that scales with the power-law $(\varepsilon^2)^{1/J}$ in the topological charge J for the pristine host density of states. It means that at the charge neutrality point, the host does not contain states to screen in an anti-ferromagnetic way the localized magnetic moment at the impurity site and lead to the Kondo peak in the impurity density of states of Eq.(11). Thus, the spin-flip process quenches and even with $T \ll T_K \rightarrow 0$, for multi-Weyl semimetals, the Kondo peak does not rise at $\varepsilon = 0$. This scenario is fully distinct from a metallic system, once at the corresponding charge neutrality point, the pristine host density of states is finite. As the Hubbard-I method disregards such a spin-flip mechanism to obtain the impurity GF $\tilde{\mathcal{G}}_{\text{Imp.}\sigma}$, then we can safely adopt it to our system, only if we maintain the Fermi level at $\varepsilon = 0$, where for multi-Weyl semimetals the absence of states is ensured. By taking into account such an assumption, we employ the well-established GF in the Hubbard-I approximation as follows:

$$\tilde{\mathcal{G}}_{\text{Imp.}\sigma} = -\frac{1}{v^2 \text{Im} \tilde{\mathcal{G}}_{\sigma}^0} \left(\frac{w_x}{x+i} + \frac{w_{\bar{x}}}{\bar{x}+i} \right). \quad (12)$$

This ensures, as expected, the lorentzian lineshape in the DOS, with $w_x = 1 - \langle n_{d\sigma} \rangle$ and $w_{\bar{x}} = 1 - w_x$ being spectral weights for the dimensionless resonant energies detuning

$$x = \frac{\varepsilon - \varepsilon_{d\sigma} - v^2 \text{Re} \tilde{\mathcal{G}}_{\sigma}^0}{-v^2 \text{Im} \tilde{\mathcal{G}}_{\sigma}^0} \quad (13)$$

and

$$\bar{x} = \frac{\varepsilon - \varepsilon_{d\sigma} - U - v^2 \text{Re}\tilde{\mathcal{G}}_\sigma^0}{-v^2 \text{Im}\tilde{\mathcal{G}}_\sigma^0}, \quad (14)$$

respectively, wherein

$$\langle n_{d\sigma} \rangle = \int_{-D}^0 \text{DOS} d\varepsilon \quad (15)$$

is the impurity occupation. The pristine host GF, or simply the propagator of the pristine Weyl fermions, is just

$$\begin{aligned} \tilde{\mathcal{G}}_\sigma^0 &= \frac{1}{\mathcal{N}} \sum_{\mathbf{k}_s} \frac{\varepsilon + i0^+}{(\varepsilon + i0^+)^2 + (\varepsilon_{\mathbf{k}_s}^+)^2} = \text{Re}\tilde{\mathcal{G}}_\sigma^0 + i\text{Im}\tilde{\mathcal{G}}_\sigma^0 \\ &= |\tilde{\mathcal{G}}_\sigma^0| \exp(i\delta_J), \end{aligned} \quad (16)$$

where δ_J represents the phase of the propagator, in particular in the absence of the impurity, which is expected to depend upon the topological charge J via the dispersion relation $\varepsilon_{\mathbf{k}_s}^+$ of Eq.(3). It reads

$$\tan \delta_J = \frac{\text{Im}\tilde{\mathcal{G}}_\sigma^0}{\text{Re}\tilde{\mathcal{G}}_\sigma^0}. \quad (17)$$

This quantity, as we will see later on, is deeply connected to the Fano asymmetry parameter q_J of the system, responsible for modulating the bulk Fano profile for the LDOS. Particularly for a multi-Weyl semimetal with $J \geq 3$, in addition, we will show that q_J becomes ruled by the angle $(360^\circ/2J)$, which surprisingly, is recognized as the angle of the rotational symmetry group C_{2J} . As we know, such a symmetry group stabilizes locally multi-Weyl points in the momentum space[15].

Now we are able to express the LDOS according to Fano formula[25, 26]. We begin by introducing into Eq.(8), the quantities as follows:

$$\begin{aligned} \text{Re}\tilde{\mathcal{G}}_\sigma^0 &= -\frac{1}{\pi} \int_{-D}^{+D} \frac{\text{Im}\tilde{\mathcal{G}}_\sigma^0}{\varepsilon - y} dy \\ &= -\frac{1}{\pi} \text{sgn}(\varepsilon) \text{Im}\tilde{\mathcal{G}}_\sigma^0 \int_{-D/\varepsilon}^{+D/\varepsilon} \frac{(u^2)^{1/J}}{1-u} du \\ &= -q_J \text{Im}\tilde{\mathcal{G}}_\sigma^0, \end{aligned} \quad (18)$$

due to the Kramers-Kronig relations[39], wherein $y = u\varepsilon$ and the Fano asymmetry parameter is given by

$$\begin{aligned} q_J &= -\frac{\text{Re}\tilde{\mathcal{G}}_\sigma^0}{\text{Im}\tilde{\mathcal{G}}_\sigma^0} = -\cot \delta_J, \\ &= \frac{1}{\pi} \text{sgn}(\varepsilon) \text{P.V.} \int_{-D/\varepsilon}^{+D/\varepsilon} \frac{(u^2)^{1/J}}{1-u} du, \end{aligned} \quad (19)$$

where P.V. stands for the Cauchy principal value and we clearly see that the phase δ_J of Eq.(17) for the pristine Weyl fermions propagator of Eq.(16) then dictates the Fano asymmetry parameter. Moreover,

$$\text{Im}\tilde{\mathcal{G}}_\sigma^0 = -\frac{3\pi^{3/2}\Gamma(\frac{1}{J})}{2JD^{\frac{J+2}{J}}\Gamma(\frac{2+J}{2J})}(\varepsilon^2)^{1/J}, \quad (20)$$

with $\Gamma(x)$ being the Gamma function and the power-law $(\varepsilon^2)^{1/J}$ is characterized by a pseudogap at the Fermi level ($\varepsilon = 0$).

We emphasize that Eq.(20) holds for arbitrary J and mention that so far, solely analytical expressions up to $J = 3$ were obtained[19]. We are aware that the crystalline rotational symmetry C_{2J} imposes the limitation $J \leq 3$, in particular when the spin degree of freedom comes into play[15]. However, the $J = 4$ case is still possible and emerges in spinless systems[36, 37]. Thus, we develop an extrapolation given by Eq.(20) and get a generalized Fano asymmetry parameter.

The aforementioned accomplishment was possible after employing in Eq.(16) the procedures as follows: (i) the standard substitution $\mathcal{N} = \sum_{\mathbf{k}_s} \rightarrow \frac{\Omega}{(2\pi)^3} \int d^3\mathbf{k} = \frac{\Omega}{6\pi^2} k_D^3$, with Ω as the volume element in real space; (ii) the hyper-spherical transformation given by $k_x = k_D(\frac{\varepsilon_{\mathbf{k}_s}^+ \sin \theta}{D})^{\frac{1}{J}} \cos \phi$, $k_y = k_D(\frac{\varepsilon_{\mathbf{k}_s}^+ \sin \theta}{D})^{\frac{1}{J}} \sin \phi$ and $k_{zs} = k_D \frac{\varepsilon_{\mathbf{k}_s}^+}{D} \cos \theta$ ($0 \leq \theta \leq \pi$, $0 \leq \phi \leq 2\pi$), with Jacobian

$$J(\varepsilon_{\mathbf{k}_s}^+, \theta, \phi) = \frac{k_D^3}{D} (\frac{\varepsilon_{\mathbf{k}_s}^+}{D})^{2/J} \frac{(\sin \theta)^{\frac{2}{J}-1}}{J} \quad (21)$$

and property $\int \tilde{\mathcal{G}}_\sigma^0 d^3\mathbf{k} = \int \tilde{\mathcal{G}}_\sigma^0 J(\varepsilon_{\mathbf{k}_s}^+, \theta, \phi) d\varepsilon_{\mathbf{k}_s}^+ d\theta d\phi$.

We can finally obtain the bulk Fano profile, which from here, we call by natural Fano profile (NFP), once it is expressed in terms of their natural coordinates x and \bar{x} . Taking into account the spin degree of freedom, we find the NFP=2LDOS/ $\rho_0(1+q_J^2)$, with

$$\rho_0 = -\frac{1}{\pi} \text{Im}\tilde{\mathcal{G}}_\sigma^0 \quad (22)$$

as the pristine multi-Weyl DOS and

$$\text{NFP} = \frac{2}{1+q_J^2} \left[w_x \frac{(x+q_J)^2}{x^2+1} + w_{\bar{x}} \frac{(\bar{x}+q_J)^2}{\bar{x}^2+1} \right], \quad (23)$$

which holds in the wide-band limit $D/\varepsilon \rightarrow \infty$. As we are interested in impurity levels nearby the Fermi energy, such a limit prevents that the time-reversal symmetry breaking lifts the system spin degeneracy[14]. From Eq.(23) and for $\varepsilon < 0$ ($\varepsilon > 0$), the NFP shows amplitudes of minimum and maximum at $x = -q_J$ ($\bar{x} = -q_J$) and $x = 1/q_J$ ($\bar{x} = 1/q_J$), respectively.

We highlight that the LDOS spectral lineshape itself, as we shall see in the numerical analysis, will not exhibit a Fano profile as a function of energy ε for a given q_J ,

as it occurs for flat band systems with energy and J independent host DOS[33–35]. Additionally, we will verify that for the revealing of such a behavior, one should analyze the Fano profile as a function of x or \bar{x} , namely, the natural coordinates for the Fano profile to emerge. Nevertheless, before that, we should firstly evaluate carefully the integral over u variable in Eq.(19).

We call attention that, in particular for $q_{J=1}$ and $q_{J=2}$, the functions depending on u do not vanish in the limits $u \rightarrow \pm\infty$, which is a common pathology in low-energy models[38]. This feature constitutes a technical difficulty in solving Eq.(19) numerically. Hence, to handle accordingly with this lack of integrability issue, we should, as already performed in graphene system[38], solve first the integral analytically by keeping the ratio D/ε finite and assuming later on, the limit $\varepsilon/D \ll 1$ in the $\text{Re}\tilde{\mathcal{G}}_\sigma^0$ evaluations. Such cases are then described by

$$\text{Re}\tilde{\mathcal{G}}_\sigma^0(J=1) = \frac{3\varepsilon}{D^3}(\varepsilon \ln \frac{|D+\varepsilon|}{|D-\varepsilon|} - 2D) \quad (24)$$

and

$$\text{Re}\tilde{\mathcal{G}}_\sigma^0(J=2) = \frac{3\pi}{4D^2}\varepsilon \ln \frac{\varepsilon^2}{|\varepsilon^2 - D^2|}, \quad (25)$$

respectively, which provide

$$q_{J \leq 2} = -\frac{\text{Re}\tilde{\mathcal{G}}_\sigma^0(J \leq 2)}{\text{Im}\tilde{\mathcal{G}}_\sigma^0(J \leq 2)} = -\cot \delta_{J \leq 2} \quad (26)$$

as dependent both on energy for $\varepsilon/D \ll 1$ and topological charge J .

However, the necessary vanishing behavior is present in $q_{J \geq 3}$ as a function of u and consequently, it makes the integral in Eq.(19) to behave finite for $D/\varepsilon \rightarrow \infty$, which can be found analytically simultaneously with the ratio $D/\varepsilon \rightarrow \infty$. This results into an interesting finding, i.e., an energy-independent Fano asymmetry parameter discretized in the topological charge J , which reads

$$q_{J \geq 3} = -\text{sgn}(\varepsilon) \tan(C_{2J \geq 6}), \quad (27)$$

where we define $C_{2J} \equiv (360^\circ/2J)$ as the angle for the corresponding rotational symmetry group. Together with Eqs.(24), (25) and (26), this gives the set of analytical expressions that defines the topological charge Fano effect in multi-Weyl systems. Notice that for $J=3$, $q_{J=3} = -\text{sgn}(\varepsilon) \tan(C_{2J=6}) = -\text{sgn}(\varepsilon)\sqrt{3}$, while for $J \gg 1$ we have $|q_{J \gg 1}| \rightarrow 0$, which corresponds to the maximum allowed point group symmetry protected case, namely, the $C_{2J=6}$ rotational symmetry group, and the hypothetical hyper Weyl semimetal, respectively.

We emphasize that for $J \leq 3$ such a crystalline symmetry, hereby expressed in Eq.(27) via the C_{2J} parameter, then stabilizes the merge of chiral-degenerate Weyl points with $J=1$ each and leads to a unique point enclosing a multi-topological charge $J > 1$. This spot in momentum space is the so-called multi-Weyl point, where the

mentioned symmetry glues together multiple Weyl points with unitary topological charge and prevent them to split away.

Thus, we can point out that the Fano parameter role in the accounted picture is self-contained in Eq.(27) and arises from Eq.(17), which authorizes the link $q_{J \geq 3} = -\cot \delta_{J \geq 3} = -\text{sgn}(\varepsilon) \tan(C_{2J \geq 6})$, from where we perceive that the NFP of Eq.(23) becomes settled by the topological charge J . As for $J \geq 3$ the phase $\delta_{J \geq 3}$ of the Weyl fermions in the propagator of Eq.(16) depends on the dispersion relation $\varepsilon_{\mathbf{k}_s}^+$ of Eq.(3), it yields the Fano asymmetry parameter $q_{J \geq 3}$ to be ruled by the angle $(360^\circ/2J)$, which is related to the rotational symmetry group $C_{2J \geq 6}$. Distinctly, for $J \leq 2$ the dispersion relation $\varepsilon_{\mathbf{k}_s}^+$ introduces in $q_{J \leq 2}$ of Eq.(26) complex dependencies on the topological charge J , in particular obeying Eqs.(24) and (25), which affect peculiarly the NFP of Eq.(23).

As aftermath, independently of the J strength, the broadening of the impurity levels [Eq.(12)] and the LDOS change into a Fano-type profile in the natural coordinates [Eq.(23)], are expected to occur in both the scenarios. In summary, the system exhibits two paths of transport that interfere to each other: one consists of electrons that travel through the orbital $f_{0\sigma}$ of the host and that wherein they visit the impurity d_σ and return to $f_{0\sigma}$, being a process modulated by q_J .

IV. RESULTS AND DISCUSSION

A. Natural Fano profile and discretized Fano parameter

As stated previously, we consider the particle-hole symmetric regime. In this case, $\varepsilon_{d\sigma} = -\frac{U}{2}$ and $w_x = w_{\bar{x}} = 1/2$ ($\langle n_{d\bar{\sigma}} \rangle = 1/2$ from self-consistent calculations), with $U = v = 0.14D$. Taking into account Eq.(23), in Fig.2, we present the spectral analysis of the bulk LDOS = $\rho_0 \frac{(1+q_J^2)}{2}$ NFP as a function of ε and the first part of the NFP versus x for several J values. As the dimensionless resonant energy detuning x is proportional to the deviation from the resonant state $\varepsilon_{d\sigma} = -\frac{U}{2}$ within the valence band, its domain holds for $\varepsilon < 0$. Thus, the second part of Eq.(23) as a function of \bar{x} exhibits a reversed profile, once $\bar{x} = -x$ in the domain $\varepsilon > 0$ (conduction band), where the resonant state $\varepsilon_{d\sigma} + U = \frac{U}{2}$ resides and $\text{Re}\tilde{\mathcal{G}}_\sigma^0(\varepsilon > 0) = -\text{Re}\tilde{\mathcal{G}}_\sigma^0(\varepsilon < 0)$ fulfills particle-hole symmetry[14]. Hence, the dependence of Eq.(23) on \bar{x} is not shown, for a sake of simplicity.

