

UNIVERSIDADE FEDERAL DO PARÁ  
INSTITUTO DE TECNOLOGIA  
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA ELÉTRICA

**Estados ligados de Majorana em nanodispositivo com ponto quântico  
acoplado à cadeia de átomos em zigue zague sobre supercondutor topológico.**

ANTONIO THIAGO MADEIRA BEIRÃO

TD: 17/2018

UFPA / ITEC / PPGEE  
Campus Universitário do Guamá  
Belém-Pará-Brasil  
2018

UNIVERSIDADE FEDERAL DO PARÁ  
INSTITUTO DE TECNOLOGIA  
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA ELÉTRICA

**Estados ligados de Majorana em nanodispositivo com ponto quântico acoplado à cadeia de átomos em zigue zague sobre supercondutor topológico.**

ANTONIO THIAGO MADEIRA BEIRÃO

TD: 17/2018

UFPA / ITEC / PPGEE  
Campus Universitário do Guamá  
Belém-Pará-Brasil  
2018

UNIVERSIDADE FEDERAL DO PARÁ  
INSTITUTO DE TECNOLOGIA  
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA ELÉTRICA

ANTONIO THIAGO MADEIRA BEIRÃO

**Estados ligados de Majorana em nanodispositivo com ponto quântico acoplado à cadeia de átomos em zigue zague sobre supercondutor topológico.**

Tese de doutorado submetida à Banca Examinadora do Programa de Pós-Graduação em Engenharia Elétrica da Universidade Federal do Pará, como requisito para obtenção do título de Doutor em Engenharia Elétrica na área de concentração de Telecomunicações.

Orientador: Prof. Dr. Jordan Del Nero

Co-orientadora: Prof. Dra. Shirsley J. dos S. da Silva

UFPA / ITEC / PPGEE  
Campus Universitário do Guamá  
Belém-Pará-Brasil  
2018

UNIVERSIDADE FEDERAL DO PARÁ  
INSTITUTO DE TECNOLOGIA  
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA ELÉTRICA

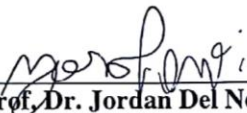
**“ESTADOS LIGADOS DE MAJORANA EM NANODISPOSITIVO COM  
PONTO QUÂNTICO ACOPLADO À CADEIA DE ÁTOMOS EM ZIGUE  
ZAGUE SOBRE SUPERCONDUTOR TOPOLÓGICO”**

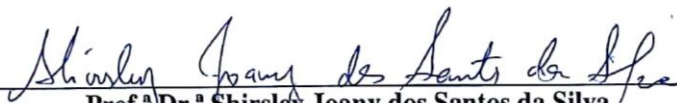
AUTOR: ANTONIO THIAGO MADEIRA BEIRÃO

TESE DE DOUTORADO SUBMETIDA À BANCA EXAMINADORA APROVADA PELO  
COLEGIADO DO PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA ELÉTRICA, SENDO  
JULGADA ADEQUADA PARA A OBTENÇÃO DO GRAU DE DOUTOR EM ENGENHARIA  
ELÉTRICA NA ÁREA DE TELECOMUNICAÇÕES.

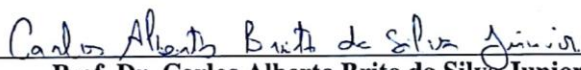
APROVADA EM: 11/10/2018

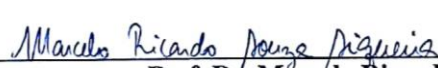
BANCA EXAMINADORA:

  
\_\_\_\_\_  
**Prof. Dr. Jordan Del Nero**  
(Orientador – PPGEE/UFPA)

  
\_\_\_\_\_  
**Prof.ª Dr.ª Shirsley Joany dos Santos da Silva**  
(Co-Orientadora – CANAN/UFPA)

  
\_\_\_\_\_  
**Prof. Dr. Rodrigo Melo e Silva de Oliveira**  
(Avaliador Interno – PPGEE/UFPA)

  
\_\_\_\_\_  
**Prof. Dr. Carlos Alberto Brito da Silva Junior**  
(Avaliador Externo ao Programa – CANAN/UFPA)

  
\_\_\_\_\_  
**Prof. Dr. Marcelo Ricardo Souza Siqueira**  
(Avaliador Externo – UNIFAP)

VISTO:

\_\_\_\_\_  
**Prof.ª Dr.ª Maria Emília de Lima Tostes**  
(Coordenadora do PPGEE/ITEC/UFPA)

Dados Internacionais de Catalogação na Publicação (CIP)  
Sistema de Bibliotecas da Universidade Federal do Pará  
Gerada automaticamente pelo módulo Ficat, mediante os dados fornecidos pelo(a) autor(a)

---

- M181e Madeira Beirão, Antonio Thiago  
Estados ligados de Majorana em nanodispositivo com ponto quântico acoplado à cadeia de átomos em zigue zague sobre supercondutor topológico / Antonio Thiago Madeira Beirão. — 2018  
101 f. : il. color
- Tese (Doutorado) - Programa de Pós-graduação em Engenharia Elétrica (PPGEE), Instituto de Tecnologia, Universidade Federal do Pará, Belém, 2018.  
Orientação: Prof. Dr. Jordan Del Nero  
Coorientação: Profa. Dra. Shirsley Joany dos Santos da Silva.
1. Supercondutor topológico ou p-wave. 2. Estados ligados de Majorana (MBS). 3. Método analítico das funções de Green no equilíbrio. 4. Ponto quântico. 5. Qubit. I. Del Nero, Jordan, *orient.* II. Título

CDD 621.35

---

**Dedicatória**

Aos meus pais: Antonio Beirão (in memorian) e Deolinda Madeira. E para minha pequenina  
Maria Sofia da Silva Madeira Beirão.

## AGRADECIMENTOS

À Deus por me auxiliar em toda minha jornada. Que a luz e a paz estejam sempre com todos nós.

Aos meus amados pais, Deolinda Maria da Costa Madeira e Antonio José Beirão (in memoriam). Sou o fruto do amor de vocês e agradeço todos os dias por isso. Humildemente muito obrigado por todo incentivo fornecido. Amo muito vocês e saudades eternas meu pai.

Aos meus irmãos, Kléber Madeira e Patrick Madeira. Obrigado pelo amor e amizade.

À Katiane Pereira da Silva pelo auxílio na submissão do artigo para a revista “Journal computational Electronics - JCEL (Qualis A<sub>2</sub>).”

Ao nascimento de Maria Sofia da Silva Madeira Beirão e alegria de ser pai. Que o divino mestre sempre esteja contigo minha filha, papai te ama eternamente. Que ninguém, absolutamente ninguém, destrua a união entre pai e filha.

Ao Professor Dr. Jordan Del Nero (orientador da tese), por todo suporte que tem me oferecido ao longo da orientação do doutorado. Sou eternamente grato!

À professora Dra. Shirsley Silva (co-orientadora da tese) por toda ajuda durante esses 4 anos.

À Companhia Vale do Rio Doce e a Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal do Nível Superior por financiar integralmente parte das atividades deste trabalho.

À Universidade Federal do Pará (UFPA), referência em ensino, pesquisa e extensão na Amazônia.

À Coordenação do PPGEE – UFPA e a todos que trabalham na secretaria desta pós-graduação. Muito obrigado por tudo.

À todos os colegas do grupo de pesquisa que estou inserido e coordenado pelo prof. Dr Jordan Del Nero. Em especial, deixo um abraço fraterno na professora Dra Shirsley da Silva por toda sua colaboração neste trabalho e amizade.

Aos professores e funcionários do Instituto de Tecnologia e do Programa de Pós-Graduação em Engenharia Elétrica da UFPA, pela contribuição decisiva na minha formação intelectual e profissional.

Aos meus grandes amigos Alexandre Oliveira, Luciano Almeida, Welliton Oliveira. Paz e luz a todos.

À todos aqueles que contribuíram de algum modo para a realização deste trabalho.

## SUMÁRIO

<b>LISTAS DE FIGURAS.....</b>	<b>x</b>
<b>RESUMO.....</b>	<b>11</b>
<b>ABSTRACT.....</b>	<b>12</b>
<b>CAPÍTULO 1: INTRODUÇÃO .....</b>	<b>13</b>
<b>1.1 Introdução .....</b>	<b>13</b>
<b>CAPÍTULO 2: FUNDAMENTOS TEÓRICOS .....</b>	<b>17</b>
<b>2.1 Pontos quânticos (PQs).....</b>	<b>17</b>
<b>2.2 O formalismo de funções de Green para pontos quânticos .....</b>	<b>19</b>
<b>2.3 A equação de movimento de Heisenberg .....</b>	<b>22</b>
<b>2.4 Férmions de Majorana .....</b>	<b>23</b>
<b>2.5 A cadeia de átomos em zigue zague.....</b>	<b>25</b>
<b>2.6 Fase Topológica: Casos limitantes .....</b>	<b>27</b>
<b>2.6.1 Fase topológica trivial (<math>\mu \neq 0</math> e <math>h_\alpha = \Delta_\alpha = 0</math>).....</b>	<b>28</b>
<b>2.6.2 Fase topológica (<math>\mu = 0</math> e <math>h_\alpha = \Delta_\alpha \neq 0</math>) .....</b>	<b>28</b>
<b>2.7 O hamiltoniano do sistema: Ponto quântico acoplado a cadeia de átomos em zigue zague. ....</b>	<b>29</b>
<b>Capítulo 3: METODOLOGIA.....</b>	<b>33</b>
<b>3.1 A equação da condutância, transmitância e densidade de estados para o modelo proposto.....</b>	<b>33</b>
<b>3.2 A função de Green exata .....</b>	<b>33</b>
<b>3.3 A função de Green do ponto quântico com 1 sítio na cadeia de átomos em zigue zague .....</b>	<b>34</b>
<b>3.4 A função de Green do ponto quântico com 2 sítios na cadeia de átomos em zigue zague. ....</b>	<b>41</b>
<b>3.5 Equações no domínio da frequência para o sistema contendo 2 sítios.....</b>	<b>49</b>



3.6 O formalismo matricial para as equações no domínio da frequência para o sistema contendo 2 sítios. ....	50
3.7 A função de Green do ponto quântico com 3 sítios na cadeia de átomos em zigue zague. ....	57
3.8 Equações no domínio da frequência para o sistema com 3 sítios .....	65
3.9 O formalismo matricial para equações no domínio da frequência para o sistema contendo 3 sítios. ....	67
3.10 O conjunto de equações matriciais generalizadas para $n$ sítios .....	73
3.11 A função de Green exata para o modelo contendo 5 sítios .....	74
<b>Capítulo 4: RESULTADOS</b> .....	78
4.1 A densidade de estados LDOS para o caso da fase topológica e situação topológica mais geral na cadeia de átomos em zigue zague. ....	78
4.2 A transmitância para o caso da fase topológica e situação topológica mais geral na cadeia de átomos em zigue zague. ....	80
4.3 A condutância para o caso da fase topológica e situação topológica mais geral na cadeia de átomos em zigue zague. ....	82
<b>Capítulo 5: CONCLUSÕES E PERSPECTIVAS</b> .....	86
5.1 Conclusões .....	86
5.2 Perspectivas .....	87
<b>Referencias</b> .....	88
<b>Anexo – Publicação na <i>Journal computational of Electronics</i></b> .....	92

## LISTAS DE FIGURAS

Figura 1:	Representação da cadeia de átomos em zigue zague proposta por Kraus et al, sendo $\Delta_1, h_1$ e $\Delta_2, h_2$ os fatores de amplitudes de pareamento e hoppings, respectivamente. Além disso $C_{2i-1}$ e $C_{2i}$ correspondem os operadores de Majorana presentes em cada sítio e, $c_{A,1}$ e $c_{B,1}$ os modos de Majorana desemparelhados nas extremidades da cadeia.	14
Figura 2:	Exemplo de ponto quântico: À esquerda tem-se um ponto quântico e, a direita, uma micrografia eletrônica	18
Figura 3:	Modelo esquemático de um ponto quântico acoplado a eletrodos com seus acoplamentos $\Gamma_F$ e $\Gamma_D$ .	20
Figura 4:	Pesquisadores da universidade de Princeton utilizaram um microscópio de varredura de tunelamento para obter imagem experimentalmente detecção de férmions de Majorana.	25
Figura 5:	Diagrama representando a diferença entre a fase trivial e a fase topológica.	27
Figura 6:	Esboço 1D p-wave supercondutora de Kitaev numa cadeia <i>tight binding</i> . Em (a), os operadores fermiônicos em cada sítio $i$ da cadeia podem ser divididos em dois operadores de Majorana, $\gamma_{Ai}$ e $\gamma_{Bi}$ . E em (b), no limite $\mu = 0$ , $\hbar = \Delta$ , o hamiltoniano é diagonal em operadores fermiônicos que são obtidos pela combinação de operadores de Majorana em sítios vizinhos	29
Figura 7:	Modelo proposto - Ponto quântico, de apenas um nível, acoplado a dois leads com respectivos acoplamentos $\Gamma_F$ e $\Gamma_D$ , conectado a uma cadeia de átomos em zigue zague de $L$ sítios por uma constante de acoplamento $\lambda$ , onde a cadeia está sobre um substrato supercondutor topológico com pareamento p-wave. Além disso, $C_{2i-1}$ e $C_{2i}$ são os operadores de Majorana que estão em cada sítio; $c_{A,1}$ e $c_{B,1}$ são MBS nas extremidades da cadeia. As constantes de acoplamento interna à cadeia são dadas por $\mathbf{h}_\alpha, \Delta_\alpha$ , denominadas hopping e parâmetro de Cooper, respectivamente. E $\alpha$ é um parâmetro que designa o tipo de fator de acoplamento envolvido na cadeia, isto é, para $\alpha = 1$ tem-se acoplamentos $h_1 \Delta_1$ (cor amarela na diagonal) e $\alpha = 2$ tem-se acoplamentos $h_2 \Delta_2$ (cor roxa na horizontal).	30
Figura 8:	Interação eletrônica entre os 5 sítios da cadeia em zigue zague representada pelas matrizes de acoplamento $\mathbf{K}$ , $\mathbf{H}$ , $\mathbf{J}$ e $\mathbf{S}$ .	31

- Figura 9a: LDOS com parâmetros fixos  $\varepsilon_d = -5$  e  $\Gamma_R = \Gamma_L = \Gamma/2$  e acoplamento entre PQ e a cadeia ( $\lambda$ ) e amplitude de pareamento ( $\Delta$ ) variando de acordo com  $\lambda = 0$  e  $\Delta = 5$  (cor preta);  $\lambda = 5$  e  $\Delta = 0$  (cor vermelha) e  $\lambda = 6.5$  e  $\Delta = 5$  (cor azul). 78
- Figura 9b: LDOS com parâmetros fixados em  $\varepsilon_d = -5$  e  $\Gamma_R = \Gamma_L = \Gamma/2$  na STG para três, quatro e cinco sítios com acoplamentos sintonizados em  $\varepsilon_d = -5$ ,  $\Gamma = 1.2$ ,  $\Delta_\alpha = 0.2h_\alpha$ , variando numericamente  $\lambda$  e  $h_\alpha$ . 79
- Figura 9c: Cálculo da transmitância na FT ( $h_\alpha = \Delta_\alpha = \Delta = h$ ) para 3 sítios com parâmetros sintonizados em  $\Gamma = 0.9$ ,  $\lambda = 2.8$ ,  $\Delta = 0.45$ ; 4 sítios com  $\Gamma = 0.45$ ,  $\lambda = 1.45$ ,  $\Delta = 0.6$ ; 5 sítios com  $\Gamma = 0.7$ ,  $\lambda = 1.5$ ,  $\Delta = 1.11$ . 80
- Figura 9d: Transmitância na STG ( $\mu = 0$  and  $h_\alpha \neq \Delta_\alpha$ ),  $\varepsilon_d = 0$  E  $\Delta_\alpha = 0.2h_\alpha$  calculada para 3 sítios com parâmetros  $\Gamma = 0.7$ ,  $\lambda = 1.7$ ,  $h = 0.175$ ; 4 sítios com  $\Gamma = 0.43$ ,  $\lambda = 1.6$ ,  $h = 0.325$ ; 5 sítios com  $\Gamma = 0.52$ ,  $\lambda = 1.45$ ,  $h = 0.65$ . 80
- Figura 10: Condutância do modelo proposto na STG contendo cinco sítios com parâmetros fixados em  $\varepsilon_d = -3$ ;  $\Gamma = 1$ ;  $\lambda = 8.5\Gamma$ . (a) Variando amplitude de pareamento e hopping com  $\Delta = 0.5$  e  $h = 2.5$  (cor preta); (b) Amplitude de pareamento e hopping sintonizados em  $\Delta = 1.0$  e  $h = 5.0$  (cor vermelha); (c) Amplitude de pareamento e hopping sintonizado em  $\Delta = 1.5$  e  $h = 7.5$  (cor azul). 81
- Figura 11: Condutância do modelo contendo cinco sítios com parâmetros fixados e sintonizados em  $\varepsilon_d = 1$ ,  $\Delta = 0.5$ ,  $\Gamma = 1$ . (a) Hopping variando de acordo com  $h = \Delta/0.1$  e acoplamento dot-cadeia sintonizado em  $\lambda = 3.5$  e  $\lambda = 7.5$ . (b) Hopping variando de acordo com  $h = \Delta/0.2$  e acoplamento sintonizado em  $\lambda = 3.5$  e  $\lambda = 6.5$ . 82
- Figura 12: Condutância do modelo contendo cinco sítios com parâmetros sintonizados e fixados em  $\varepsilon_d = 0$ ,  $\Gamma = 1$  e parâmetro de Cooper  $\Delta = 2$ . (a) Variando hopping em  $h = 0.4$  e o acoplamento PQ-cadeia em  $\lambda = 2h$ . (b) Variando hopping em  $h = 0.6$  e o acoplamento PQ-cadeia em  $\lambda = 2h$ . (c) Variando hopping em  $h = 0.8$  e acoplamento PQ-cadeia em  $\lambda = 2h$ . 83

## RESUMO

A pesquisa em física da matéria condensada com isolantes e supercondutores topológicos tem contribuído muito para a caracterização das propriedades de superfície e de modos zero em nanofios. Investigamos teoricamente o transporte de elétrons através do ponto quântico em forma de T (PQ) com um único nível e *spinless*, conectado a uma cadeia em zigue zague e acoplado a um supercondutor p-wave, utilizando o método analítico recursivo de funções de Green no equilíbrio. Este modelo é uma extensão da cadeia de Kitaev para uma rede triangular de tamanho finito com três, quatro e cinco sítios. Observamos que modos zero de Majorana podem ser sintonizados através dos parâmetros de acoplamento do dispositivo e a condutância linear mostra ambos os Estados Ligados de Majorana (MBS) na fase topológica e na fase topológica geral maximamente robusta. Este modelo mais realista permite a detecção de MBS através do controle dos parâmetros que governam o tunelamento eletrônico e pode ser útil para experimentos relevantes.