Counterintuitively, the LDOS in Fig.2(a) does not show Fano profiles around the resonant states as a function of ε upon changing J , as it should occur, despite the Fano parameters being dictated by Eqs.(26) and (27). Such a feature arises from the topological charge J and energy ε dependencies present in the resonant states broadening $\Delta = -2v^2 \text{Im}\tilde{\mathcal{G}}_\sigma^0 = 2\pi v^2 \rho_0$ and quasi-

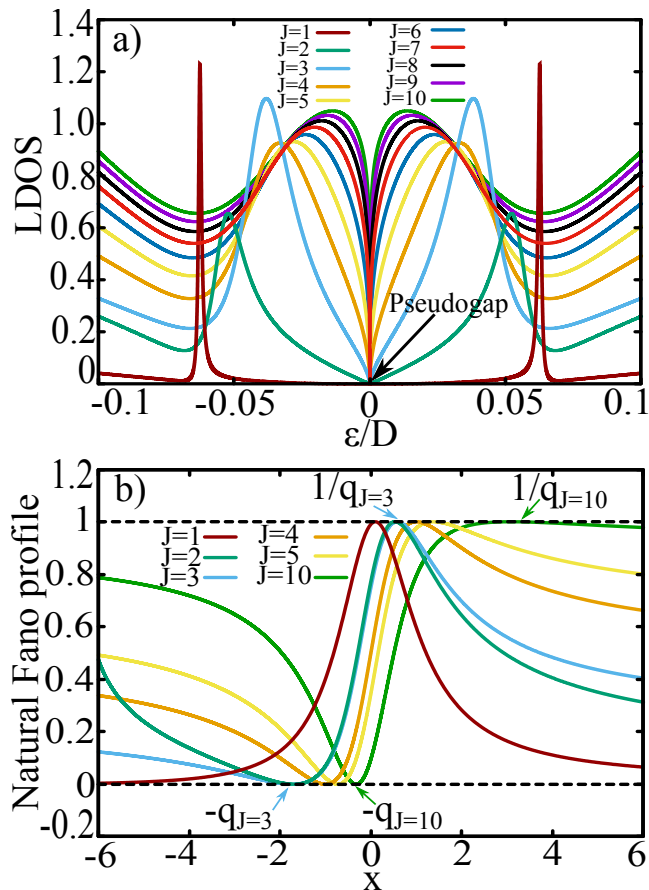


Figure 2. (Color online) (a) LDOS $= \rho_0 \frac{(1+q_J^2)}{2}$ NFP [Eq.(23)] versus energy ε in units of the cutoff D for several J values and particle-hole symmetric regime: $\varepsilon_{d\sigma} = -\frac{U}{2}$ and $w_x = w_{\bar{x}} = 1/2$, with $U = v = 0.14D$ (see the main text). The increase of J turns the pseudogap flanked by the impurity resonant states more pronounced with a sharp dip. (b) Natural Fano profile NFP [first part of Eq.(23)] versus x and dependent on J for $\varepsilon < 0$. In the case of $\varepsilon > 0$, the profile is just reversed as a function of \bar{x} and it is not shown, for a sake of simplicity. We clearly verify that J modulates the Natural Fano profile.

particle dressing term $v^2 \text{Re}\tilde{\mathcal{G}}_\sigma^0$ of the impurity. These quantities, in particular, appear in the resonant energies detuning $x = 2(\varepsilon - \varepsilon_{d\sigma} - v^2 \text{Re}\tilde{\mathcal{G}}_\sigma^0)/\Delta$ and $\bar{x} = 2(\varepsilon - \varepsilon_{d\sigma} - U - v^2 \text{Re}\tilde{\mathcal{G}}_\sigma^0)/\Delta$ entering into Eq.(23). From the latter, we perceive that x and \bar{x} are not linearly proportional to ε . This characteristic is restored when Δ and $v^2 \text{Re}\tilde{\mathcal{G}}_\sigma^0$ become energy and J independent, as verified in metallic flat bands near the Fermi level[33–35]. Consequently, solely in this particular situation, the LDOS profile as a function of ε shows Fano lineshapes.

Therefore, in the case of multi-Weyl semimetals, one should analyze $2\text{LDOS}/\rho_0(1+q_J^2)$, namely, the NFP given by Eq.(23), as a function of the natural coordinate x or \bar{x} instead of ε , to indeed perceive the emerging NFP around $x = 0$ or $\bar{x} = 0$. Such analysis appears in Fig.2(b), where we verify that the increase of J drives the system

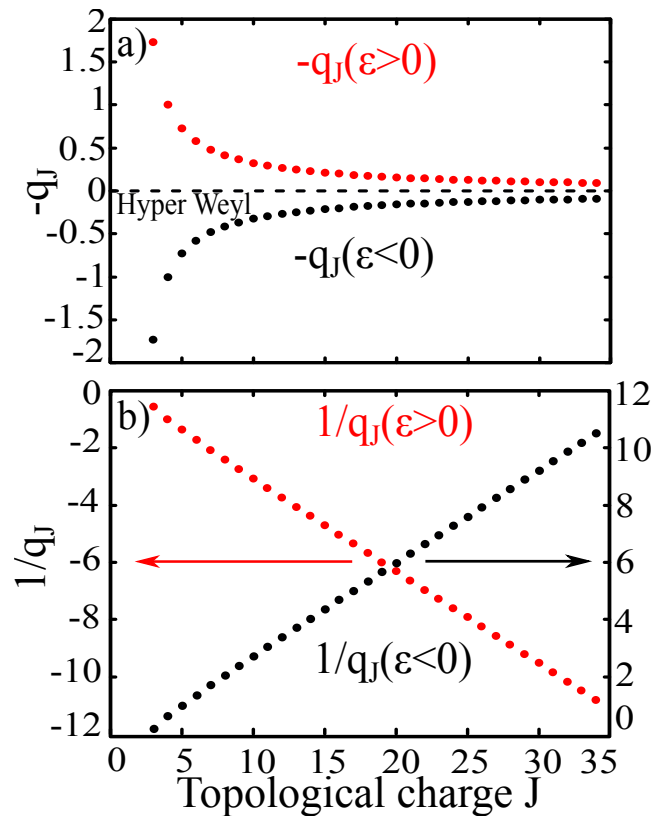


Figure 3. (Color online) (a) Minimum amplitude position $-q_J$ of the Fano profile from Eq.(27) [see also Figs. 1(c) and 2(b)] with decaying behavior as a function of $J \geq 3$ for energies $\varepsilon > 0$ and $\varepsilon < 0$. (b) The same for the maximum amplitude position $1/q_J$, but with a linear dependence on J . Panels (a) and (b) make explicit that the Fano asymmetry parameter q_J given by Eq.(27) consists of a discretized quantity in the J term, yielding the topological charge Fano effect.

from the resonant Fano profile for the case of single Weyl semimetal $J = 1$, towards the hyper Weyl semimetal with $J \gg 1$, which is identified by an antiresonant lineshape. Further, the Fano minimum and maximum amplitudes positions for $\varepsilon < 0$ given by $x = -q_J$ and $x = 1/q_J$, respectively, then appear in such a figure marked by arrows, just in order to make explicit the discretized Fano parameter in J . However, in Fig.2(a) for the LDOS representation as a function of ε , the role of J solely lies in the renormalization of the resonant states towards the Fermi level as J increases, pointing out that the semimetallic pseudogap becomes characterized by an extremely sharp dip, due to its spectral power-law $(\varepsilon^2)^{1/J}$ in Eq.(20).

It is worth noting that the discretization observed in Fig.2(b) arises from Eq. (27), which together with Eqs.(24), (25) and (26) are the most capital ones of the current work: they encode the topological charge Fano effect in multi-Weyl systems, once they allow the tuning of the Fano lineshape by changing the topological charge J . Equivalently, according to the “bulk-boundary” correspondence, the pairs of Fermi arcs surface states present

at the system boundaries are fixed by the J value[10], which also imposes the Fano profile lineshape of the bulk.

With this in mind, we see from Fig.3(a) that for $\varepsilon < 0$ the limits $-q_{J \rightarrow 3} \rightarrow -\tan(C_{2J=6}) = -\sqrt{3}$ and $-q_{J \gg 1} \rightarrow 0$ are reached, while for $\varepsilon > 0$ we have $-q_{J \rightarrow 3} \rightarrow \tan(C_{2J=6}) = \sqrt{3}$ and $-q_{J \gg 1} \rightarrow 0$. Interestingly enough for $J = 3$, $|q_{J=3}| = \tan(C_{2J=6}) = \sqrt{3} \approx 1,732$ and the Fano profile, according to Fig.2(b), rises as asymmetric. Particularly for the $-q_J$ decaying behavior with J reported in Fig.3(a), we highlight that such a feature is connected straightforwardly to the system band-structure. As stated previously, the band-structure saturates into one characteristic for the hyper Weyl semimetal-type with $J \gg 1$, as depicted in Fig.1(d). As an aftermath, if the shape generated by the dispersion $\varepsilon_{\mathbf{k}_s}^\pm$ from Eq.(3) remains unchanged by increasing $J \gg 1$ [Fig.1(d)], so does the Fano parameter, which attains to $|q_{J \gg 1}| \rightarrow 0$, once it depends on $\varepsilon_{\mathbf{k}_s}^+$ via the GF \tilde{G}_σ^0 of the pristine host. As a result, the antiresonant Fano profile becomes the hallmark of hyper Weyl semimetals.

In Fig.3(b), we show the corresponding behavior for $1/q_J$, which is linear instead. Note that $1/q_J$ for $\varepsilon < 0$ follows an increasing linear trend, while for $\varepsilon > 0$ it is the opposite. This reflects the own particle-hole symmetry characteristic of the Fano parameter and it occurs because the multi-Weyl points and Fermi level are energy-degenerate. Thereby, the band-structure also has particle-hole symmetry, as well as the $1/q_J$ quantity. Most importantly, both the $-q_J$ and $1/q_J$ behaviors as functions of J make explicit that the Fano parameter is discretized, thus characterizing the topological charge Fano effect in multi-Weyl semimetals.

B. Experimental proposal to detect the topological charge Fano effect

From the spectral analysis performed so far, we perceive that the NFP of Eq.(23) requires natural coordinates to be viewed, such as x and \bar{x} from Eqs.(13) and (14), respectively. This characteristic relies in the fact that both the latter expressions are highly non-linear functions in the ε degree, which turns the detection of the Fano profiles encoded by Eq.(23) a hard challenge by varying ε . However, we propose an alternative path to overcome such an experimental obstacle. We begin with by noticing that if we consider the impurity level $\varepsilon_{d\sigma} = \varepsilon_d$ in Eq.(4) a tunable parameter, while ε , $\text{Re}\tilde{G}_\sigma^0$ and $\text{Im}\tilde{G}_\sigma^0$ as constant numbers, we finally gain the desired linear dependence of x and \bar{x} , not with ε , but with ε_d instead. Thus, Eq.(23) as a function of ε_d is expected to show Fano profiles, once ε_d rises as the natural coordinate for the emanation of the Fano profile. The tunability of ε_d to become feasible from an experimental perspective needs a remake of Fig.1(a) into the transport-type device of Fig.4(a), which we introduce as the multi-Weyl bar.

The multi-Weyl bar consists of a quasilinear bulk system with an external impurity, where this side-coupled

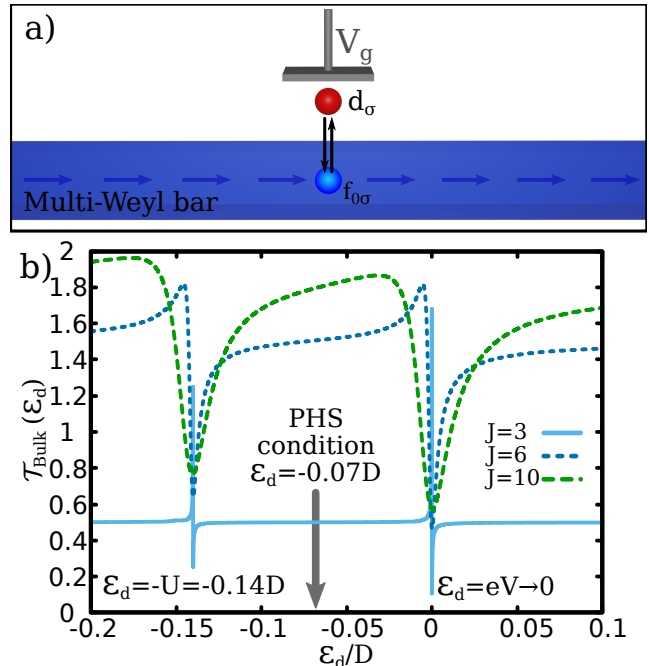


Figure 4. (Color online) (a) Sketch of the multi-Weyl bar device, where an impurity appears side-coupled. The arrows denote the current direction from the source to drain leads (not depicted). This system consists of an experimental proposal for detecting the topological charge Fano effect. (b) The bulk transmittance $\mathcal{T}_{\text{Bulk}}(\varepsilon_d) = \text{NFP}$ versus ε_d for several J values is determined via Eq.(23), with $\varepsilon = eV \rightarrow 0$ as a small bias-voltage. The ε_d degree is tunable by a gate voltage V_g attached to the impurity, thus leading to a transmittance with Fano profiles nearby the energies $\varepsilon_d = -U$ and $\varepsilon_d = eV$. Around them, we can apply Eq.(23) to experimental data, extract the Fano asymmetry parameter q_J and estimate via Eq.(27) the topological charge J . The middle point between such energy positions corresponds to the particle-hole symmetry (PHS), wherein the condition $\varepsilon_d = -\frac{U}{2}$ is fulfilled.

impurity is supposed to overlap with both the surface and bulk states of the system. A similar approach was done to the electron channel treated in the quantum wire theoretically explored in Ref.[41]. In such a work, one of us derived a transmittance formula of an impurity side-coupled to the electron channel and found Fano profiles in the zero-bias conductance by tuning ε_d , due to the assumption of a gate voltage V_g attached to this impurity. It was found that the conductance reflects the system bulk properties via the transmittance coefficient, hereby with the shorthand notation $\mathcal{T}_{\text{Bulk}}(\varepsilon_d) = \frac{\mathcal{G}}{\mathcal{G}_0}$, where \mathcal{G} is the zero-bias conductance at $T \ll T_K \rightarrow 0$ and $\mathcal{G}_0 = \frac{e^2}{h}$ stands for the conductance quantum. The bulk properties come up, once $\mathcal{T}_{\text{Bulk}}(\varepsilon_d)$ depends upon the spectral density of the host site described by the fermionic operator connected to the impurity. Thus, in our system, this corresponds to Eq.(6) for $f_{0\sigma}$ and consequently, it allows, together with Eq.(23) for the NFP and the quan-

tum transport formalism developed in Ref.[41], to derive the equality $\mathcal{T}_{\text{Bulk}}(\varepsilon_d) = \text{NFP}$. As the NFP is bounded by 2, this upper limit represents the maximum of the transmittance by accounting for the two spin channels.