**PALAVRAS-CHAVES:** Estados ligados de Majorana (MBS), Método analítico recursivo de funções de Green no equilíbrio, Ponto quântico, T-shaped, Qubit.

## ABSTRACT

The research in condensed matter physics with insulators and superconductors topological has contributed greatly to the characterization of the surface properties and modes zero in nanowires. We investigate theoretically, through the recursive Green's function approach, the electron transport through the T-shaped quantum dot (PQ) with a single level and spinless, connected to a zigzag chain and coupled to a p-wave superconductor. This model is an extension of the Kitaev chain for a network triangular of finite-size with for three, four, and five sites. We find that the Majorana zero modes can be tuned through the coupling parameters of the device and the linear conductance show both the Majorana Bound States (MBS) in topological phase and in the general topological phase maximally robust. This more realistic model allows the detection of MBS through of the control of the parameters governing the electronic tunneling and can be helpful for relevant experiments.

**Keywords:** Majorana Fermions, recursive Green's function approach, Kitaev chain, class of electronic nanodevices, Quantum Dot, T-shaped, Qubit, Majorana Bound States (MBS).

## CAPÍTULO 1: INTRODUÇÃO

“O livro do mundo está escrito em linguagem matemática”  
(Galileu Galilei)

### 1.1 Introdução

A física de estado sólido tem proporcionado vários estudos acerca de sistemas que incluem semicondutores e, estes, estimularam a revolução eletrônica de novos dispositivos logo após o fim da segunda guerra mundial [1]. Além disso, o desenvolvimento de sistemas com semicondutores nanoscópicos proporcionaram novos campos para a pesquisa em física básica e, que conseqüentemente, levaram a uma nova fase de desenvolvimento na moderna indústria eletrônica.

Do ponto de vista relevante, a pesquisa básica nesta área, tem por intuito melhorar o nosso entendimento sobre os sistemas quânticos. Todavia, do ponto de vista aplicado, o conhecimento obtido terá utilidade fundamental no desenvolvimento de novos nanodispositivos [1].

Uma nova classe de dispositivos vem atraindo o interesse de pesquisadores na última década. Estes se baseiam em propriedades exóticas de quasipartículas denominados férmions de Majorana, previstas teoricamente por Ettore Majorana em 1937 ao propor soluções reais para a equação de Dirac [1].

Sabemos que um elétron com carga negativa ao se encontrar com um pósitron, sua antipartícula com carga positiva, se aniquilam mutuamente gerando emissão de raios gama. Ou seja, desde o século XX, os pesquisadores sabem que para cada partícula tem-se sua antipartícula associada, porém com carga oposta. E desta maneira, Ettore Majorana imaginou: “E se uma partícula fosse sua própria antipartícula?”. A resposta para esse problema é que elas não se aniquilariam em contato devido ambas serem ao mesmo tempo partícula e antipartícula.

Férmions de Majorana tem sido procurado exaustivamente e, com isso, na última década, físicos acreditaram que eles pudessem ser encontrados em sistemas de estado sólido. Portanto, onde podemos encontrar estas partículas exóticas? Existindo chance de observar férmions de Majorana em sistemas de estado sólido, esta deve existir em forma de excitações não triviais. Um ponto a se destacar é que em supercondutores, pares de férmions oferecem uma possibilidade real para a busca destas excitações. Nestes materiais existem um análogo de matéria e antimatéria: Os elétrons (negativo) e as lacunas (positivo), um desaparecendo ao se

encontrar com o outro. Isto é, da mesma maneira que partículas e antipartículas não podem coexistir, elétrons e lacunas também não [2].

Com isso, a comunidade científica de física da matéria condensada adentrou em uma busca exaustiva por férmions de Majorana em sistemas de estado sólido com interesse em investigações acerca de física básica e também em aplicações para estes sistemas, tais como em computação quântica, pois quando duas destas partículas exóticas estão em movimentos um em relação ao outro, cada um deles mantém sua memória da sua posição anterior e isto permitiria a construção de computadores quânticos estáveis e imunes a influência externa [2].

Ademais, férmions de Majorana não são partículas ou pequenas quantidades de matéria no sentido que são considerados os elétrons ou neutrinos. Eles são quasipartículas como os plásmos de superfície, todavia se comportam como uma partícula autêntica e, isto, permite sua detecção [1].

A detecção experimental de férmions de Majorana foi realizada 77 anos após sua proposição feita por Ettore Majorana. Ou seja, em 2014, pesquisadores americanos da Universidade de Princeton, liderados pelo professor Dr. Ali Yazdani, seguindo a tese de doutorado do físico de nacionalidade russa Alexei Kitaev, obtiveram assinaturas de férmions de Majorana utilizando um microscópio de varredura de tunelamento sobre um sistema composto de uma cadeia fina de átomos de ferro sobre um supercondutor de chumbo [3-4].

O presente trabalho está baseado em duas outras pesquisas relevantes à sistemas em estado sólido. Um dos trabalhos é indexado em revista de periódico de nível internacional, de autoria: C. V. Kraus, *et. al.*, intitulado: “*Preparing and probing atomic Majorana fermions and topological order in optical lattices*”, publicado no ano de 2012 no *New Journal of Physics* [5].

De acordo com C. V. Kraus, *et. al.* é proposto um sistema contendo uma cadeia de átomos em zigue zague, onde neste contém duas cadeias de Kitaev acopladas por diferentes amplitudes de pareamento e *hoppings*,  $\Delta_1, h_1$  e  $\Delta_2, h_2$ , respectivamente. A Figura 1 a seguir exhibe a cadeia de átomos em zigue zague [5] e esta representa uma extensão do modelo de Kitaev que será descrita na seção 2.5. E desta forma, a utilizaremos a fim de fazer parte de nosso modelo proposto, com intuito de detecção de Majorana sobre a cadeia de átomos com três, quatro e cinco sítios.

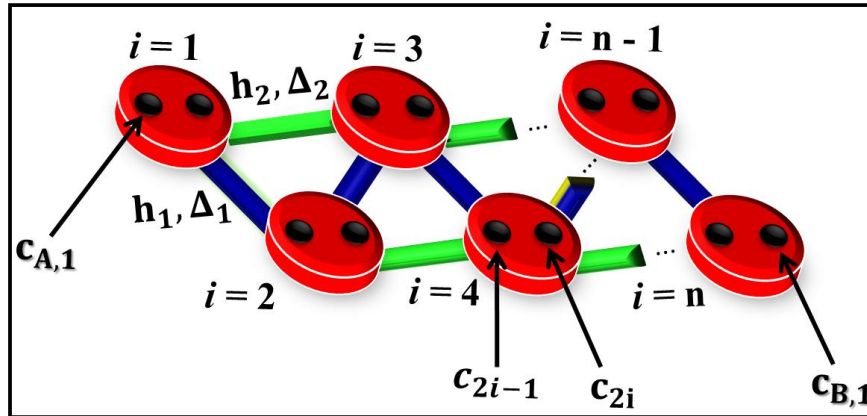


Figura 1: Representação da cadeia de átomos em zig-zague proposta por Kraus et al [5], sendo  $\Delta_1, h_1$  e  $\Delta_2, h_2$  os fatores de amplitudes de pareamento e hoppings, respectivamente. Além disso  $C_{2i-1}$  e  $C_{2i}$  correspondem os operadores de Majorana presentes em cada sítio  $i$ ,  $c_{A,1}$  e  $c_{B,1}$  os modos de Majorana desemparelhados nas extremidades da cadeia.

Outro trabalho que esta tese foi baseada, é o artigo publicado no periódico *Physical Review B* em 2011 com autoria de Dong E. Liu e Harold U. Baranger, intitulado “*Detecting a Majorana-Fermion Zero Mode Using a Quantum Dot*”. Neste artigo, os autores propõem um modelo contendo dois eletrodos conectados a um ponto quântico *spinless* acoplado a um nanofio com MBS presente em suas extremidades. Ademais, os autores calcularam a função espectral  $A(\omega)$  do modelo variando, por exemplo, os acoplamentos entre PQ-fio ( $\lambda$ ) e PQ-eletrodos ( $\Gamma$ ) e também variando o acoplamento entre os dois estados ligados de Majorana presentes nas extremidades do nanofio ( $\epsilon_M$ ) a fim de detectar MBS exatamente quando  $A(\omega = 0) = \frac{1}{2}$ .

Baseado nos dois trabalhos citados e na relevância experimental pautada nas técnicas de *ultra-cold atoms* [6-7] e *Mechanical Break Junction* (MBJ) [8-10] em estruturas de nanofios, propomos uma nova classe de nanodispositivos: Eletrodos em contato com ponto quântico de único nível (PQ) [11-12] acoplado a um nanofio de átomos em zig-zague sobre um supercondutor topológico (TS) (ver Figura 7). O ponto quântico (PQ) é um possível candidato para detectar MBS [3,13-14].

O estudo do transporte quântico através de PQ acoplado a MBS (PQ-MBS) é estendido a configurações de sistemas do tipo "estrutura PQ em forma de T" [15]. Mais recentemente, o estudo do transporte quântico através de (PQ-MBS) foi estendido para sistemas multi-PQ [16].

Investigamos um tipo específico de arranjo com geometria triangular em zig-zague. Neste caso, adicionar um ou mais sítios à cadeia em zig-zague produz triângulos acoplados e invertidos (modos quirais) [5]. Neste trabalho consideramos uma cadeia em zig-zague e a influência desta rede triangular para o surgimento de modos de Majorana desemparelhados,



correspondendo a uma representação tight-binding de uma cadeia 1D sobre um supercondutor topológico.

Neste sistema calculamos a função de Green exata do sistema  $G_{d_0 d_0}^r$  e, posteriormente, plotamos os gráficos da densidade de estados eletrônica (LDOS), transmitância e condutância do sistema a fim de detectar férmions de Majorana sobre o nanofio.

Nossos cálculos foram realizados no limite termodinâmico e no contexto das funções de Green [13,17], focando os efeitos de tamanho finito através de parâmetros livres do modelo para três, quatro e cinco sítios, além de prever para  $n$  sítios. De fato, realizamos cálculos sob condições de temperaturas muito baixas e pequenas diferenças de potencial [18] de forma que a temperatura quase não afeta a curva de condutância e preserva os efeitos quânticos.

O presente trabalho obedece a organização descrita a seguir: No capítulo 2 foi realizada uma introdução dos conceitos básicos sobre o tema investigado. Neste capítulo abordamos sobre pontos quânticos, o formalismo de funções de Green, a equação de Heisenberg, férmions de Majorana, a cadeia de átomos em zigue zague, fase topológica e o hamiltoniano do sistema estudado. No capítulo 3 apresentamos a metodologia utilizada nesta pesquisa, isto é, o cálculo da função de Green exata via formalismo recursivo de funções de Green. Obtemos  $G_{d_0 d_0}^r$  para um, dois e três sítios e generalizamos o conjunto de equações matriciais que descrevem o modelo proposto (ver Figura 7) para  $n$  sítios. No capítulo 4 mostramos os resultados, destacando-se os gráficos plotados da transmitância, condutância e densidade de estados para diferentes valores de parâmetros de acoplamento. Neles obtemos assinaturas de férmions de Majorana. E no capítulo 5, apresentamos as conclusões a respeito dos resultados e perspectivas de trabalhos futuros.

## CAPÍTULO 2: FUNDAMENTOS TEÓRICOS

“A natureza é um enorme jogo de xadrez disputado por deuses, e que temos o privilégio de observar. As regras do jogo são o que chamamos de física fundamental, e compreender essas regras é a nossa meta”  
(Richard Feynman)

Neste capítulo trataremos de alguns conceitos fundamentais relacionados a este trabalho. Dentre alguns, destacam-se o ponto quântico (*Quantum dots, PQs.*), férmions de Majorana (FM), a cadeia de átomos em zigue zague e o hamiltoniano do sistema. A pesquisa em sistemas quânticos é relevante pela sua característica multidisciplinar, ou seja, estes sistemas proporcionam aplicabilidade na física e na engenharia, com desenvolvimento de nanodispositivos nestas respectivas áreas.

### 2.1 Pontos quânticos (PQs)

Desde 1947, após a demonstração do efeito transistor por J. Bardeen e W. Brattain em um cristal de germânio, os materiais semicondutores tem sido os responsáveis por inúmeros avanços, seja no desenvolvimento de novas tecnologias ou na área de pesquisa científica básica. Muitos destes avanços ocorreram a partir do aparecimento de estruturas híbridas por volta de 1970, as chamadas heteroestruturas, que são junções de materiais semicondutores diferentes.

Um ponto quântico [19-21] é um semicondutor cujos éxcitons são confinados em todas as três dimensões espaciais. Foram descobertos no início da década de 1980 por Alexei Ekimov e, além disso, o termo *Quantum Dot* foi cunhado por Mark Reed. Pesquisadores têm estudado os pontos quânticos em transistores, células solares, LEDs e lasers de diodo. Eles também investigaram os PQs como agentes para imagens médicas e esperam usá-los como *qubits* [1].

Pontos quânticos são estruturas com dimensões reduzidas para valores da ordem de nanômetros, que resultam no confinamento dos portadores de cargas nas três dimensões espaciais [1,13,19]. O confinamento tridimensional propicia aos PQs estados eletrônicos semelhantes a átomos, com níveis de energias discretos. O confinamento causa uma mudança na densidade de estados de energia para cada dimensão que esteja sobre confinamento.

As características físico-químicas de um semicondutor só variam com a redução do seu tamanho. Quando estes atingem dimensões nanométricas, encontram-se em regime de confinamento quântico. A partir daí propriedades como temperatura de transição de fase, condutividade elétrica, absorção eletrônica tornam-se dependentes do tamanho do material [22].

As propriedades dos pontos quânticos e as suas possíveis aplicações dependem grandemente do método por que são obtidos, que por sua vez podem ser usados como critério de classificação [23].

- Pontos quânticos eletrostáticos: Fabricados por meio da restrição de um gás eletrônico bidimensional numa heteroestruturas semicondutora, confinando elétrons.
- Pontos quânticos auto-organizados: Obtidos pelo crescimento heteroepitaxial de materiais distintos. Durante o crescimento da camada de um material sobre o outro, formam-se picos (*ilhas*) nanoscópicos que causam o confinamento dos elétrons nessa região.
- Pontos quânticos nanocristalinos: Constituídos por um núcleo de metais pesados como seleneto de cádmio (CdSe), estas nanopartículas, também denominadas pontos quânticos coloidais, são sintetizadas por via química.

Para obter um ponto quântico é necessária a junção de dois materiais semicondutores (por exemplo, na Figura 2 apresentamos a junção de  $AlGaAs$  e  $GaAs$ ) de *gaps* diferentes que serão unidos, em escala atômica, provocando a descontinuidade nas bandas de energia da estrutura resultante. Assim, a finalidade é confinar elétrons numa pequena região do espaço (digamos eixo  $z$ ), cujos níveis de energia serão quantizados na direção de crescimento enquanto que os elétrons ficam livres para moverem nas outras duas direções (plano  $xy$ ) [1].

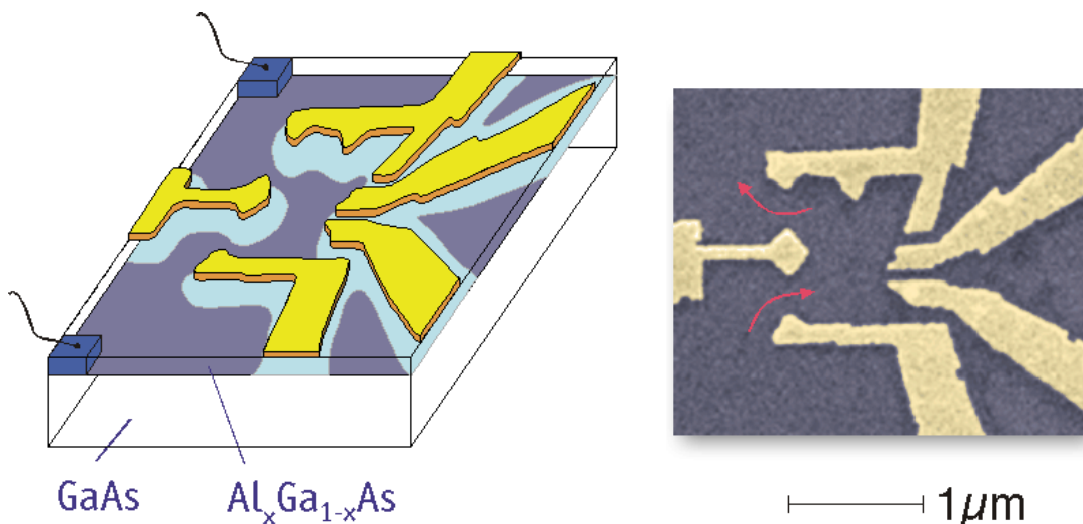


Figura 2: Exemplo de ponto quântico: À esquerda tem-se um ponto quântico e, a direita, uma micrografia eletrônica [5].

Diversas metodologias já foram usadas para criar estruturas com PQs. A criação de uma máscara posteriormente gravada na estrutura semicondutora foi um dos primeiros métodos implementados [24]. Os principais problemas deste método são a baixa resolução lateral e os defeitos criados. Outra possibilidade, também envolvendo o uso de máscaras, permite que a nucleação só ocorra em determinadas posições, resultando em pirâmides tetraédricas ou hexagonais [25].

Com o desenvolvimento e aprimoramento das técnicas para fabricação de pontos quânticos, como a epitaxial por feixe molecular ou MBE (*molecular beam epitaxy*), tornou-se possível o crescimento de camadas monoatômicas individuais uma após outra, produzindo redes cristalinas artificiais e interfaces quase perfeitas [26]. Desta maneira, a produção e desenvolvimento de pontos quânticos estão relacionados a construção de dispositivos eletrônicos e fabricação de novos dispositivos eletrônicos, assim como a miniaturização desses. Isto é, suas aplicabilidades na engenharia são essenciais para indústria.

## 2.2 O formalismo de funções de Green para pontos quânticos

Propriedades de transporte em sistemas com estrutura em escala nanométricas, tais como pontos quânticos (PQs), tem fornecido grande interesse à ciência [27-29] e, em especial, a física e a engenharia, principalmente pelo fato de se poder manipular de forma controlada a ocupação dos portadores de carga destas estruturas por meio de voltagens externas.