However, we should adapt carefully the transport formalism done in Ref.[41] for a quantum wire to multi-Weyl semimetals in the geometry of the bar depicted in Fig.4(a). First, multi-Weyl semimetals have pseudogap [Eq.(20)] and it does not make sense to perform a zero-bias analysis, but this can be easily solved by placing $\mathcal{T}_{\text{Bulk}}(\varepsilon_d)$ slightly off the charge neutrality point $\varepsilon = 0$, namely $\varepsilon = eV \rightarrow 0$, being eV a small bias-voltage in which the system conducts. This fixes ε , $\text{Re}\tilde{G}_\sigma^0$ and $\text{Im}\tilde{G}_\sigma^0$ at $eV \rightarrow 0$ in Eqs.(13) and (14) for x and \bar{x} , respectively, thus restoring the highly desired linearity of these quantities with ε_d , which is necessary for the Fano profiles to appear. Second, the practical realization of the multi-Weyl bar implies in a finite system, where the Fermi arcs surface states contribute inevitably to the total transmittance, together with the bulk states with $eV \rightarrow 0$. Despite this present characteristic of the experimental proposal, as Fermi arcs surface states are topologically protected[1–8], in opposite to the bulk states, the Fano patterns in the total transmittance as a function of ε_d are expected to have the latter as their source. This means that topologically protected states are supposed to stay robust under external perturbations, in particular, those that do not break the symmetry that protect such states. In this manner, these states become immune to Fano interference. Here, by changing ε_d , the particle-hole symmetry (PHS) of the Hamiltonian of Eq.(1) breaks down, but it does not unprotect topologically the Fermi arcs surface states, once they are not protected by such a symmetry. Consequently, the Fano patterns in the total transmittance are expected to be dictated by $\mathcal{T}_{\text{Bulk}}(\varepsilon_d)$, which for $\varepsilon = eV \rightarrow 0$, leads to Fano profiles around $\varepsilon_d = -U$ and $\varepsilon_d = eV$, as shown in Fig.4(b) for several J values.

We stress that the quantification concerning whether the total transmittance depends weakly on the Fermi arcs surface states is not the focus of the main analysis of the current work. Thus, further investigation into the dependence degree of the Fano interference on the Fermi arcs surface states will be addressed elsewhere. It is worth emphasizing that the proposed device depicted in Fig.4(a) points out a way to induce Fano lineshapes in the total transmittance, just by changing ε_d for fixed small bias-voltage $eV \rightarrow 0$. Experimentally speaking, from one detected Fano lineshape, we can extract the Fano asymmetry parameter q_J via Eq.(23) and by employing Eq.(27),

for instance, determine the topological charge J .

To summarize, for $\mathcal{T}_{\text{Bulk}}(\varepsilon_d)$ versus ε_d , the Fano lineshape in Fig.4(b) is also modulated by J and obeys the same trend previously observed in Fig.2(b). Equivalently, the deeper meaning of the “bulk-boundary” correspondence applied to the here proposed Fano effect is the following: the greater the amount of Fermi arcs surface states given by J at the system boundaries, the more the Fano profile will be antiresonant within the bulk.

V. CONCLUSIONS

In this work, we determine the Fano asymmetry parameter for a single impurity coupled to a multi-Weyl semimetal and introduce the concept of topological charge Fano effect. According to the “bulk-boundary” correspondence, which states that the number of Fermi arcs at the boundaries of a finite size system is determined by the magnitude of the topological charge, known from its bulk version with infinite size, we then reveal the modulation of the system Fano profile, due to the bulk LDOS, by such surface states. This can be emulated in our theoretical framework by the tuning of the topological charge value, which allows the Fano profile to change from the resonant pattern for single Weyl semimetal, towards the antiresonant Fano lineshape, which identifies hyper Weyl semimetals. Additionally, for the maximum allowed protected case by the rotational symmetry group $C_{2J=6}$, namely, the triple Weyl semimetal $J = 3$ and rotational angle defined by $C_{2J} \equiv (360^\circ/2J)$, we predict the absolute Fano parameter $|q_{J=3}| = \tan(C_{2J=6})$ and an asymmetric Fano profile. Additionally, we indicate a quantum transport setup where we expect that the here proposed Fano effect could be present.

VI. ACKNOWLEDGMENTS

We thank the Brazilian funding agencies CNPq (Grants. Nr. 302887/2020-2, 308410/2018-1, 311980/2021-0, 305738/2018-6, 311366/2021-0, 305668/2018-8 and 308695/2021-6), Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior - Brasil (CAPES) – Finance Code 001, the São Paulo Research Foundation (FAPESP; Grant No. 2018/09413-0) and FAPERJ process Nr. 210 355/2018. LSR and IAS acknowledge support from the Icelandic Research Fund (project “Hybrid polaritonics”). IAS also acknowledges support from the Program Priority 2030. LSR thanks ACS and Unesp for their hospitality.

[1] M. Z. Hasan, G. Chang, I. Belopolski, G. Bian, S.-Y. Xu, and J.-X. Yin, *Nature Reviews Materials* **6**, 784 (2021).
 [2] M. Z. Hasan, S.-Y. Xu, I. Belopolski, and S.-M. Huang, *Annual Review of Condensed Matter Physics* **8**, 289 (2017).

[3] B. Yan and C. Felser, *Annual Review of Condensed Matter Physics* **8**, 337 (2017).
 [4] H. Zheng and M. Zahid Hasan, *Advances in Physics: X* **3**, 1466661 (2018).

- [5] N. P. Armitage, E. J. Mele, and A. Vishwanath, *Rev. Mod. Phys.* **90**, 015001 (2018).
- [6] J. Hu, S.-Y. Xu, N. Ni, and Z. Mao, *Annual Review of Materials Research* **49**, 207 (2019).
- [7] Y. Marques, W. N. Mizobata, R. S. Oliveira, M. de Souza, M. S. Figueira, I. A. Shelykh, and A. C. Seridonio, *Scientific Reports* **9**, 8452 (2019).
- [8] W. N. Mizobata, Y. Marques, M. Penha, J. E. Sanches, L. S. Ricco, M. de Souza, I. A. Shelykh, and A. C. Seridonio, *Phys. Rev. B* **102**, 075120 (2020).
- [9] S. Park, S. Woo, E. J. Mele, and H. Min, *Phys. Rev. B* **95**, 161113 (2017).
- [10] R. M. A. Dantas, F. Peña-Benitez, B. Roy, and P. Surówka, *Phys. Rev. Research* **2**, 013007 (2020).
- [11] T. Hayata, Y. Kikuchi, and Y. Tanizaki, *Phys. Rev. B* **96**, 085112 (2017).
- [12] G. Xu, H. Weng, Z. Wang, X. Dai, and Z. Fang, *Phys. Rev. Lett.* **107**, 186806 (2011).
- [13] Q. Liu and A. Zunger, *Phys. Rev. X* **7**, 021019 (2017).
- [14] G. T. D. Pedrosa, J. F. Silva, and E. Vernek, *Phys. Rev. B* **103**, 045137 (2021).
- [15] C. Fang, M. J. Gilbert, X. Dai, and B. A. Bernevig, *Phys. Rev. Lett.* **108**, 266802 (2012).
- [16] R. M. A. Dantas, F. Peña-Benitez, B. Roy, and P. Surówka, *Journal of High Energy Physics* **2018**, 69 (2018).
- [17] S. Ahn, E. J. Mele, and H. Min, *Phys. Rev. B* **95**, 161112 (2017).
- [18] S. P. Mukherjee and J. P. Carbotte, *Phys. Rev. B* **97**, 045150 (2018).
- [19] H.-F. Lü, Y.-H. Deng, S.-S. Ke, Y. Guo, and H.-W. Zhang, *Phys. Rev. B* **99**, 115109 (2019).
- [20] Q. Chen and G. A. Fiete, *Phys. Rev. B* **93**, 155125 (2016).
- [21] T. Nag and S. Nandy, *Journal of Physics: Condensed Matter* **33**, 075504 (2020).
- [22] B. Sadhukhan and T. Nag, *Effect of chirality imbalance on hall transport of p_{rr}hc₂* (2022).
- [23] A. H. Castro Neto, F. Guinea, N. M. R. Peres, K. S. Novoselov, and A. K. Geim, *Rev. Mod. Phys.* **81**, 109 (2009).
- [24] S.-M. Huang, S.-Y. Xu, I. Belopolski, C.-C. Lee, G. Chang, T.-R. Chang, B. Wang, N. Alidoust, G. Bian, M. Neupane, D. Sanchez, H. Zheng, H.-T. Jeng, A. Bansil, T. Neupert, H. Lin, and M. Z. Hasan, *Proceedings of the National Academy of Sciences* **113**, 1180 (2016).
- [25] U. Fano, *Phys. Rev.* **124**, 1866 (1961).
- [26] A. E. Miroshnichenko, S. Flach, and Y. S. Kivshar, *Rev. Mod. Phys.* **82**, 2257 (2010).
- [27] Y. S. Joe, A. M. Satanin, and C. S. Kim, *Physica Scripta* **74**, 259 (2006).
- [28] J. J. Xia, S. Q. Duan, and W. Zhang, *Nanoscale Research Letters* **10**, 223 (2015).
- [29] L. S. Ricco, V. L. Campo, I. A. Shelykh, and A. C. Seridonio, *Phys. Rev. B* **98**, 075142 (2018).
- [30] M. F. Limonov, M. V. Rybin, A. N. Poddubny, and Y. Kivshar, *Nature Photonics* **11**, 543 (2017).
- [31] J. Gollwitzer, L. Bocklage, R. Röhlberger, and G. Meier, *npj Quantum Information* **7**, 1 (2021).
- [32] P. W. Anderson, *Phys. Rev.* **124**, 41 (1961).
- [33] V. Madhavan, W. Chen, T. Jamneala, M. Crommie, and N. Wingreen, *Science* **280**, 567 (1998).
- [34] N. Knorr, M. A. Schneider, L. Diekhöner, P. Wahl, and K. Kern, *Phys. Rev. Lett.* **88**, 096804 (2002).
- [35] O. Újsághy, J. Kroha, L. Szunyogh, and A. Zawadowski, *Phys. Rev. Lett.* **85**, 2557 (2000).
- [36] C. Cui, X.-P. Li, D.-S. Ma, Z.-M. Yu, and Y. Yao, *Phys. Rev. B* **104**, 075115 (2021).
- [37] T. Zhang, R. Takahashi, C. Fang, and S. Murakami, *Phys. Rev. B* **102**, 125148 (2020).
- [38] B. Uchoa, V. N. Kotov, N. M. R. Peres, and A. H. Castro Neto, *Phys. Rev. Lett.* **101**, 026805 (2008).
- [39] H. Bruus and K. Flensberg, *Many-Body Quantum Theory in Condensed Matter Physics, An Introduction* (Oxford: Oxford University Press) (2012).
- [40] A. C. Hewson, *The Kondo Problem to Heavy Fermions* (Cambridge: Cambridge University Press) (1993).
- [41] A. C. Seridonio, M. Yoshida, and L. N. Oliveira, *EPL (Europhysics Letters)* **86**, 67006 (2009).

6.2 Analog of atomic collapse for adatoms on rhombohedral graphene

W. C. Silva, J. E. Sanches, A. M. Freitas, L. T. Lustosa, M. de Souza, and A. C. Seridonio, Phys. Rev. B 108, 205407 – Published 7 November 2023.

Neste trabalho é proposto uma plataforma em que um hospedeiro multi-grafeno com empilhamento do tipo ABC produz estados ligados virtuais situados dentro do *gap* de Coulomb de um átomo adsorvido do tipo Anderson. Surpreendentemente, este estado virtual localizado abaixo do nível de Fermi constitui um fenômeno denominado colapso atômico, enquanto que o segundo virtual emerge como seu buraco correspondente, análogo a um estado de pósitron. Assim, introduzimos o efeito como o colapso atômico, que ocorre devido a uma banda chata com um estado sem dispersão e uma densidade de estados divergente $\sim |\varepsilon - \varepsilon_F|^{2/J-1}$ próximo à energia de Fermi (ε_F) para $J \geq 3$, sendo $J\pi$ a fase de Berry. O estudo deste cenário foi possível devido à transformação de Kramers-Kronig do alargamento de quasipartícula, permitindo a observação de uma singularidade de van Hove induzindo estados ligados virtuais. Contraintuitivamente, próximo à singularidade, encontramos esses estados acima e abaixo da energia de Fermi correlacionados com a existência das bordas inferior e superior da região de *gap* de Coulomb, respectivamente. Note que estes estados virtuais emergem em um sistema que não há torção das folhas de grafeno de modo que o sistema é conhecido como *moiréless* e o fenômeno emerge também auxiliado pelas correlações de Coulomb no átomo adsorvido. Assim, o grafeno multicamadas revelou ser uma plataforma promissora em física da matéria condensada para verificar um fenômeno previsto na física atômica relativística.

Os resultados apresentados nesta seção foram baseados no modelo e cálculos desenvolvidos no Capítulo 5.

Analogue of atomic collapse for adatoms on rhombohedral multilayer graphene

W.C. Silva,^{1,*} J.E. Sanches,¹ A.M. Freitas,¹ L.T. Lustosa,¹ M. de Souza,² and A.C. Seridonio^{1,†}

¹São Paulo State University (Unesp), School of Engineering,

Department of Physics and Chemistry, 15385-000, Ilha Solteira-SP, Brazil

²São Paulo State University (Unesp), IGCE, Department of Physics, 13506-970, Rio Claro-SP, Brazil

We propose that a multi-graphene of ABC-type stacking yields virtual bound states lying within the Coulomb insulating gap of an Anderson-like adatom. Wondrously, a virtual state constitutes the counterpart of the atomic collapse phenomenon proposed in relativistic atomic Physics, while the second emerges as its particle-hole symmetric, analogous to a positron state. Thus, we introduce the effect as the adatomic collapse, which occurs due to a flat band with a dispersionless state and a divergent density of states $\sim |\varepsilon - \varepsilon_F|^{2/J-1}$ near the Fermi energy ε_F for $J \geq 3$, where $J\pi$ is the Berry phase. We conclude this scenario based on the Kramers-Kronig transformation of the quasiparticle broadening, from where we observe that the aforementioned van Hove singularity induces virtual bound states. Counterintuitively, near the singularity, we find these states above and below the Fermi energy correlated to the existence of the bottom and top edges of the Coulomb insulating region, respectively. As such a behavior rises without a twist, the system is known as Moiréless and the phenomenon emerges also assisted by the adatom Coulomb correlations. Similarly to Science 340, 734 (2013) we find the effective critical atomic number $Z_c \sim 0.96$ in contrast to an ultra-heavy nucleus. Thus, we point out that multi-graphene is a proper playground for testing a predicted phenomenon of the relativistic atomic Physics in the domain of the condensed matter Physics.

I. INTRODUCTION

The atomic collapse[1, 2] is an effect predicted by the relativistic atomic Physics, which consists of a phenomenon wherein the charge of a nucleus overpasses its threshold and becomes capable of catching an electron followed by a positron emission. To observe this phenomenon ultra-heavy nuclei are required, but they do not exist in nature spontaneously. Unfortunately, despite the efforts in fabricating the right conditions to emulate these atoms in the experimental native framework of this research field, the observation of the atomic collapse remains elusive[3, 4].

However, some condensed matter platforms rise as successful emulators for this effect wherein the graphene-based systems assume highly the status to this end. In such materials, the aforementioned features are due to the well-established low supercriticality, which can be manufactured artificially[5–8]. As examples we cite calcium ions[5, 6], charged vacancies and electrostatic potentials[7, 8], which once added to graphene monolayer samples play the role of effective supercritical atoms. As aftermath, these atoms within this supercritical regime exhibit a localized virtual bound state appearing in the local density of states (LDOS) as a resonant state below the Fermi level[5] and counterpart of the atomic collapse state.

Alternatively to graphene monolayer, which was already proved reliable for mimicking the atomic collapse, we are free to ask if contemporaneous van der Waals heterostructures could be also candidates for such, once they are characterized by flat bands[10, 11], i.e., the

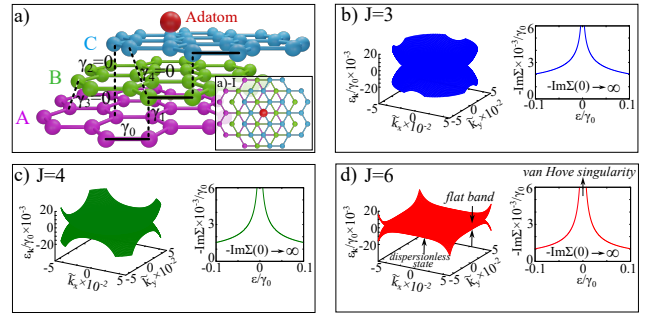


Figure 1. (Color online) (a) Lateral view of multi-graphene following the ABC-type stacking and an adatom on its top [panel a)-I]. (b)-(d) Several cases $J = 3, 4$ and 6 , where the band-structure [Eq.(2)] and quasiparticle broadening [Eq.12] versus energy show a dispersionless state and a van Hove singularity at Fermi energy, respectively. Upon increasing the Berry phase $J\pi$, the flat band extension in reciprocal space enlarges too. Besides, J represents the total of monolayers[9].

so-called van Hove singularities. However, for the entire accomplishment of these characteristics a fine tuning of the “twist magic angle” and Moiré potential conditions are demanded. Twisted bilayer, double-bilayer and trilayer graphene[10–27], ABC trilayer graphene on aligned hexagonal boron nitride[28–30] and transition-metal dichalcogenides[31–36] compose a set of the most common examples in this research field.

In order to overcome such a technical challenge, one way is to take into account the multilayer rhombohedral (ABC) graphene[9, 37], which naturally shows a low energy flat band without its birth in the Moiré superlattice induced by a twist. Interestingly enough, this is attributed to its divergent density of states (DOS) at the Fermi level[9], where a dispersionless state resides. Thus,

* corresponding author: willian.carvalho@unesp.br

† corresponding author: antonio.seridonio@unesp.br

the system is known as Moiréless-type.

Consequently, based on this useful experimental aspect we benefit from it within a theoretical perspective by proposing our adatomic collapse effect. Here, we find that the multi-graphene of ABC-type stacking[9, 37] turns out into a novel platform for realizing the analogous effect of the atomic collapse. Distinctly from earlier results[5, 7, 8], the behavior here reported is the net effect of the interplay between Coulomb correlations and the van Hove singularity at the Fermi energy. Interestingly enough, this singularity enters into the power law of the host DOS, which follows $|\varepsilon - \varepsilon_F|^{2/J-1}$, where the Fermi energy is ε_F and leads to a divergence for $J \geq 3$, with the Berry phase $J\pi$.

Physically speaking, an Anderson-like adatom[38] on top of the ABC multi-graphene system, as depicted in Fig.1(a), fulfills entirely the previous constraints. Simultaneously, such an interaction imposes a gap in the adatom DOS, where we find virtual bound states. One of them stays below the Fermi energy due to the correlation and characterizes a trapped electron inside the valence band, while the other corresponds to its particle-hole symmetric (PHS) within the conduction band, thus emulating a positron-like state. For the quantification of this nearby van Hove singularity effect, as we shall see below, the Kramers-Kronig transformation of the quasiparticle broadening is adopted, from where the emergence of virtual bound states becomes clearly evident at the host.

II. THE MODEL

The low-energy Hamiltonian mimicking our system[Fig.1(a)] reads $\mathcal{H} = \mathcal{H}_{\text{ch.-ABC}} + \mathcal{H}_{\text{Ada.}} + \mathcal{H}_{\text{Hyb.}}$, where

$$\mathcal{H}_{\text{ch.-ABC}} = \sum_{\mathbf{k}s} \psi_{\mathbf{k}s}^\dagger [D_J(\tilde{k}_-^J \sigma_+ + \tilde{k}_+^J \sigma_-)] \psi_{\mathbf{k}s} \quad (1)$$

describes the chiral (ch.) ABC multi-graphene by a set of $J \geq 3$ independent monolayers as *pseudospin* doublets[9], where $J\pi$ is the Berry phase, $\psi_{\mathbf{k}s}^\dagger = (c_{\mathbf{k}s\uparrow}^\dagger c_{\mathbf{k}s\downarrow}^\dagger)$ represents the spinor, $c_{\mathbf{k}s\sigma}^\dagger$ ($c_{\mathbf{k}s\sigma}$) stands for the creation (annihilation) of an electron carrying momentum \mathbf{k} , spin $\sigma = \uparrow, \downarrow$ and valley index $s = \pm 1$ in a single *pseudospin* doublet[9]. The part $\tilde{k}_\pm = (k_x \pm ik_y)/k_{D_J}$ is of non-relativistic type, $k_{D_J} = D_J/v_F$ ($D_{J \geq 3} \approx \gamma_1 = 0.1\gamma_0$, with $\gamma_0 = 3\text{eV}$ [Fig.1(a), [9]]) gives the *Debye-like* momentum (energy) cutoff in terms of the Slonczewski-Weiss-McClure parametrization[37, 39], with v_F the Fermi velocity and $\sigma_\pm = \frac{1}{2}(\sigma_x \pm i\sigma_y)$ the Pauli matrices. The band-structure of Eq.(1) is given straightforwardly by the dispersion relation

$$\varepsilon_{\mathbf{k}s}^\pm = \pm s v_F |\tilde{k}_+|^J k_{D_J}, \quad (2)$$

wherein the frontal sign $+(-)$ corresponds to the conduction (valence) band. Further, it is worth citing that for $J = 1$ we recover one single graphene layer[40] with well-defined Dirac cones in momentum space with $D_{J=1} \approx \gamma_0$,

while for $J \geq 3$ we have the chiral multi-graphene, which is characterized by a highly flat band with a van Hove singularity due to a dispersionless state at Fermi energy.

Additionally, a single Anderson-adatom[38] can be described by the Hamiltonian

$$\mathcal{H}_{\text{Ada.}} = -\frac{U}{2} + \sum_{\sigma} (\varepsilon_{d\sigma} + \frac{U}{2}) n_{d\sigma} + \frac{U}{2} (\sum_{\sigma} n_{d\sigma} - 1)^2, \quad (3)$$

where the adatom levels are $\varepsilon_{d\sigma}$ and $\varepsilon_{d\sigma} + U$, also recognized as the bottom and top edges of the Coulomb insulating gap, respectively and present in the adatom DOS for the Coulomb blockade regime[41]. The U term, actually, represents the Coulomb repulsion between two electrons with opposite spins ($\bar{\sigma} = -\sigma$), as well as the gap size and $n_{d\sigma} = (n_{d\sigma})^2 = d_{\sigma}^\dagger d_{\sigma}$ stands for the number operator, with d_{σ}^\dagger (d_{σ}) the corresponding creation (annihilation) operator.

According to Ref.[42], in the paramagnetic regime the van Hove singularity for $J \geq 6$ turns into a narrow peak slightly asymmetric around the Fermi energy when Coulomb correlations are taken into account by an interacting DFT approach. In such a case, despite γ_2, γ_3 and γ_4 finite[Fig.1(a)] the trigonal warping effect of the Fermi surface[39] is smooth characterized by a quasi-flat state nearby the Fermi energy[42]. This scenario is qualitatively captured by Eq.(1) as we shall see below.

The hybridization term stands for an adatom for the top site-type geometry, i.e., right on a carbon atom such as Au and Sn prefer[43]. This leads to

$$\mathcal{H}_{\text{Hyb.}} = v \left(\frac{1}{\sqrt{\mathcal{N}}} \sum_{\mathbf{k}s\sigma} c_{\mathbf{k}s\sigma}^\dagger d_{\sigma} + \text{H.c.} \right), \quad (4)$$

with v as the host-adatom hopping term and \mathcal{N} is the number of states delimited by the Debye radius k_{D_J} . However, the hollow (center of the hexagon ring) and bridge site-types (middle of C-C bond) are other possibilities for adsorption[43] to be explored elsewhere.

In our Anderson-like Hamiltonian \mathcal{H} [38] for $J \geq 3$ we introduce atomic collapse regimes similarly to Ref.[44]: (i) $v \equiv 0$ is enough to define the subcritical limit without host resonant states; (ii) charge criticality is the starting point of \mathcal{H} wherein $v \neq 0$ naturally and $\varepsilon_{d\sigma} = U = 0$ stands for the PHS regime without correlation. As $f_{0\sigma} \equiv \frac{1}{\sqrt{\mathcal{N}}} \sum_{\mathbf{k}s} c_{\mathbf{k}s\sigma}$ in Eq.(4) acts as a host localized dispersionless state at Fermi energy coupled to d_{σ} , the so-called bonding (adatomic collapse) and antibonding (positron-like) molecular states symmetrically below and above such an energy emerge, respectively; (iii) in the interacting PHS regime, the super criticality emerges by burying $\varepsilon_{d\sigma} = -\frac{U}{2} \neq 0$ into the Fermi sea. It enhances the effective charge of the adatom in analogy to calcium ions gradually deposited on graphene monolayer up to electronic localization[5, 6]. Consequently, we observe two extra PHS localizations emerging within the Coulomb insulating gap at energies $-|\varepsilon_{d\sigma}| < \varepsilon < 0$

and $0 < \varepsilon < |\varepsilon_{d\sigma}|$ as the novel adatomic collapse and positron-like states, respectively.

Simultaneously in (ii) and (iii) *Friedel-like* oscillations exhibit the same spatial dependence as the long-range Coulomb interaction ([45] and out of the present scope). We show that the relativistic linear dispersion of single graphene is needless and that the van Hove singularity is pivotal for the effect.

A. The Adatom DOS and LDOS

From the time Fourier transform $\tilde{\mathcal{G}}_{\text{Ada},\sigma}$ of the adatom retarded Green's function (GF)[41] $\mathcal{G}_{\text{Ada},\sigma} = -i\theta(t) \langle \{d_\sigma(t), d_\sigma^\dagger(0)\} \rangle_{\mathcal{H}}$, we define the adatom DOS

$$\text{DOS} = -\frac{1}{\pi} \text{Im} \tilde{\mathcal{G}}_{\text{Ada},\sigma}. \quad (5)$$

We consider the Coulomb blockade regime[41], in which the correlation U in $\tilde{\mathcal{G}}_{\text{Ada},\sigma}$ is accounted for within the framework of the Hubbard-I approximation[41], which leads to the well-known adatom GF[46]:

$$\tilde{\mathcal{G}}_{\text{Ada},\sigma} = \frac{1}{(-\text{Im}\Sigma)} \left(\frac{w_x}{x+i} + \frac{w_{\bar{x}}}{\bar{x}+i} \right). \quad (6)$$

This expression introduces in Eq.(5) the Hubbard bands centered around the gap edges $\varepsilon_{d\sigma}$ and $\varepsilon_{d\sigma} + U$, with quasiparticle broadening $-\text{Im}\Sigma = -v^2 \text{Im}\tilde{\mathcal{G}}_\sigma^0$ each[41], wherein $w_x = 1 - \langle n_{d\sigma} \rangle$ and $w_{\bar{x}} = 1 - w_x$ represent the spectral weights (peak amplitudes) of the bands, respectively.

Additionally, $\langle n_{d\sigma} \rangle = \int_{-D}^0 \text{DOS} d\varepsilon$ is the electronic occupation of the adatom and

$$\tilde{\mathcal{G}}_\sigma^0 = \frac{1}{\mathcal{N}} \sum_{\mathbf{k}s} \frac{\varepsilon + i0^+}{(\varepsilon + i0^+)^2 + (\varepsilon_{\mathbf{k}s}^+)^2} \quad (7)$$

is the pristine host GF for the ABC multi-graphene, which allows to define the natural Fano coordinates[46]

$$x = \frac{\varepsilon - \varepsilon_{d\sigma} - \text{Re}\Sigma}{(-\text{Im}\Sigma)} \quad (8)$$

and

$$\bar{x} = \frac{\varepsilon - \varepsilon_{d\sigma} - U - \text{Re}\Sigma}{(-\text{Im}\Sigma)}, \quad (9)$$

where $\text{Re}\Sigma$ is the Kramers-Kronig transformation of $-\text{Im}\Sigma$. By applying such a transformation to $-\text{Im}\Sigma$, we obtain

$$\begin{aligned} \text{Re}\Sigma &= \frac{1}{\pi} \int_{-D}^{+D} \frac{(-\text{Im}\Sigma)}{\varepsilon - y} dy \\ &= q_J(-\text{Im}\Sigma), \end{aligned} \quad (10)$$

wherein $y = u\varepsilon$ and $-\text{Im}\Sigma$ is the quasiparticle broadening modulated by the asymmetry parameter (also called as Fano parameter[47])

$$q_J = \frac{1}{\pi} \text{sgn}(\varepsilon) \text{P.V.} \int_{-D_J/\varepsilon}^{+D_J/\varepsilon} \frac{|u|^{2/J-1}}{1-u} du, \quad (11)$$

where P.V. stands for the Cauchy principal value. This object, as we will see later on, is profoundly connected to the emergence of the virtual bound states at the host.