As estruturas das amostras (hipotética) de materiais semicondutores são construídas de forma que uma região da amostra seja espacialmente confinada em todas as dimensões espaciais, embora conectada ao restante do material por meio de barreiras de tunelamento ressonante eletrostaticamente definidas, no qual permite a passagem de corrente eletrônica pelo sistema quando há aplicação de uma diferença de potencial [30].

Além disso, o confinamento espacial e a discretização do espectro de energia, influenciam de forma significativa nas propriedades de transporte nos pontos quânticos [31]. Em uma ilha metálica, a densidade eletrônica maior, em geral, do que uma ilha semicondutora, o espectro de energia pode ser tratado como contínuo e sua separação média entre níveis de partícula única  $\Delta E_m$  é quase desprezível; já em uma ilha semicondutora,  $\Delta E_m$  se torna um parâmetro fundamental no estudo de suas propriedades de transporte [31].

O transporte quântico eletrônico não linear em dispositivos nanoscópicos tem apresentado interesse relevante na área experimental e teórica. Desta maneira, o transporte não linear tem proporcionado interesse na área de eletrônica molecular, favorecendo a possibilidade

de utilizar moléculas como diodos, transistores ou interruptores. Todavia, no âmbito teórico, o transporte eletrônico não linear tem fornecido avanços fundamentais em relação a processos elásticos. Estes notáveis avanços têm sido possíveis a dois excelentes formalismos: O de matrizes de espalhamentos (Landauer) e o formalismo de funções de Green [32], sendo o segundo utilizado neste trabalho.

O formalismo de funções de Green nos evidencia uma ferramenta no qual os novos fenômenos apresentam uma descrição mais natural. Além disso, este formalismo tem a vantagem de nos permitir empregar inúmeras ferramentas próprias da teoria de campos (segunda quantização) [32] e, calcular diversas grandezas físicas, tais como: condutância, LDOS e corrente, em sistemas mesoscópicos.

Na Figura 3, apresentamos de forma esquemática o hamiltoniano do modelo: Ponto quântico – eletrodos. Desta forma, o modelo é decomposto em duas partes: Uma região central onde os elétrons interagem, e os fios que conectam esta região aos reservatórios [32].

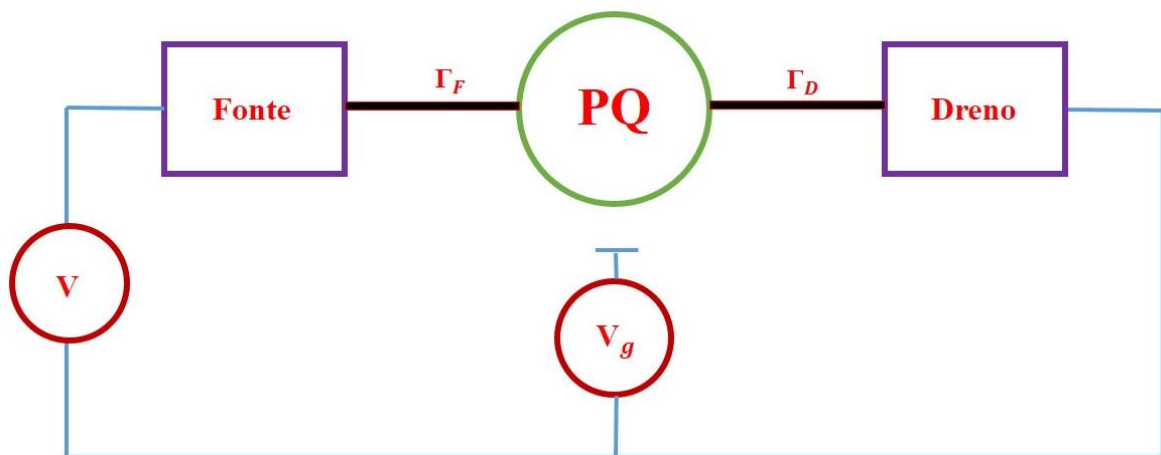


Figura 3: Modelo esquemático de um ponto quântico acoplado a eletrodos com seus acoplamentos  $\Gamma_F$  e  $\Gamma_D$ .

Na Figura 3, os eletrodos da esquerda e da direita funcionam como emissor e receptor de elétrons, respectivamente. O terceiro eletrodo se acopla capacitivamente ao ponto quântico, permitindo variar a sua energia eletrostática através da tensão de porta  $V_g$ . Dessa forma, pode-se mudar a posição dos níveis de energia do ponto quântico. Na presença de uma tensão  $V$  há um desequilíbrio nos potenciais químicos dos eletrodos, favorecendo o surgimento de uma corrente de tunelamento nas junções do modelo ponto quântico-eletrodos [33].

Com isso, o hamiltoniano do sistema proposto é dado pelos termos:

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_L + \mathcal{H}_D + \mathcal{H}_{DL} \quad (1)$$

Sendo o hamiltoniano que descreve os elétrons nos eletrodos dado por [1]:

$$\mathcal{H}_L = \sum_{k\alpha} \epsilon_k c_{k\alpha}^\dagger c_{k\alpha} \quad (2)$$

este descreve os eletrodos esquerdo e direito com potencial químico  $\mu_L = 0$ . Sendo que  $c_{k\alpha}^\dagger$  ( $c_{k\alpha}$ ) são operadores fermiônicos de criação (aniquilação), que seguem as regras de anticomutação [32]:

$$\begin{aligned} \{c_{k\alpha}^\dagger, c_{k'\alpha'}\} &= \delta_{kk'} \delta_{\alpha\alpha'}, \\ \{c_{k\alpha}, c_{k'\alpha'}\} &= \{c_{k\alpha}^\dagger, c_{k'\alpha'}^\dagger\} = 0 \end{aligned} \quad (3)$$

Os elétrons do fio  $\alpha$  estão em equilíbrio térmico com o reservatório em que está conectado, onde este tem temperatura  $T$  e potencial químico  $\mu$ . Pode-se escolher as temperaturas dos reservatórios iguais, mas não é obrigatório. No estudo de transporte de calor a escolha de temperaturas distintas tem por finalidade o desequilíbrio da região central [32]. O hamiltoniano da região central é [1]:

$$\mathcal{H}_D = \epsilon_d d^\dagger d, \quad (4)$$

que descreve o PQ com um nível de energia sintonizável  $\epsilon_d$ . Sendo que  $d^\dagger$  ( $d$ ) cria (aniquila) um elétron no estado  $\mu$  de uma base qualquer da região central [32].

Como  $\mathcal{H}_D$  é bilinear, as interações elétron-elétron são levadas em consideração apenas na aproximação de campo médio [1,32]. Com isso, o cálculo da condutância simplifica-se de forma significativa. Todavia, esta aproximação não descreve processos de flutuações de carga e muito menos correlações eletrônicas, fazendo com que seja excluído, o tratamento de fenômenos do tipo bloqueio de Coulomb e efeito Kondo [32]. Sabendo de tais limitações, é natural questionar a veracidade e utilidade real deste modelo, entretanto, através do estudo de correlações fortes [34-36], tendo como resposta que o modelo é realista, desde que o condutor esteja bem acoplado a vários modos em cada fio [32]. Sem grandes pormenores, isso implica que a condutância seja maior que  $2e^2/h$ . Além disso, o  $\mathcal{H}_D$  também exclui processos inelásticos, ou seja, esta é uma limitação do modelo, mas não do formalismo das funções de Green [36,37].

Até o momento, o modelo descrito é composto por fios em equilíbrio térmico com os respectivos reservatórios e uma região central isolada [32]. O hamiltoniano que descreve o acoplamento entre o ponto quântico e os eletrodos é dado por [1]:

$$\mathcal{H}_{DL} = \sum_{k\alpha} V_{k\alpha} (c_{k\alpha}^\dagger d_0 + d_0^\dagger c_{k\alpha}). \quad (5)$$

Em pontos quânticos os elementos de matriz  $V_{k\alpha}$  que descrevem o acoplamento entre os fios e a região central são denominados parâmetros livres [32].

### 2.3 A equação de movimento de Heisenberg

Na representação de Schrodinger, os operadores que correspondem aos observáveis físicos do sistema são independentes do tempo. A evolução do sistema está contida no vetor de estado  $|\psi_S(t)\rangle$ , e é obtida pela equação [38]:

$$\left( i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi_S(t)\rangle \right) = H_S |\psi_S(t)\rangle,$$

sendo  $H_S$  o operador hamiltoniano do sistema, com estado inicial,

$$|\psi_S(t=0)\rangle = |\psi_S(0)\rangle,$$

determinando a dinâmica do sistema. A evolução do vetor de estado pode ser descrita como um mapeamento do estado inicial pelo operador evolução temporal:

$$|\psi_S(t)\rangle = U(t) |\psi_S(0)\rangle, \quad (6)$$

que é representado por:

$$U(t) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar} H_S t\right). \quad (7)$$