After applying to Eq.(7) the following methodology: (i) the standard substitution $\mathcal{N} = \sum_{\mathbf{k}s} \rightarrow \frac{\mathcal{A}}{(2\pi)^2} \int d^2\mathbf{k} = \frac{\mathcal{A}}{2\pi} k_{D_J}^2$, with \mathcal{A} as the area element in real space; (ii) the hyper-polar transformation given by $k_x = k_{D_J} \left(\frac{\varepsilon_{\mathbf{k}s}^+}{D_J} \right)^{\frac{1}{J}} \cos\theta$ and $k_y = k_{D_J} \left(\frac{\varepsilon_{\mathbf{k}s}^+}{D_J} \right)^{\frac{1}{J}} \sin\theta$ ($0 \leq \theta \leq 2\pi$), with Jacobian $\mathcal{J}(\varepsilon_{\mathbf{k}s}^+, \theta) = \frac{k_{D_J}^2 (\varepsilon_{\mathbf{k}s}^+)^{2/J-1}}{D_J^{2/J}}$ and property $\int \tilde{\mathcal{G}}_\sigma^0 d^2\mathbf{k} = \int \tilde{\mathcal{G}}_\sigma^0 \mathcal{J}(\varepsilon_{\mathbf{k}s}^+, \theta) d\varepsilon_{\mathbf{k}s}^+ d\theta$, we can determine the quasiparticle broadening as follows

$$-\text{Im}\Sigma = v^2 \pi \frac{|\varepsilon|^{2/J-1}}{J D_J^{2/J}}, \quad (12)$$

with scaling-law $|\varepsilon|^{2/J-1}$ exhibiting a van Hove singularity at Fermi level $\varepsilon = 0$ for $J \geq 3$. We do not discuss $J = 2$, since it corresponds to metals without divergence.

We remark that for the situation $q_{J=1}$ (single graphene), the function in Eq.(11) that depends on u does not vanish in the boundaries $u \rightarrow \pm\infty$. This feature imposes a mathematical challenge for the integral calculation and to handle it accordingly, we just follow Ref.[40] for single graphene, but with the cutoff $D_{J=1} \approx \gamma_0$ instead. We solve first the integral analytically by keeping $D_{J=1}/\varepsilon$ finite and the limit $\varepsilon/D_{J=1} \ll 1$ is only assumed in the numerical evaluations of $\text{Re}\Sigma$. Consequently,

$$\text{Re}\Sigma(J=1) = v^2 \frac{\varepsilon}{D_{J=1}^2} \ln \frac{|\varepsilon^2|}{|\varepsilon^2 - D_{J=1}^2|} \quad (13)$$

emerges as dependent on energy for $\varepsilon/D_{J=1} \ll 1$. Nevertheless, the pursued vanishing characteristic in q_J as a function of u exists for $q_{J \geq 3}$ and as aftermath, the integral in Eq.(11) does behave finite for $D_{J \geq 3}/\varepsilon \rightarrow \infty$. This yields a capital result, i.e., an asymmetry parameter discretized in the number of the system layers J , which reads

$$q_{J \geq 3} = \text{sgn}(\varepsilon) \cot(C_{2J}), \quad (14)$$

where we define $C_{2J} \equiv (360^\circ/2J)$ as the angle for the corresponding rotational symmetry group.

Additionally, in order to understand also the emergence of virtual bound states in the host LDOS coupled to the adatom and its interplay with the van Hove singularity, we should consider the following Green's function

$$\mathcal{G}_\sigma = -i\theta(t) \left\langle \left\{ \frac{1}{\sqrt{\mathcal{N}}} \sum_{\mathbf{k}s} c_{\mathbf{k}s\sigma}(t), \frac{1}{\sqrt{\mathcal{N}}} \sum_{\mathbf{k}s} c_{\mathbf{k}s\sigma}^\dagger(0) \right\} \right\rangle_{\mathcal{H}}, \quad (15)$$

which yields

$$\text{LDOS} = -\frac{1}{\pi} \text{Im} \tilde{\mathcal{G}}_{\sigma} = \frac{(-\text{Im} \Sigma)}{\pi v^2} \sum_{p=x, \bar{x}} w_p \frac{(p+q_J)^2}{p^2+1} \quad (16)$$

in terms of the Fano formula[47], where $\tilde{\mathcal{G}}_{\sigma}$ is the time Fourier transform of \mathcal{G}_{σ} . To conclude, if we subtract the background $(-\text{Im} \Sigma)/\pi v^2$ from Eq.(16), i.e., we obtain the adatom induced LDOS, which reads

$$\Delta \text{LDOS} = \text{LDOS} - \frac{(-\text{Im} \Sigma)}{\pi v^2}. \quad (17)$$

III. RESULTS AND DISCUSSION

Here we present the counterpart of the atomic collapse in relativistic atomic Physics, i.e., the adatomic collapse introduced by us. For a sake of simplicity, we take into account the model PHS regime $\varepsilon_{d\sigma} = \varepsilon_d = -\frac{U}{2} = -0.07\gamma_0$ and $w_x = w_{\bar{x}} = 1/2$ for the paramagnetic solution $\langle n_{d\sigma} \rangle = 1/2$ due to a self-consistent calculation and $v/D_J = 0.14$.

By considering Eq.(5) in Figs.2(a) and (c) we contrast the spectral analysis of the adatom DOS for single graphene ($J = 1$) and several ABC multi-graphene systems ($J \geq 6$), respectively. In Fig.2(a) we clearly notice the Hubbard bands around $\varepsilon \approx -|\varepsilon_d|$ (P1 or bottom edge of the gap) and $\varepsilon \approx +|\varepsilon_d|$ (P2 or top edge) together with a pseudogap at Fermi energy in the quasiparticle broadening, as depicted in the inset a)-II. By imposing $x = 0$ and $\bar{x} = 0$ in Eqs.(8) and (9) we obtain $\varepsilon + |\varepsilon_d| = \text{Re} \Sigma$ and $\varepsilon - |\varepsilon_d| = \text{Re} \Sigma$, respectively.

As a result, we are able to determine the poles of Eq.(6) thus providing the precise positions of the insulating gap edges. The latter appear graphically in Fig.2(b), where we see two crossing points between the black and wine[Eq.(13)] curves, once $\text{Re} \Sigma$ just has van Hove singularities far away the Fermi energy and located at energy cutoffs $\pm \gamma_0$ [Eq.(13)]. In such a domain interceptions do not occur. Additionally, $\text{Re} \Sigma(0)$ shows a pseudogap too and, most importantly, $\text{Re} \Sigma$ follows the same energy sign dependence of $-\text{Im} \Sigma$.

The scenario changes drastically by considering the ABC multi-graphene with $J \geq 6$ as depicted in Fig.2(c) due to the asymmetry parameter $q_{J \geq 6}$ of Eq(14). In this analysis we verify the expected points P1 and P2, i.e., the Coulomb gap edges. Counterintuitively, two inner resonant states to the gap represented by P3 and P4 appear. Such points describe emerging virtual bound states arising from the Moiréless characteristic of the ABC multi-graphene system.

The aforementioned feature is due to the dispersionless state pinned at the Fermi level according to the band-structures in inset panels (b)-(d) of Fig.1, which can be obtained from Eq.(2). In Fig.1 we relax the condition $J \geq 6$ just for a sake of clearness. It means that such a flat band manifests as a van Hove divergence in the quasiparticle broadening exactly at Fermi

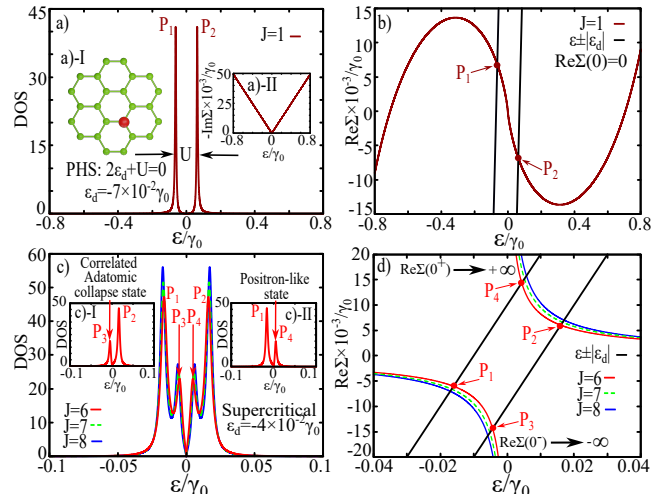


Figure 2. (Color online) Particle-hole symmetry (PHS) is taken into account. (a) Single graphene with an adatom [a-I], linear quasiparticle broadening on energy with a pseudogap at Fermi level [a-II] and typical Coulomb gap in the adatom DOS. (b) Gap edges appear as P1 and P2 in the Kramers-Kronig transformation of $-\text{Im} \Sigma$, namely $\text{Re} \Sigma$. (c) Adatom DOS for $J = 6, 7$ and 8 exhibiting inner virtual bound states to the gap marked by P3 and P4 solely for $J = 6$. (d) As for the ABC stacking $\text{Re} \Sigma$ diverges at Fermi energy, the bottom P1 and top P2 Coulomb gap edges lead to virtual bound states P4 and P3, respectively. The resonant peak P3 is due to the correlation U and mimics the atomic collapse, once an electron state localizes at $\varepsilon < 0$. In contrast, P4 is the particle-hole symmetric of P3 at $\varepsilon > 0$, analogously to a positron state.

energy[Eq.(12) and inset panels (b)-(d) of Fig.1], as well as in its Kramers-Kronig transformation[Eq.(10)]. However, the way that such a singularity presents itself in the latter quantity is quite curious. Differently from $-\text{Im} \Sigma(0) \rightarrow \infty$ for the quasiparticle broadening[Eq.(12)] we have $\text{Re} \Sigma(0^-) \rightarrow -\infty$ and $\text{Re} \Sigma(0^+) \rightarrow +\infty$ instead, exclusively because there is the energy asymmetry factor $\text{sgn}(\varepsilon)$ in the parameter $q_{J \geq 6}$ of Eq.(14). It reverses the energy sign of $-\text{Im} \Sigma$ when we swap the valence by the conduction bands. This can be visualized in Fig.2(d), where two extra crossing points are recorded, i.e., P3 and P4. Noteworthy, we realize that such new poles are correlated to the Coulomb gap edges: the black line above the van Hove singularity contains P1(bottom edge) and P4, while the corresponding below has P2(top edge) and P3. Equivalently, the existence of the virtual bound state P3 is correlated to the Coulomb gap edge P2.

As the peak P3 describes an electronic localization beneath the Fermi level, later on, we will demonstrate that its formation emulates the counterpart of the atomic collapse phenomenon found in relativistic atomic Physics. Particularly, P3 arises from the correlation U , once such a resonant state is derived from the solution of $\bar{x} = 0$ [Eq.(9)] and gives the top edge of the gap. To perceive this characteristic at the inset panel c)-I of Fig.2 the corresponding adatom DOS part of Eq.(6) with spectral

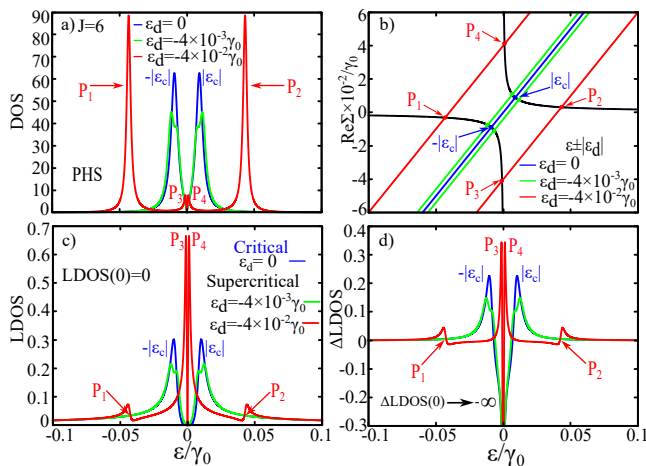


Figure 3. (Color online) Mechanism of the adatomic collapse in the ABC stacking: (a) Adatom DOS in the PHS regime for several energies ϵ_d , where quenching of virtual bond states occurs upon burying the adatom energy within the Fermi sea of the ABC multi-graphene. (b) $\text{Re}\Sigma$ reveals that more deeper is ϵ_d , more the states P_3 and P_4 fall into the van Hove singularity and couple to the host. (c) These states appear in the system LDOS, where the singularity is absent. (d) This lacking is due to the induced ΔLDOS wherein a negative van Hove singularity cancels the one positive in $(-\text{Im}\Sigma)/\pi v^2$. The critical energy is $|\epsilon_c| \sim 9 \times 10^{-3} \gamma_0$, where $-(+)$ for the adatomic collapse (positron-like) state and atomic number $Z_c \sim 0.96$.

weight w_x is presented. In such an inset, we can see explicitly the electronic localization below the Fermi energy induced by the correlation U .

Additionally, the state P_4 is the particle-hole symmetric of P_3 obtained from the condition $x = 0$ in Eq.(8) and plays the role of a positron state, since its localization occurs above the Fermi energy. This feature can be found at the inset panel c)-II of Fig.2, but with the corresponding DOS part carrying the spectral weight w_x . With this in mind, in Fig.3 we reveal the underlying mechanism responsible for the aforementioned effect in the ABC multi-graphene.

The critical limit is depicted by the blue curves in Figs.3(a)-(d) with $\epsilon_d = U = 0$ and energies $\epsilon = \mp|\epsilon_c| = \mp[\sqrt{C_{2J}qJ(\epsilon > 0)}(\frac{v}{D_J})]^{\frac{J}{J-1}} D_J$ obtained from $x = \bar{x} = 0$ [Eqs.(8) and (9)], where $-(+)$ stands for the adatomic collapse (positron-like) state. Particularly for $J = 6$ we find $|\epsilon_c| \sim 9 \times 10^{-3} \gamma_0 = 2.7 \times 10^{-2} \text{eV}$. Here we choose to mimic the adatom as a highly excited effective hydrogen-like atom, which naturally imposes the upper critical atomic number $Z_c^{\text{upper}} = 1$. In this way, we point out that $n = 22$ provides the very close value $|\epsilon_c^{\text{upper}}| = Z_c^{\text{upper}} \frac{13.6 \text{eV}}{n^2} \sim 2.8 \times 10^{-2} \text{eV}$ for the critical energy $|\epsilon_c|$. If we maintain $|\epsilon_c^{\text{upper}}|$ in such a formula, the breakdown of this physics picture is expected to occur for bigger values of n , i.e., $Z_c^{\text{upper}} \gg 1$. Thus, to match accurately with $|\epsilon_c|$ and then find an effective critical atomic number $Z_c < 1$, we keep n instead and perform the eval-

uation $Z_c = \frac{n^2 |\epsilon_c|}{13.6 \text{eV}} \sim 0.96$, which is certainly not for an ultra-heavy nucleus. Similarly, in Ref.[5] the value is $Z_c \sim 0.25$.

Fig.3(a) shows the analysis of the adatom DOS for several values of $\epsilon_d = -\frac{U}{2}$ with $J = 6$, where we can clearly perceive that by burying the adatom level into the Fermi sea of the host, the P_3 and P_4 peaks become suppressed with their positions shifted towards the Fermi energy, where the van Hove singularity resides. In the other hand, the Coulomb gap edges P_1 and P_2 exhibit enhanced amplitudes with peak positions displaced far away the singularity. Thus, in order to understand the aforementioned novel behavior, we present the adatom energy dependence of $\text{Re}\Sigma$ in Fig.3(b). Interestingly enough, this panel reveals that the poles P_3 and P_4 dive into the van Hove singularity upon decreasing ϵ_d .

Fig.3(b) elucidates that there is a sharp region in energy domain sufficiently close to the Fermi level that bonds an electron as a state in the host energy continuum [panel (c)], as well as traps an electron within the adatom site as a virtual bond state with energy below the Fermi level. Additionally, such a trapping leads to a resonant state above the Fermi energy, which mimics a positron state in analogy to its counterpart in relativistic atomic Physics.

When such a situation is established, we realize the adatomic collapse introduced by us. It means that when such poles are finally captured by the singularity, these states inevitably localize in the host band [see P_3 , P_4 in the LDOS given by Eq.(16) and depicted in panel (c)]. Surprisingly, as we have the negative van Hove singularity in $\Delta\text{LDOS}(0) \rightarrow -\infty$ shown in Fig.3(d), which interferes destructively with the corresponding positive in $-\text{Im}\Sigma(0)/\pi v^2 \rightarrow \infty$, we find $\text{LDOS}(0) = 0$ in Fig.3(c).

As expected, if we extrapolate the analysis away from the PHS regime $\epsilon_d \neq -\frac{U}{2}$ in Figs.2 and 3 the states P_3 and P_4 would exhibit distinct spectral amplitudes without mirror symmetry around the Dirac point. Such a feature is derived straightforwardly from the molecular binding in Eq.(4) with the dispersionless states ϵ_d and $\epsilon_d + U$ for the orbital d_σ flanking asymmetrically the observed in $f_{0\sigma} \equiv \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}\sigma} c_{\mathbf{k}\sigma}$ at the Dirac point. This mimics the Fermi energy off the Dirac point situation and independently, the adatomic collapse would persist. In summary, according to Fig.3(b) in this generalized situation P_3 and P_4 would emerge from the crossings $\epsilon - (U - |\epsilon_d|) = \text{Re}\Sigma$ and $\epsilon + |\epsilon_d| = \text{Re}\Sigma$, respectively.

IV. CONCLUSIONS

In this work we find virtual bound states within the Coulomb insulating gap of an adatom coupled to a multi-graphene system obeying the ABC stacking. We demonstrate that one of the virtual states mimics the atomic collapse phenomenon known in relativistic atomic Physics[1, 2]. Interestingly enough, the second virtual state reported corresponds to the particle-hole symmet-

ric of the latter, thus playing the role of the positron state. In this way, we introduce our adatomic collapse, which arises from the interplay between the Moiréless feature of the multi-graphene host and the Coulomb correlations within the Anderson-like adatom. In this manner we estimate the effective critical atomic number $Z_c \sim 0.96$ [5]. Therefore, our findings make explicit that the ABC multi-graphene system is a rich environment for strongly correlated phenomena and emulation of relativistic Physics.

V. ACKNOWLEDGMENTS

We thank the Brazilian funding agencies CNPq (Grants Nr. 302887/2020-2 and 308695/2021-6), Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior - Brasil (CAPES) – Finance Code 001 and the São Paulo Research Foundation (FAPESP Grant No. 2018/09413-0). We thank Prof. Edson Vernek for discussions of the adatomic collapse in terms of a molecular binding, which helped us to better explain the effect.

-
- [1] Andrei Shytov, Mark Rudner, Nan Gu, Mikhail Katsnelson, and Leonid Levitov. Atomic collapse, lorentz boosts, klein scattering, and other quantum-relativistic phenomena in graphene. *Solid State Communications*, 149(27):1087–1093, 2009. Recent Progress in Graphene Studies.
- [2] J Reinhardt and W Greiner. Quantum electrodynamics of strong fields. *Reports on Progress in Physics*, 40(3):219, mar 1977.
- [3] J. Schweppe, A. Gruppe, K. Bethge, H. Bokemeyer, T. Cowan, H. Folger, J. S. Greenberg, H. Grein, S. Ito, R. Schule, D. Schwalm, K. E. Stiebing, N. Trautmann, P. Vincent, and M. Waldschmidt. Observation of a peak structure in positron spectra from u+cm collisions. *Phys. Rev. Lett.*, 51:2261–2264, Dec 1983.
- [4] T. Cowan, H. Backe, M. Begemann, K. Bethge, H. Bokemeyer, H. Folger, J. S. Greenberg, H. Grein, A. Gruppe, Y. Kido, M. Klüver, D. Schwalm, J. Schweppe, K. E. Stiebing, N. Trautmann, and P. Vincent. Anomalous positron peaks from supercritical collision systems. *Phys. Rev. Lett.*, 54:1761–1764, Apr 1985.
- [5] Yang Wang, Dillon Wong, and Andrey V. et al. Shytov. Observing atomic collapse resonances in artificial nuclei on graphene. *Science (New York, N.Y.)*, 340(6133):734–737, May 2013.
- [6] Alireza Saffarzadeh and George Kirczenow. Coulomb bound states and resonances due to groups of ca dimers adsorbed on suspended graphene. *Phys. Rev. B*, 90:155404, Oct 2014.
- [7] Jinhai Mao, Yuhang Jiang, and Dean et al. Moldovan. Realization of a tunable artificial atom at a supercritically charged vacancy in graphene. *Nature Physics*, 12:545–549, 2016.
- [8] Yuhang Jiang, Jinhai Mao, and Dean et al. Moldovan. Tuning a circular p-n junction in graphene from quantum confinement to optical guiding. *Nature Nanotechnology*, 12:1045–1049, 2017.
- [9] Hongki Min and Allan H. MacDonald. Electronic structure of multilayer graphene. *Progress of Theoretical Physics Supplement*, 176:227–252, 06 2008.
- [10] Yuan Cao, Valla Fatemi, Ahmet Demir, Shiang Fang, Spencer L. Tomarken, Jason Y. Luo, Javier D. Sanchez-Yamagishi, Kenji Watanabe, Takashi Taniguchi, Efthimios Kaxiras, Ray C. Ashoori, and Pablo Jarillo-Herrero. Correlated insulator behaviour at half-filling in magic-angle graphene superlattices. *Nature*, 556:7699, 2018.
- [11] Y. Cao, S. Fatemi, V. and Fang, Kenji Watanabe, Takashi Taniguchi, Efthimios Kaxiras, and Pablo Jarillo-Herrero. Unconventional superconductivity in magic-angle graphene superlattices. *Nature*, 556:7699, Feb 2018.
- [12] Cheng Shen, Yanbang Chu, QuanSheng Wu, Na Li, Shuopei Wang, Yanchong Zhao, Jian Tang, Jieying Liu, Jinpeng Tian, Kenji Watanabe, Takashi Taniguchi, Rong Yang, Zi Yang Meng, Dongxia Shi, Oleg V. Yazyev, and Guangyu Zhang. Correlated states in twisted double bilayer graphene. *Nature Physics*, 16:520–525, 2020.
- [13] Yuan Cao, Daniel Rodan-Legrain, Oriol Rubies-Bigorda, Jeong Min Park, Kenji Watanabe, Takashi Taniguchi, and Pabl Jarillo-Herrero. Tunable correlated states and spin-polarized phases in twisted bilayer-bilayer graphene. *Nature*, 583:215–220, 2020.
- [14] Yuan Cao, Debanjan Chowdhury, Daniel Rodan-Legrain, Oriol Rubies-Bigorda, Kenji Watanabe, Takashi Taniguchi, T. Senthil, and Pablo Jarillo-Herrero. Strange metal in magic-angle graphene with near planckian dissipation. *Phys. Rev. Lett.*, 124:076801, Feb 2020.
- [15] Ming Xie and A. H. MacDonald. Weak-field hall resistivity and spin-valley flavor symmetry breaking in magic-angle twisted bilayer graphene. *Phys. Rev. Lett.*, 127:196401, Nov 2021.
- [16] Grigory Tarnopolsky, Alex Jura Kruchkov, and Ashvin Vishwanath. Origin of magic angles in twisted bilayer graphene. *Phys. Rev. Lett.*, 122:106405, Mar 2019.
- [17] Moon Jip Park, Youngkuk Kim, Gil Young Cho, and SungBin Lee. Higher-order topological insulator in twisted bilayer graphene. *Phys. Rev. Lett.*, 123:216803, Nov 2019.
- [18] Hiroki Isobe, Noah F. Q. Yuan, and Liang Fu. Unconventional superconductivity and density waves in twisted bilayer graphene. *Phys. Rev. X*, 8:041041, Dec 2018.
- [19] Naoto Nakatsuji and Mikito Koshino. Moiré disorder effect in twisted bilayer graphene. *Phys. Rev. B*, 105:245408, Jun 2022.
- [20] Hoi Chun Po, Liujun Zou, Ashvin Vishwanath, and T. Senthil. Origin of mott insulating behavior and superconductivity in twisted bilayer graphene. *Phys. Rev. X*, 8:031089, Sep 2018.
- [21] Narasimha Raju Chebroolu, Bheema Lingam Chittari, and Jeil Jung. Flat bands in twisted double bilayer graphene. *Phys. Rev. B*, 99:235417, Jun 2019.
- [22] Xia Liang, Zachary A. H. Goodwin, Valerio Vitale, Fabiano Corsetti, Arash A. Mostofi, and Johannes Lischner. Effect of bilayer stacking on the atomic and electronic structure of twisted double bilayer graphene. *Phys. Rev.*

- B*, 102:155146, Oct 2020.
- [23] G. William Burg, Jihang Zhu, Takashi Taniguchi, Kenji Watanabe, Allan H. MacDonald, and Emanuel Tutuc. Correlated insulating states in twisted double bilayer graphene. *Phys. Rev. Lett.*, 123:197702, Nov 2019.
- [24] Mikito Koshino. Band structure and topological properties of twisted double bilayer graphene. *Phys. Rev. B*, 99:235406, Jun 2019.
- [25] J. A. Crosse, Naoto Nakatsuji, Mikito Koshino, and Pilkyung Moon. Hofstadter butterfly and the quantum hall effect in twisted double bilayer graphene. *Phys. Rev. B*, 102:035421, Jul 2020.
- [26] Yi-Xiang Wang, Fuxiang Li, and Zi-Yue Zhang. Phase diagram and orbital chern insulator in twisted double bilayer graphene. *Phys. Rev. B*, 103:115201, Mar 2021.
- [27] Yuncheng Mao, Daniele Guerci, and Christophe Mora. Supermoiré low-energy effective theory of twisted trilayer graphene. *Phys. Rev. B*, 107:125423, Mar 2023.
- [28] M. J. Calderón, A. Camjayi, and E. Bascones. Mott correlations in abc graphene trilayer aligned with hbn. *Phys. Rev. B*, 106:L081123, Aug 2022.
- [29] Guorui Chen, Aaron L Sharpe, Patrick Gallagher, Ilan T Rosen, Eli J Fox, Lili Jiang, Bosai Lyu, Hongyuan Li, Kenji Watanabe, Takashi Taniguchi, Jeil Jung, Zhiwen Shi, David Goldhaber-Gordon, Yuanbo Zhang, and Feng Wang. Signatures of tunable superconductivity in a trilayer graphene moire superlattice. *Nature*, 572(7768):215–219, August 2019.
- [30] Guorui Chen, Lili Jiang, Shuang Wu, Bosai Lyu, Hongyuan Li, Bheema Lingam Chittari, Kenji Watanabe, Takashi Taniguchi, Zhiwen Shi, Jeil Jung, Yuanbo Zhang, and Feng Wang. Evidence of a gate-tunable mott insulator in a trilayer graphene moire superlattice. *Nature Physics*, 15:237–241, 2019.
- [31] Lei Wang, En-Min Shih, Augusto Ghiotto, Lede Xian, Daniel A. Rhodes, Cheng Tan, Martin Claassen, Dante M. Kennes, Yusong Bai, Bumho Kim, Kenji Watanabe, Takashi Taniguchi, Xiaoyang Zhu, James Hone, Angel Rubio, Abhay N. Pasupathy, and Cory R. Dean. Correlated electronic phases in twisted bilayer transition metal dichalcogenides. *Nature Materials*, 19:861–866, 2020.
- [32] Mathieu Bélanger, Jérôme Fournier, and David Sénéchal. Superconductivity in the twisted bilayer transition metal dichalcogenide wse_2 : A quantum cluster study. *Phys. Rev. B*, 106:235135, Dec 2022.
- [33] Xueheng Kuang, Zhen Zhan, and Shengjun Yuan. Flat-band plasmons in twisted bilayer transition metal dichalcogenides. *Phys. Rev. B*, 105:245415, Jun 2022.
- [34] Mit H. Naik and Manish Jain. Ultraflatbands and shear solitons in moiré patterns of twisted bilayer transition metal dichalcogenides. *Phys. Rev. Lett.*, 121:266401, Dec 2018.
- [35] Yi-Ming Wu, Zhengzhi Wu, and Hong Yao. Pair-density-wave and chiral superconductivity in twisted bilayer transition metal dichalcogenides. *Phys. Rev. Lett.*, 130:126001, Mar 2023.
- [36] Jiawei Zang, Jie Wang, Jennifer Cano, and Andrew J. Millis. Hartree-fock study of the moiré hubbard model for twisted bilayer transition metal dichalcogenides. *Phys. Rev. B*, 104:075150, Aug 2021.
- [37] Fan Zhang, Bhagawan Sahu, Hongki Min, and A. H. MacDonald. Band structure of abc-stacked graphene trilayers. *Phys. Rev. B*, 82:035409, Jul 2010.
- [38] P. W. Anderson. Localized magnetic states in metals. *Phys. Rev.*, 124:41–53, Oct 1961.
- [39] Mikito Koshino and Edward McCann. Trigonal warping and berry’s phase $n\pi$ in abc-stacked multilayer graphene. *Phys. Rev. B*, 80:165409, Oct 2009.
- [40] Bruno Uchoa, Valeri N. Kotov, N. M. R. Peres, and A. H. Castro Neto. Localized magnetic states in graphene. *Phys. Rev. Lett.*, 101(2):026805, Jul 2008.
- [41] H. Bruus and K. Flensberg. Many-body quantum theory in condensed matter physics, an introduction. (*Oxford: Oxford University Press*), 2012.
- [42] Betül Pamuk, Jacopo Baima, Francesco Mauri, and Matteo Calandra. Magnetic gap opening in rhombohedral-stacked multilayer graphene from first principles. *Phys. Rev. B*, 95:075422, Feb 2017.
- [43] Kevin T. Chan, J. B. Neaton, and Marvin L. Cohen. First-principles study of metal adatom adsorption on graphene. *Phys. Rev. B*, 77:235430, Jun 2008.
- [44] R Van Pottelberge, D Moldovan, S P MilovanoviA, and F M Peeters. Molecular collapse in monolayer graphene. *2D Materials*, 6(4):045047, sep 2019.
- [45] C. Dutreix and M. I. Katsnelson. Friedel oscillations at the surfaces of rhombohedral n -layer graphene. *Phys. Rev. B*, 93:035413, Jan 2016.
- [46] W. C. Silva, W. N. Mizobata, J. E. Sanches, L. S. Ricco, I. A. Shelykh, M. de Souza, M. S. Figueira, E. Vernek, and A. C. Seridonio. Topological charge fano effect in multi-weyl semimetals. *Phys. Rev. B*, 105:235135, Jun 2022.
- [47] Andrey E. Miroshnichenko, Sergej Flach, and Yuri S. Kivshar. Fano resonances in nanoscale structures. *Rev. Mod. Phys.*, 82:2257–2298, Aug 2010.