Quando  $H_S$  não depende do tempo, este operador é unitário, pois o operador hamiltoniano é hermitiano [38] e, garante a relação:

$$U(t=0) = \mathbf{1}. \quad (8)$$

Existe uma representação alternativa da equação de Schrodinger conhecida como representação de Heisenberg, onde os operadores evoluem no tempo, mas os vetores de estado não [38]. Através da transformação associada com o operador  $U^\dagger$  na equação (8) e obtemos o vetor de estado transformado  $|\psi_H(t)\rangle$  [39]:

$$|\psi_H(t)\rangle = U^\dagger(t) |\psi_S(t)\rangle = |\psi_S(0)\rangle, \quad (9)$$

na representação de Heisenberg o estado é constante e igual a  $|\psi_S(t)\rangle$  em  $t = 0$ . Assim, os operadores evoluem no tempo de acordo com [39]:

$$A_H = U^\dagger(t) A_S U(t) \quad (10)$$

A partir da definição acima, a equação do movimento para operadores dependentes do tempo na representação de Heisenberg é [28]:

$$i\hbar \frac{d}{dt} A_H(t) = [A_H(t), \mathcal{H}] \quad (11)$$

## 2.4 Férmions de Majorana

Dirac, em 1928, criou uma equação da onda relativística para elétrons [40-41]. Esta equação contém quatro componentes de um campo  $\psi$ . Em notação covariante temos [1]:

$$(i\gamma_\mu \partial_\mu - m) \psi = 0. \quad (12)$$

As matrizes  $\gamma$  obedecem à álgebra de Clifford [1], ou seja:

$$\{\gamma_\mu, \gamma_\nu\} \equiv \gamma_\mu \gamma_\nu + \gamma_\nu \gamma_\mu = 2\eta_{\mu\nu}, \quad (13)$$

sendo que  $\eta_{\mu\nu}$  é o tensor métrico do espaço plano, que obedece a seguinte regra [1]:



$$(\gamma^0)^2 = -(\gamma^1)^2 = -(\gamma^2)^2 = -(\gamma^3)^2 = 1, \quad (14)$$

$$\gamma^j \gamma^k = -\gamma^k \gamma^j, j \neq k. \quad (15)$$

no qual é adotado  $\hbar = c = 1$  para equação (15).

Uma condição necessária e suficiente é que  $\gamma^0$  seja hermitiana e, as matrizes restantes, sejam anti-hermitianas. Dessa maneira, tais condições nos fazem ter que a equação de Dirac descreva adequadamente a função de onda de uma partícula de spin  $\frac{1}{2}$  e com massa  $m$ . Portanto, as matrizes  $\gamma$  de Dirac serão dadas por [1]:

$$\gamma^0 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}; \quad \gamma^1 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix},$$

$$\gamma^2 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & -i \\ 0 & 0 & i & 0 \\ 0 & i & 0 & 0 \\ i & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \quad \gamma^3 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \\ -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

Dirac encontrou um conjunto de matrizes 4x4, onde suas entradas contêm números reais e imaginários, porém, para que isso tenha consistência física, o campo  $\psi$  necessita ser complexo [1]. Na teoria quântica de campos, um dado campo  $\varphi$  cria a partícula A e destrói sua antipartícula  $\bar{A}$ , o complexo conjugado  $\varphi^*$  criará  $\bar{A}$  e destruirá A. Isto é, as partículas serão suas próprias antipartículas. E estas devem ser associadas biunivocamente a campos com a característica,

$$\varphi = \varphi^*, \quad (16)$$

teremos assim, campos reais. Como elétrons e pósitrons são diferentes, os campos associados a eles devem ser distintos. Esta característica intrínseca aparece de forma natural na equação de Dirac [1].

Pesquisadores americanos da universidade de Princeton, liderados por Ali Yazdani, em 2014, seguindo a tese do físico russo Alexei Kitaev obtiveram, de forma experimental, imagens (ver Figura 4) de picos de férmions de Majorana se formando em uma cadeia fina de átomos de ferro (esferas vermelhas ao centro) sobre um supercondutor de chumbo (esferas pretas).

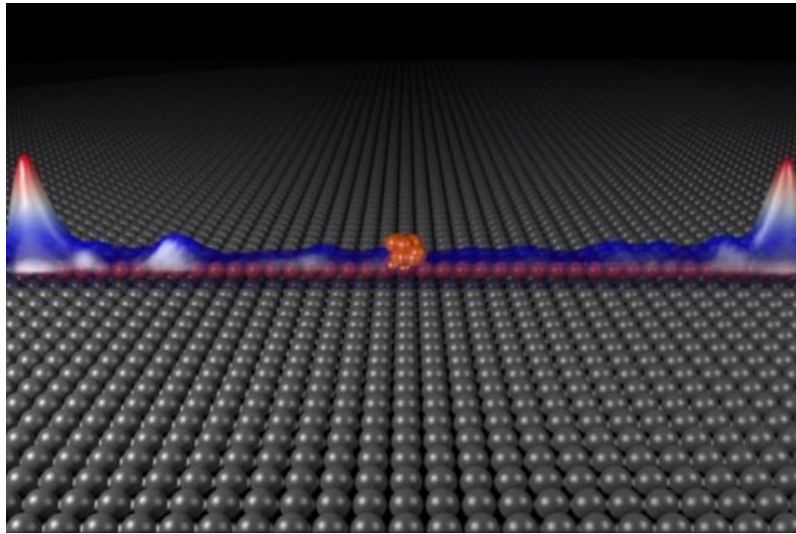


Figura 4: Pesquisadores da universidade de Princeton utilizaram um microscópio de varredura de tunelamento para obter imagem experimentalmente da detecção de férmions de Majorana [34].

## 2.5 A cadeia de átomos em zigue zague

Agora será proposto um modelo onde aparecem modos de Majorana desemparelhados, isto é, uma representação *tight-binding* de um supercondutor de emparelhamento tipo p-wave 1D [1]. Este modelo é uma extensão da cadeia de Kitaev e, além disso, é um exemplo experimentalmente realístico para detecção de férmions de Majorana [5]. O sistema é composto por um ponto quântico em contato com eletrodos metálicos, de um único nível, *spinless*, acoplado a uma cadeia de átomos em zigue zague, sobre um supercondutor topológico com pareamento p-wave [5]. Consideremos uma cadeia de átomos 1D com  $i$ -sítios, onde cada sítio pode estar vazio ou ocupado por um elétron [1]. O hamiltoniano da cadeia ( $\mathcal{H}_c$ ) de átomos em zigue zague completa será dado por  $\mathcal{H}_c = \mathcal{H}_1 + \mathcal{H}_2 + \mathcal{H}_\mu$  (ver Figura 7) onde

$$\mathcal{H}_\mu = -\mu \sum_{i=1}^L (c_i^\dagger c_i) \quad (17)$$

e,

$$\mathcal{H}_\alpha = \sum_{i=1}^{L-\alpha} (-h_\alpha c_i^\dagger c_{i+\alpha} - h_\alpha c_{i+\alpha}^\dagger c_i + \Delta_\alpha c_i c_{i+\alpha} + \Delta_\alpha c_{i+\alpha}^\dagger c_i^\dagger) \quad (18)$$

A equação (17) corresponde a entrada ou saída de elétrons (férmions comuns) de um sítio da cadeia de átomos em zigue zague. Além disso,  $\mu$  é o potencial químico da cadeia que define a probabilidade de emitir o elétron no sítio.

Na equação (18), o parâmetro  $\alpha$  designa o tipo de fator de acoplamento envolvido na cadeia de átomos em zigue zague. Para  $\alpha = 1$ , temos amplitude de pareamento e hopping  $\Delta_1, h_1$ , respectivamente, representadas pela cor amarela (diagonal). E, para  $\alpha = 2$ , temos amplitude de pareamento e hopping  $\Delta_2, h_2$ , representadas pela cor roxa (horizontal), ambas mostradas na Figura 7.

Ademais na equação (18), o primeiro termo dado por

$$\mathcal{H}_h = \sum_{i=1}^{L-\alpha} (-h_\alpha c_i^\dagger c_{i+\alpha} - h_\alpha c_{i+\alpha}^\dagger c_i) \quad (19)$$

denota as interações entre os sítios adjacentes da cadeia de átomos em zigue zague, mediadas pela constante de acoplamento  $h_\alpha$ , denominada hopping relativo as interações entre elétrons (férmions comuns) em sítios adjacentes. No terceiro termo temos,

$$\mathcal{H}_\Delta = \sum_{i=1}^{L-\alpha} (\Delta_\alpha c_i c_{i+\alpha} + \Delta_\alpha c_{i+\alpha}^\dagger c_i^\dagger) \quad (20)$$

corresponde as interações devido à proximidade do supercondutor sobre a qual está a cadeia de átomos em zigue zague. Sendo  $\Delta_\alpha$  denominado de parâmetro de Cooper ou amplitude de pareamento.

Descreveremos o hamiltoniano da cadeia de átomos em zigue zague na representação dos férmions de Majorana [1]. Para isso, decompomos os operadores de elétrons  $c_i$  em termos dos dois operadores de modos Majorana  $\gamma_{Ai}$  e  $\gamma_{Bi}$ . Por definição, os operadores de Majorana são dados por [1]:

$$c_i = \frac{1}{\sqrt{2}} (\gamma_{Ai} + i\gamma_{Bi}) \quad (21)$$

$$c_i^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}} (\gamma_{Ai} - i\gamma_{Bi}) \quad (22)$$

com as propriedades de anticomutação para os modos de Majorana [1]:

$$\{\gamma_{\alpha i}, \gamma_{\beta j}\} = \delta_{ij} \delta_{\alpha\beta}; \gamma_{\alpha j}^\dagger = \gamma_{\alpha i}$$

## 2.6 Fase Topológica: Casos limitantes

Para se entender a formação de férmions de Majorana na cadeia de átomos em zigue zague, devemos analisar algumas condições específicas onde os mesmos acontecem.