Capítulo 7

Considerações Finais

Neste trabalho, dedicamos nossa atenção a dois sistemas distintos, nomeadamente o multi-Weyl e o grafeno multicamadas romboédrico, como objetos de pesquisa. Conseqüentemente, optamos por abordar as conclusões da investigação dos efeitos oriundos de cada sistema de maneira independente, proporcionando uma análise individualizada para uma compreensão mais aprofundada.

7.1 Topological charge Fano effect in multi-Weyl semi-metals

Nesta pesquisa determinamos o parâmetro de assimetria Fano (q_J), considerando uma única impureza acoplada a um semimetal de multi-Weyl e sendo capaz assim, de introduzir o conceito de efeito Fano oriundo de uma carga topológica. Assim, de acordo com o princípio de correspondência “*bulk-boundary*”, que afirma que o número de arcos de Fermi nos limites da fronteira de um sistema é determinado pela magnitude da carga topológica, revelamos então a modulação do perfil do sistema Fano, por tais estados de superfície. O ajuste do valor da carga topológica permite que o perfil Fano evolua do padrão ressonante no caso em que $J = 1$ (semimetal de Weyl), para um perfil Fano antirressonante, regime no qual identificamos os semimetais de hiper-Weyl ($J \gg 1$). Para o caso em que ainda há proteção topológica ($J = 3$), obtemos um parâmetro de assimetria dado por $|q_{J=3}| = \tan(C_{2J=6})$, sendo que $C_{2J} \equiv (360^\circ/2J)$ indica o grupo de simetria rotacional ao qual o semimetal de multi-Weyl pertence. Vale destacar então que esta proteção topológica tem origem no grupo de simetria que o semimetal Weyl-tríplo ($J = 3$) possui. Além disso, indicamos uma configuração de transporte quântico

que pode possibilitar a verificação do efeito Fano proposto discutido nesta Tese.

Concluindo, os semimetais de multi-Weyl caracterizados por suas bandas e propriedades topológicas únicas oferecem um terreno fértil para exploração e descobertas fascinantes. O estudo desses materiais não apenas aprimora nossa compreensão fundamental da natureza quântica da matéria, mas também abre perspectivas promissoras para aplicações tecnológicas.

7.2 Analog of atomic collapse for adatoms on rhombohedral graphene

Neste estudo encontramos estados ligados virtuais na região do *gap* Coulomb de um adátom acoplado a um sistema grafeno multicamadas obedecendo ao empilhamento ABC. De maneira conclusiva, demonstramos que um desses estados virtuais reproduz um fenômeno análogo ao colapso atômico reconhecido na física atômica relativística. De maneira intrigante, o segundo estado virtual assume a função equivalente ao estado de pósitron. Desta forma, introduzimos o colapso atômico, que surge do empilhamento ABC do grafeno multicamadas. Desta forma, estimamos o número atômico crítico efetivo $Z_c \sim 0.96$ [22]. Assim, nossas descobertas evidenciam que o sistema grafeno multicamadas ABC oferece um ambiente propício para a manifestação de fenômenos fortemente correlacionados e para a emulação da física relativística.

Em síntese, a investigação dedicada ao grafeno com empilhamento ABC revela um cenário fascinante de propriedades e fenômenos únicos. A estrutura tridimensional peculiar desse material não apenas desafia as expectativas convencionais, mas também oferece uma plataforma promissora para aplicações inovadoras em diversas áreas, desde eletrônica avançada até novos paradigmas na física de materiais. Ao compreendermos mais profundamente as características específicas do grafeno multicamadas ABC, abrimos caminho para futuras descobertas e avanços tecnológicos que podem moldar significativamente o panorama da pesquisa científica e suas aplicações práticas. Este material revela-se não apenas como um objeto de estudo intrigante, mas como um precursor potencial de inovações que impulsionarão a fronteira do conhecimento e da tecnologia.

Capítulo 8

Publicações e Perspectivas Futuras

Neste capítulo, são destacados dois artigos principais previamente publicados, os quais estão intrinsecamente vinculados aos resultados apresentados nesta tese.

- *W. C. Silva, W. N. Mizobata, J. E. Sanches, L. S. Ricco, I. A. Shelykh, M. de Souza, M. S. Figueira, E. Vernek, and A. C. Seridonio, Phys. Rev. B 105, 235135 – Published 24 June 2022;*
- *W. C. Silva, J. E. Sanches, A. M. Freitas, L. T. Lustosa, M. de Souza, and A. C. Seridonio, Phys. Rev. B 108, 205407 – Published 7 November 2023.*

É importante ressaltar que o autor deste trabalho desempenhou um papel significativo na concepção da ideia, na realização de cálculos analíticos e numéricos, bem como na discussão e redação da versão inicial dos artigos mencionados. Adicionalmente, sua participação estendeu-se à análise de dados e às discussões em relação ao artigo suplementar subsequente:

- *Mizobata, W. N. and Sanches, J. E. and Penha, M. and Silva, W. C. and Carvalho, C.A. and Figueira, M.S. and De Souza, M. and Seridonio, A.C. , 2D Materials 8, 045038 – Published 7 October 2021.*

Temos como perspectiva futura explorar os seguintes aspectos:

- Explorar o efeito Fano oriundo do empilhamento ABC no grafeno multicamadas, conforme é exibido na Fig. 8.1;
- Investigar o efeito proveniente da carga topológica em semimetal de multi-Weyl com duas impurezas acopladas ao mesmo sítio, conforme é ilustrado na Fig. 8.2;

- Estudar o possível colapso molecular, efeito análogo ao colapso atômico. No entanto, neste caso, vamos considerar duas impurezas acopladas a átomos de carbono em um sistema de grafeno multicamadas, conforme esquematizado na Fig. 8.3.

Os trabalhos futuros estão sendo desenvolvidos em colaboração com o Prof. Enesio Marinho da Silva Jr., do Departamento de Física e Química da UNESP-Ilha Solteira.

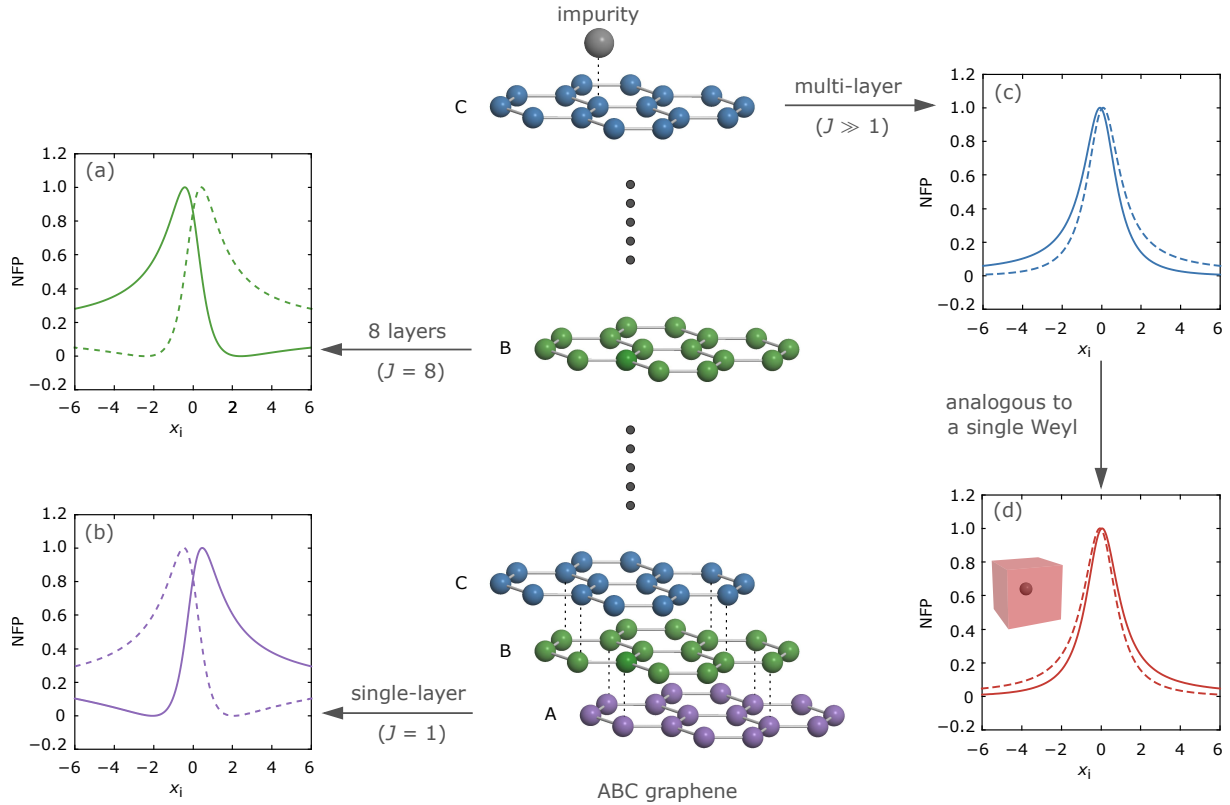


Figura 8.1: No painel central é representado numa perspectiva lateral o grafeno multicamadas seguindo o empilhamento do tipo ABC e um átomo adsorvido em seu topo. Nos painéis (a)-(d) são exibidos a modulação do perfil Fano em função de x_i (x , representado pelas linhas sólidas, ou \bar{x} , representado pelas linhas tracejadas) para diferentes números de camadas (J) no ABC grafeno multicamadas empilhado. O perfil Fano obtido para $J = 1$ (b) assemelha-se ao obtido para o caso em que $J = 8$ (a). Também comparamos o perfil de ressonância Fano para o grafeno multicamadas ($J \gg 1$) com o obtido para um semimetal de Weyl ($J = 1$), conforme apresentado nos painéis (c) e (d).

Além disso, é importante destacar que em novembro de 2023, assumi a posição de Docente efetivo no Instituto Federal do Mato Grosso do Sul (IFMS). Planejo também iniciar um pós-doutorado pela UNESP-Ilha Solteira, sob a supervisão do professor Antonio Seridonio. Assim, aperfeiçoaria as habilidades e contribuirei para o avanço do conhecimento na minha área de atuação, comprometendo-me em conciliar as responsabilidades como docente no instituto com as exigências do programa de pós-doutorado.

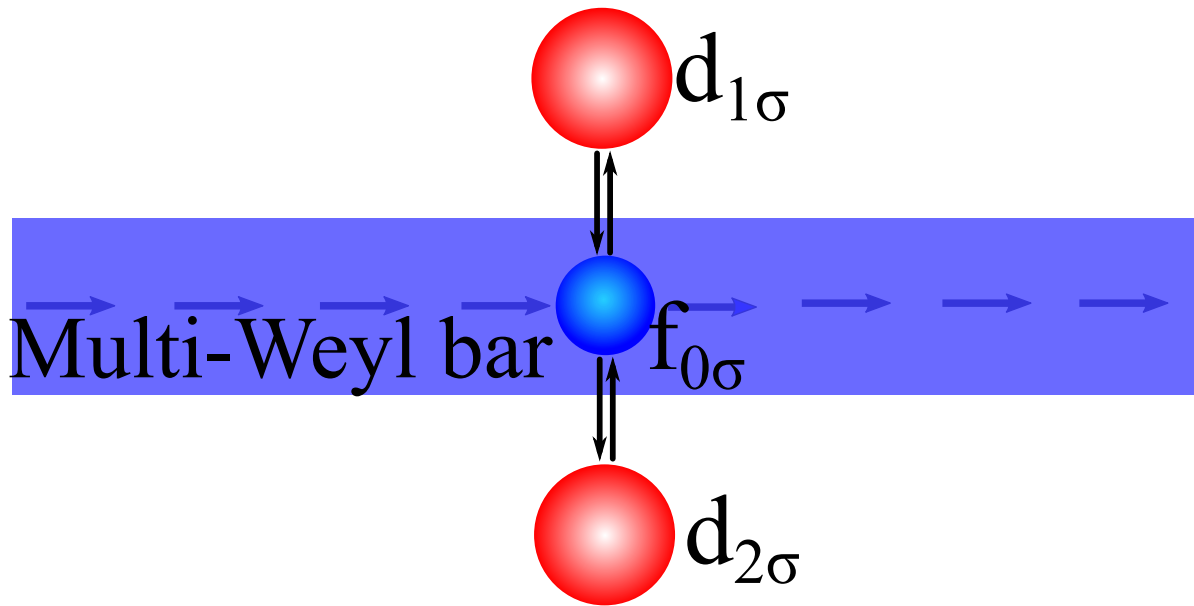


Figura 8.2: Representação de uma barra de semimetal multi-Weyl, na qual duas impurezas estão acopladas lateralmente. Neste sistema, nossa intenção é investigar o colapso dos picos de Hubbard na densidade de estados ao quebrarmos a simetria de inversão ($Q \neq 0$). Esse processo conduz à formação de um único pico em zero ($\varepsilon_F = 0$), ou seja, manifestando um único modo zero. Este modo zero é resultado da fusão entre os estados moleculares comuns, ocorrendo quando a simetria de inversão é quebrada.

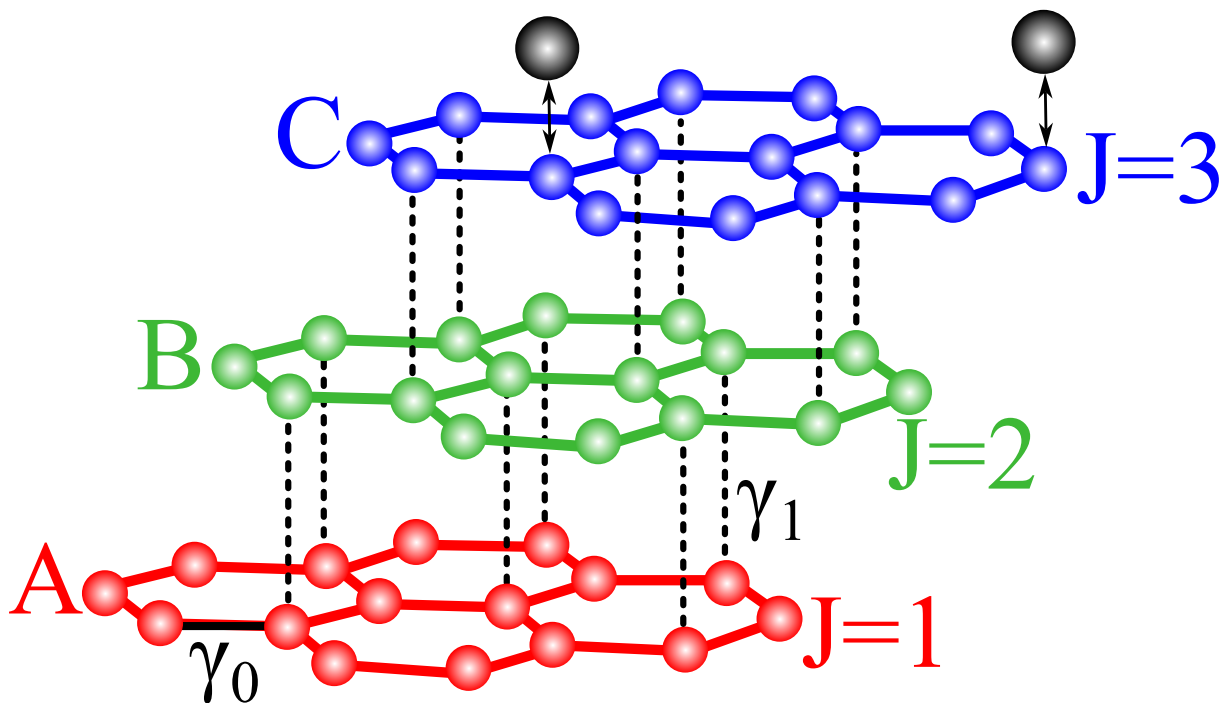


Figura 8.3: Representação numa perspectiva lateral do grafeno multicamadas seguindo o empilhamento do tipo ABC, com dois átomos adsorvidos. Neste sistema pretendemos explorar o possível colapso molecular, efeito análogo ao colapso atômico.

Referências Bibliográficas

- [1] DANTAS, R. et al. Magnetotransport in multi-weyl semimetals: A kinetic theory approach. *Journal of High Energy Physics*, Springer, v. 2018, n. 12, p. 1–25, 2018.
- [2] LÜ, H.-F. et al. Quantum impurity in topological multi-weyl semimetals. *Phys. Rev. B*, American Physical Society, v. 99, p. 115109, Mar 2019. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.99.115109>>.
- [3] PARK, S. et al. Semiclassical boltzmann transport theory for multi-weyl semimetals. *Phys. Rev. B*, American Physical Society, v. 95, p. 161113, Apr 2017. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.95.161113>>.
- [4] DANTAS, R. M. A. et al. Non-abelian anomalies in multi-weyl semimetals. *Phys. Rev. Research*, American Physical Society, v. 2, p. 013007, Jan 2020. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevResearch.2.013007>>.
- [5] HAYATA, T.; KIKUCHI, Y.; TANIZAKI, Y. Topological properties of the chiral magnetic effect in multi-weyl semimetals. *Phys. Rev. B*, American Physical Society, v. 96, p. 085112, Aug 2017. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.96.085112>>.
- [6] XU, G. et al. Chern semimetal and the quantized anomalous hall effect in HgCr_2Se_4 . *Phys. Rev. Lett.*, American Physical Society, v. 107, p. 186806, Oct 2011. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.107.186806>>.
- [7] LIU, Q.; ZUNGER, A. Predicted realization of cubic dirac fermion in quasi-one-dimensional transition-metal monochalcogenides. *Phys. Rev. X*, American Physical Society, v. 7, p. 021019, May 2017. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevX.7.021019>>.

- [8] PEDROSA, G. T. D.; SILVA, J. F.; VERNEK, E. Kondo screening regimes in multi-dirac and weyl systems. *Phys. Rev. B*, American Physical Society, v. 103, p. 045137, Jan 2021. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.103.045137>>.
- [9] FANG, C. et al. Multi-weyl topological semimetals stabilized by point group symmetry. *Phys. Rev. Lett.*, American Physical Society, v. 108, p. 266802, Jun 2012. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.108.266802>>.
- [10] AHN, S.; MELE, E. J.; MIN, H. Optical conductivity of multi-weyl semimetals. *Phys. Rev. B*, American Physical Society, v. 95, p. 161112, Apr 2017. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.95.161112>>.
- [11] MUKHERJEE, S. P.; CARBOTTE, J. P. Doping and tilting on optics in noncentrosymmetric multi-weyl semimetals. *Phys. Rev. B*, American Physical Society, v. 97, p. 045150, Jan 2018. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.97.045150>>.
- [12] SILVA, W. C. et al. Topological charge fano effect in multi-weyl semimetals. *Phys. Rev. B*, American Physical Society, v. 105, p. 235135, Jun 2022. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.105.235135>>.
- [13] HASAN, M. Z. et al. Weyl, dirac and high-fold chiral fermions in topological quantum matter. *Nature Reviews Materials*, Nature Publishing Group UK London, v. 6, n. 9, p. 784–803, 2021.
- [14] WITTEN, E. Three lectures on topological phases of matter. *La Rivista del Nuovo Cimento*, Springer, v. 39, p. 313–370, 2016.
- [15] BALENTS, L. Weyl electrons kiss. *Physics*, APS, v. 4, p. 36, 2011.
- [16] MARQUES, Y. et al. Antibonding ground state of adatom molecules in bulk dirac semimetals. *Phys. Rev. B*, American Physical Society, v. 96, p. 041112, Jul 2017. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.96.041112>>.
- [17] SHEN, S.-Q. *Topological insulators*. [S.l.]: Springer, 2012. v. 174.
- [18] DANTAS, R. M. et al. Magnetotransport in multi-weyl semimetals: a kinetic theory approach. *Journal of High Energy Physics*, v. 2018, p. 1–25, 2018.

- [19] ALTLAND, A.; SIMONS, B. D. *Condensed matter field theory*. [S.l.]: Cambridge university press, 2010.
- [20] CHEN, Q.; FIETE, G. A. Thermoelectric transport in double-weyl semimetals. *Phys. Rev. B*, American Physical Society, v. 93, p. 155125, Apr 2016. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.93.155125>>.
- [21] HUANG, S.-M. et al. New type of weyl semimetal with quadratic double weyl fermions. *Proceedings of the National Academy of Sciences*, National Acad Sciences, v. 113, n. 5, p. 1180–1185, 2016.
- [22] WANG, Y. et al. Observing atomic collapse resonances in artificial nuclei on graphene. *Science*, American Association for the Advancement of Science, v. 340, n. 6133, p. 734–737, 2013.
- [23] LATYCHEVSKAIA, T. et al. Stacking transition in rhombohedral graphite. *Frontiers of Physics*, Springer, v. 14, p. 1–7, 2019.
- [24] PARTOENS, B.; PEETERS, F. M. From graphene to graphite: Electronic structure around the k point. *Phys. Rev. B*, American Physical Society, v. 74, p. 075404, Aug 2006. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.74.075404>>.
- [25] GUIMARAES, M. H. D. Aspectos eletrônicos e estruturais do grafeno e derivados: um estudo teórico-experimental. Universidade Federal de Minas Gerais, 2010.
- [26] MIN, H.; MACDONALD, A. H. Electronic structure of multilayer graphene. *Progress of Theoretical Physics Supplement*, Oxford University Press, v. 176, p. 227–252, 2008.
- [27] BOUHLAL, A. et al. Tunneling phase diagrams in anisotropic multi-weyl semimetals. *Annalen der Physik*, Wiley Online Library, v. 534, n. 11, p. 2200267, 2022.
- [28] SILVA, W. C. et al. Analog of atomic collapse for adatoms on rhombohedral multilayer graphene. *Phys. Rev. B*, American Physical Society, v. 108, p. 205407, Nov 2023. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.108.205407>>.
- [29] SAFFARZADEH, A.; KIRCZENOW, G. Coulomb bound states and resonances due to groups of ca dimers adsorbed on suspended graphene. *Phys. Rev.*

- B*, American Physical Society, v. 90, p. 155404, Oct 2014. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.90.155404>>.
- [30] MAO, J. et al. Realization of a tunable artificial atom at a supercritically charged vacancy in graphene. *Nature Physics*, Nature Publishing Group UK London, v. 12, n. 6, p. 545–549, 2016.
- [31] JIANG, Y. et al. Tuning a circular p–n junction in graphene from quantum confinement to optical guiding. *Nature nanotechnology*, Nature Publishing Group UK London, v. 12, n. 11, p. 1045–1049, 2017.
- [32] WONG, D. *Tuning Electrostatic Potentials for Imaging the Quantum Properties of Massless Dirac Fermions in Graphene*. [S.l.]: University of California, Berkeley, 2017.
- [33] REINHARDT, J.; GREINER, W. Quantum electrodynamics of strong fields. *Reports on Progress in Physics*, IOP Publishing, v. 40, n. 3, p. 219, 1977.
- [34] SHYTOV, A. et al. Atomic collapse, lorentz boosts, klein scattering, and other quantum-relativistic phenomena in graphene. *Solid state communications*, Elsevier, v. 149, n. 27-28, p. 1087–1093, 2009.
- [35] ZHANG, F. et al. Band structure of *abc*-stacked graphene trilayers. *Phys. Rev. B*, American Physical Society, v. 82, p. 035409, Jul 2010. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.82.035409>>.
- [36] FANO, U. Effects of configuration interaction on intensities and phase shifts. *Phys. Rev.*, American Physical Society, v. 124, p. 1866–1878, Dec 1961. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRev.124.1866>>.
- [37] MIROSHNICHENKO, A. E.; FLACH, S.; KIVSHAR, Y. S. Fano resonances in nanoscale structures. *Rev. Mod. Phys.*, American Physical Society, v. 82, p. 2257–2298, Aug 2010. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/RevModPhys.82.2257>>.
- [38] JOE, Y. S.; SATANIN, A. M.; KIM, C. S. Classical analogy of fano resonances. *Physica Scripta*, IOP Publishing, v. 74, n. 2, p. 259, 2006.
- [39] ANDERSON, P. W. Localized magnetic states in metals. *Phys. Rev.*, American Physical Society, v. 124, p. 41–53, Oct 1961. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRev.124.41>>.

- [40] RICCO, L. S. et al. Topological isoconductance signatures in Majorana nanowires. 4 2020.
- [41] ÚJSÁGHY, O. et al. Theory of the fano resonance in the stm tunneling density of states due to a single kondo impurity. *Phys. Rev. Lett.*, American Physical Society, v. 85, p. 2557–2560, Sep 2000. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.85.2557>>.
- [42] SAKURAI, J. J.; COMMINS, E. D. *Modern quantum mechanics, revised edition*. [S.l.]: American Association of Physics Teachers, 1995.
- [43] CHRISPIM, B. A. d. S. D. et al. Weyl superconductor with dynamical pseudo-axion field, an interplay between high energy and condensed matter physics. Universidade do Estado do Rio de Janeiro, 2022.
- [44] ODASHIMA, M.; PRADO, B.; VERNEK, E. Pedagogical introduction to equilibrium green's functions: Condensed-matter examples with numerical implementations. *Revista Brasileira de Ensino de Física*, v. 39, p. 2017, 10 2016.
- [45] PHILLIPS, P. *Advanced Solid State Physics*. 2. ed. [S.l.]: Cambridge University Press, 2012.
- [46] BRUUS, H.; FLENSBERG, K. *Many-Body Quantum Theory in Condensed Matter Physics: An Introduction*. OUP Oxford, 2004. (Oxford Graduate Texts). ISBN 9780198566335. Disponível em: <<https://books.google.com.br/books?id=v5vhg1tYLC8C>>.
- [47] HUBBARD, J. Electron correlations in narrow energy bands. *Proc. Roy. Soc. (London), Ser. A*, Vol: 276, 11 1963. Disponível em: <<https://www.osti.gov/biblio/4151988>>.
- [48] AYNAJIAN, P. et al. Visualizing heavy fermions emerging in a quantum critical kondo lattice. *Nature*, Springer Science and Business Media LLC, v. 486, n. 7402, p. 201–206, Jun 2012. ISSN 1476-4687. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1038/nature11204>>.
- [49] KIM, K. et al. Surface to bulk fermi arcs via weyl nodes as topological defects. *Nature Communications*, v. 7, p. 13489, 11 2016.
- [50] HEWSON, A. C. The kondo problem to heavy fermions. (*Cambridge: Cambridge University Press*), 1993.

- [51] MIZOBATA, W. N. et al. Atomic frustrated impurity states in weyl metals. *Phys. Rev. B*, American Physical Society, v. 102, p. 075120, Aug 2020. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.102.075120>>.
- [52] MARQUES, Y. et al. Chiral magnetic chemical bonds in molecular states of impurities in weyl semimetals. *Scientific Reports*, Springer Science and Business Media LLC, v. 9, n. 1, p. 8452, Jun 2019. ISSN 2045-2322. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1038/s41598-019-44842-8>>.
- [53] MADHAVAN, V. et al. Tunneling into a single magnetic atom: Spectroscopic evidence of the kondo resonance. *Science*, American Association for the Advancement of Science, v. 280, n. 5363, p. 567–569, abr. 1998. ISSN 0036-8075.
- [54] KNORR, N. et al. Kondo effect of single co adatoms on cu surfaces. *Phys. Rev. Lett.*, American Physical Society, v. 88, p. 096804, Feb 2002. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.88.096804>>.
- [55] KOSHINO, M.; MCCANN, E. Trigonal warping and berry's phase $n\pi$ in abc-stacked multilayer graphene. *Phys. Rev. B*, American Physical Society, v. 80, p. 165409, Oct 2009. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.80.165409>>.
- [56] UCHOA, B. et al. Localized magnetic states in graphene. *Phys. Rev. Lett.*, American Physical Society, v. 101, p. 026805, Jul 2008. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.101.026805>>.
- [57] PAMUK, B. et al. Magnetic gap opening in rhombohedral-stacked multilayer graphene from first principles. *Phys. Rev. B*, American Physical Society, v. 95, p. 075422, Feb 2017. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.95.075422>>.
- [58] CHAN, K. T.; NEATON, J. B.; COHEN, M. L. First-principles study of metal adatom adsorption on graphene. *Phys. Rev. B*, American Physical Society, v. 77, p. 235430, Jun 2008. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.77.235430>>.
- [59] POTTELBERGE, R. V. et al. Molecular collapse in monolayer graphene. *2D Materials*, IOP Publishing, v. 6, n. 4, p. 045047, 2019.