O potencial químico  $\mu$ , hopping  $h$  e amplitude de pareamento  $\Delta$  induzem acoplamentos relativamente complexos. O modelo descrito pela Figura 7 é analisado em duas fases:

- (a) Trivial  $\mu < 0$  e  $h_\alpha = \Delta_\alpha = 0$ ;
- (b) fase topológica (FT)  $\mu = 0$  e  $h_\alpha = \Delta_\alpha = \Delta \neq 0$ ;
- (b.1) Situação topológica mais geral (STG)  $\mu \neq 0$  e  $\Delta \neq h$ , mas ainda na fase topológica [5] [42-43].

Na Figura 5 a curva verde representa a transição entre: (a) fase trivial e, (b) fase topológica. Qualquer ponto sobre a curva mostra o sistema em transição de fase, isto é,  $E_Z = \sqrt{\Delta^2 + \mu^2}$ , com  $E_Z$  a energia de Zeeman devido o campo magnético externo  $\mathbf{B}$  aplicado perpendicular ao substrato supercondutor s-wave a fim de transformá-lo em um supercondutor p-wave. Abaixo da curva verde, o sistema corresponde a fase trivial com  $E_Z < \sqrt{\Delta^2 + \mu^2}$ . E acima desta curva o sistema é caracterizado pela fase topológica e pela (b.1) situação topológica mais geral.

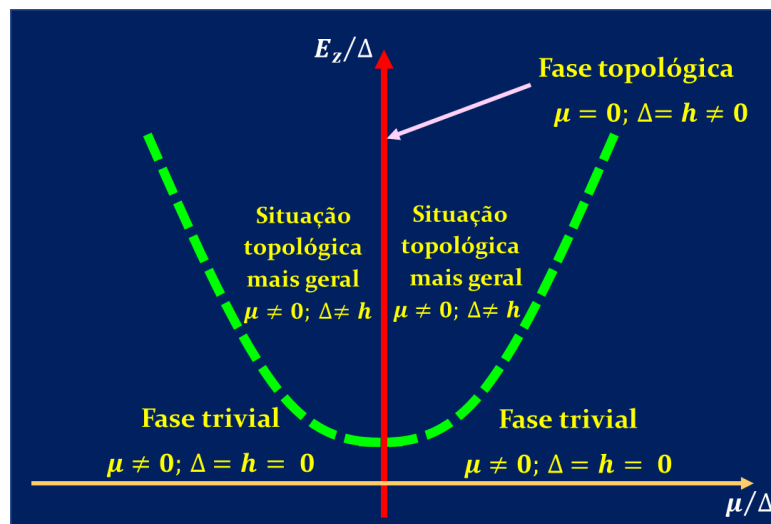


Figura 5: Diagrama representando a diferença entre a fase trivial e a fase topológica [42].

A seguir descrevemos cada fase estudada no modelo com seu respectivo hamiltoniano.

### 2.6.1 Fase topológica trivial ( $\mu \neq 0$ e $h_\alpha = \Delta_\alpha = 0$ )

Nesta fase [42-46], o hamiltoniano da cadeia será dado por:

$$\mathcal{H}_c = -\mu \sum_{i=1}^L (1 + i\gamma_{Bi}\gamma_{Ai}) \quad (23)$$

Na equação (18), os termos de  $\mathcal{H}_\alpha$  se tornam nulos por estas condições, entretanto, os termos de  $\mathcal{H}_\mu$  serão diferentes de zero, ficando apenas os modos de Majorana  $\gamma_{Bi}$  e  $\gamma_{Ai}$  no mesmo sítio, como ilustrado na Figura 7. Neste caso, existe um único estado correspondendo a férmions comuns,  $c_i$ .

### 2.6.2 Fase topológica ( $\mu = 0$ e $h_\alpha = \Delta_\alpha = \Delta \neq 0$ )

Aqui o hamiltoniano da cadeia será dado pelo seguinte [42-46]:

$$\mathcal{H}_c = -i\Delta \sum_{i=1}^{L-\alpha} (\gamma_{Bi}\gamma_{Ai+1}) \quad (24)$$

que acopla férmions de Majorana somente em sítios adjacentes da cadeia, como mostrado na Figura 6b.

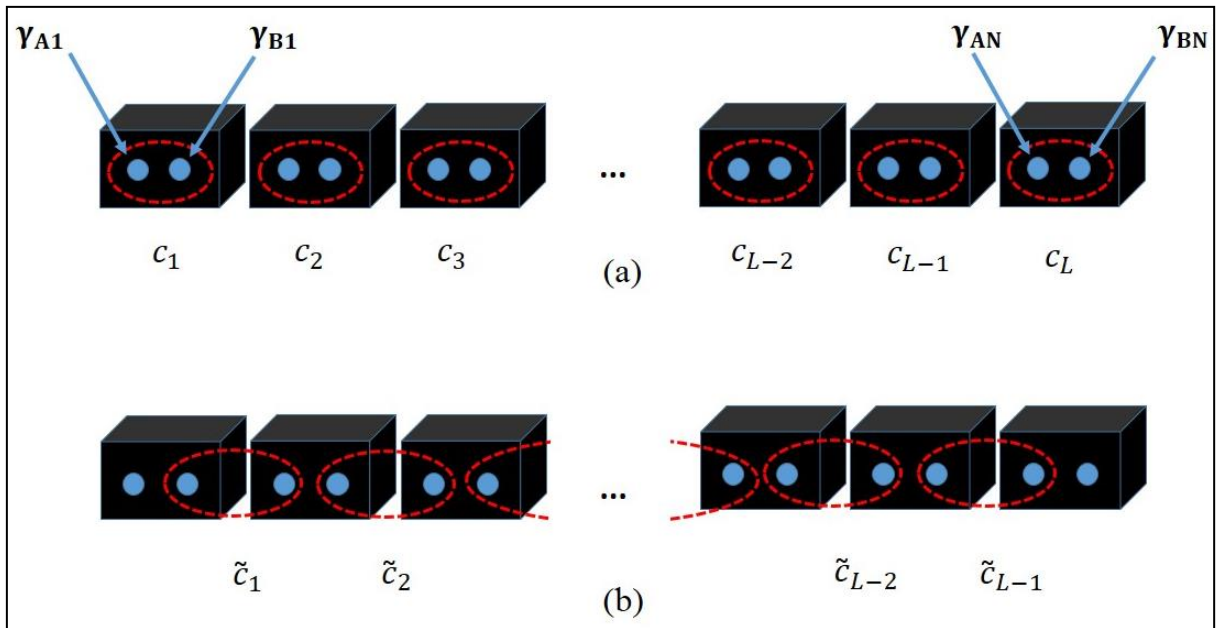


Figura 6: Em (a), os operadores fermiônicos em cada sítio  $i$  da cadeia podem ser divididos em dois operadores de Majorana,  $\gamma_{Ai}$  e  $\gamma_{Bi}$ . E em (b), no limite  $\mu = 0$ ,  $h = \Delta$ , o hamiltoniano é diagonal em operadores fermiônicos que são obtidos pela combinação de operadores de Majorana em sítios vizinhos [47].

## 2.7 O hamiltoniano do sistema: Ponto quântico acoplado a cadeia de átomos em zigue zague.

Neste tópico iremos descrever a geometria do sistema estudado de forma sucinta. Na Figura 7 apresentamos de forma esquemática o sistema em estudo. O hamiltoniano do modelo estudado pode ser escrito da seguinte maneira:

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_D + \mathcal{H}_L + \mathcal{H}_{DL} + \mathcal{H}_{DC} + \mathcal{H}_C \quad (25)$$

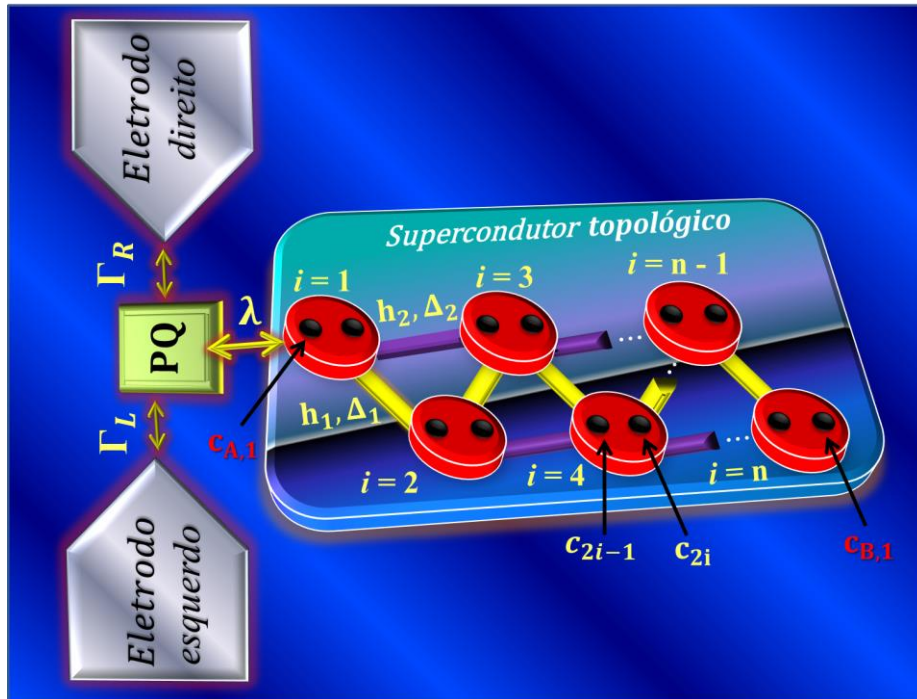


Figura 7: Modelo proposto - Ponto quântico, de apenas um nível, acoplado a dois leads com respectivos acoplamentos  $\Gamma_R$  e  $\Gamma_D$ , conectado a uma cadeia de átomos em zig-zague de  $L$  sítios por uma constante de acoplamento  $\lambda$ , onde a cadeia está sobre um substrato supercondutor topológico com pareamento p-wave. Além disso,  $C_{2i-1}$  e  $C_{2i}$  são os operadores de Majorana que estão em cada sítio;  $c_{A,1}$  e  $c_{B,1}$  são MBS nas extremidades da cadeia. As constantes de acoplamento interna à cadeia são dadas por  $h_\alpha, \Delta_\alpha$ , denominadas hopping e parâmetro de Cooper, respectivamente. E  $\alpha$  é um parâmetro que designa o tipo de fator de acoplamento envolvido na cadeia, isto é, para  $\alpha = 1$  tem-se acoplamentos  $h_1 \Delta_1$  (cor amarela na diagonal) e  $\alpha = 2$  tem-se acoplamentos  $h_2 \Delta_2$  (cor roxa na horizontal).

Ao adicionar cada sítio sobre a cadeia de átomos em zig-zague, aumentamos as possíveis interações entre os sítios vizinhos no nanofio e, conseqüentemente, aumentamos a complexidade de hoppings sobre a cadeia, conforme mostrado pela Figura 8 a seguir.

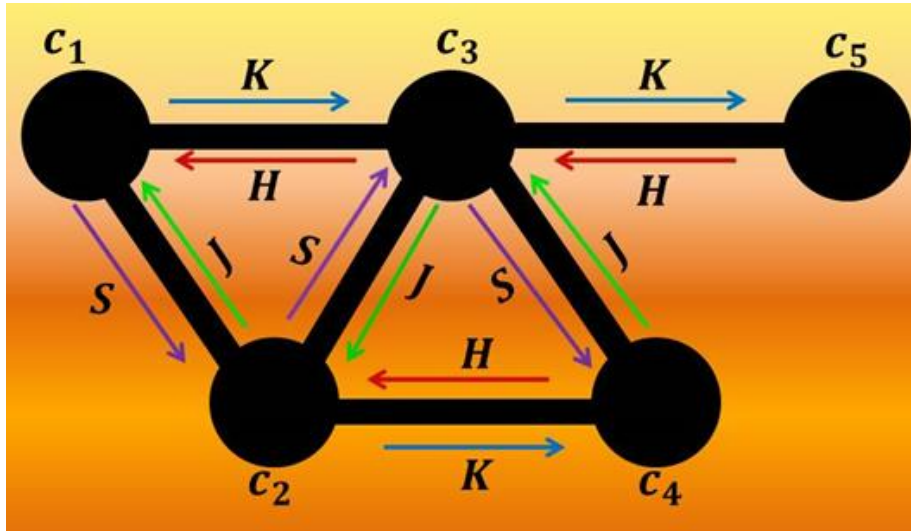


Figura 8: Interação eletrônica entre os 5 sítios da cadeia em zig-zague representada pelas matrizes de acoplamento  $\mathbf{K}$ ,  $\mathbf{H}$ ,  $\mathbf{J}$  e  $\mathbf{S}$ .

As matrizes  $\mathbf{K}$ ,  $\mathbf{H}$ ,  $\mathbf{J}$  e  $\mathbf{S}$  estão descritas na seção 3 e representam a interação eletrônica entre os 5 sítios do modelo, revelando a possibilidade de tunelamento eletrônico existente entre os sítios na cadeia.

A descrição do modelo analisado na Figura 7 e a construção do hamiltoniano do mesmo modelo será realizada utilizando operadores quânticos de criação e aniquilação pautados na teoria de 2ª quantização da mecânica quântica [38].

A parcela do hamiltoniano referente ao ponto quântico, de um único nível,  $\mathcal{H}_D$ , é dado por:

$$\mathcal{H}_D = \epsilon_d d_0^\dagger d_0, \quad (26)$$

este descreve o ponto quântico com um nível de energia sintonizável  $\epsilon_d$ . Sendo  $d_0^\dagger d_0$  cria (aniquila) um elétron no estado  $\mu$  de uma base qualquer na região central [1]. O hamiltoniano dos eletrodos é dado por:

$$\mathcal{H}_L = \sum_{k\alpha} \epsilon_k c_{k\alpha}^\dagger c_{k\alpha} \quad (27)$$

que descreve os eletrodos esquerdo e direito com potencial químico  $\mu_L = 0$ . Sendo  $c_{k\alpha}^\dagger c_{k\alpha}$  são operadores fermiônicos de criação (aniquilação), que seguem a mesma regra de anticomutação dada pelas equações (3) e (4). O hamiltoniano do acoplamento entre ponto quântico e eletrodos é dado por:



$$\mathcal{H}_{DL} = \sum_{k\alpha} V_{k\alpha} (c_{k\alpha}^\dagger d_0 + d_0^\dagger c_{k\alpha}), \quad (28)$$

sendo que  $V_{k\alpha}$  representa o tunelamento eletrônico entre o ponto quântico e os leads. O hamiltoniano entre o ponto quântico e o primeiro sítio da cadeia é dado por:

$$\mathcal{H}_{DC} = \lambda d_0^\dagger c_1 + \lambda c_1^\dagger d_0, \quad (29)$$

com  $\lambda$  o parâmetro de acoplamento. O hamiltoniano da cadeia de átomos em zigue zague é dado por:

$$\mathcal{H}_C = \mathcal{H}_\mu + \mathcal{H}_\alpha \quad (30)$$

sendo  $\mathcal{H}_\mu$  e  $\mathcal{H}_\alpha$  dados pelas equações (17) e (18), respectivamente.

Apresentado o hamiltoniano do modelo estudado, no próximo capítulo vamos calcular todas as possíveis funções de Green [48-49] para o sistema descrito pela Figura 7. Desta maneira, os cálculos foram realizados para o sistema contendo 5 sítios e, posteriormente, generalizado para  $n$  sítios.

## Capítulo 3: METODOLOGIA

“A curiosidade é mais importante do que o conhecimento”  
(Albert Einstein)

Neste capítulo, será descrita a metodologia utilizada para a realização dos cálculos do sistema proposto no capítulo 2. Para isto, utilizou-se o formalismo de funções de Green no equilíbrio [49]. Este método é adequado ao nosso modelo, devido o sistema proposto apresentar um problema de muitos corpos.

### 3.1 A equação da condutância, transmitância e densidade de estados para o modelo proposto.

No capítulo 2, apresentamos o hamiltoniano do sistema. Agora iremos calcular algumas grandezas físicas do sistema. Dentre elas, destacamos a transmitância, a condutância e a densidade de estados (LDOS) que são grandezas iniciais para o estudo de transporte eletrônico. A transmitância e a condutância são dadas por:

$$T(\omega) = G_c(\omega) = -\Gamma \text{Im}\{G_{d_0 d_0}^r(\omega)\}, \quad (31)$$

e a LDOS é dada por:

$$\text{LDOS}(\omega) = -\frac{1}{\pi} \text{Im}\{G_{d_0 d_0}^r(\omega)\}, \quad (32)$$

notamos que para calcular as grandezas descritas pelas equações (31) e (32), devemos primeiramente calcular a função Green do ponto quântico  $G_{d_0 d_0}^r(\omega)$  [1-5, 13].

### 3.2 A função de Green exata

Antes de calcular a LDOS, a condutância ou outras grandezas físicas referentes ao sistema proposto no capítulo 2, iremos definir a função do Green e, a partir dela, calcular a  $G_{d_0 d_0}^r(\omega)$ . A função de Green do ponto quântico é dada por:

$$G_{d_0 d_0}^r(t, t') = -i \theta(t - t') \langle \{d_0(t), d_0^\dagger(t')\} \rangle \quad (33)$$

sendo  $\theta(t - t')$  a função de Heaviside.

Para se resolver a equação (33) utilizaremos o formalismo de funções de Green no equilíbrio. Cálculos iterativos da função de Green serão realizados, a fim de se obter a  $G_{d_0 d_0}^r$  para 1 sítio. Em seguida, incluímos um novo sítio e calculamos a nova função de Green do sistema para 2 sítios e, assim por diante. Desta forma, podemos calcular a função de Green exata para o último sítio  $L$  da cadeia de átomos em zigue zague.

### 3.3 A função de Green do ponto quântico com 1 sítio na cadeia de átomos em zigue zague

Neste tópico, iremos calcular a equação de movimento da função de Green para 1 sítio. Derivando a equação (33) em relação ao tempo  $t$ , teremos:

$$i \frac{\partial}{\partial t} G_{d_0 d_0}^r(t, t') = \delta(t - t') \langle \{d_0(t), d_0^\dagger(t')\} \rangle + \theta(t - t') \langle \{\dot{d}_0(t), d_0^\dagger(t')\} \rangle \quad (34)$$

todavia,

$$\langle \{d_0(t), d_0^\dagger(t')\} \rangle = 1 \quad (35)$$

portanto,

$$i \frac{\partial}{\partial t} G_{d_0 d_0}^r(t, t') = \delta(t - t') + \theta(t - t') \langle \{\dot{d}_0(t), d_0^\dagger(t')\} \rangle \quad (36)$$

Para realizar o cálculo da equação (36), necessitamos primeiramente encontrar  $\dot{d}_0(t)$ . E para isso, devemos utilizar a equação de movimento de Heisenberg, descrita no tópico 2.3 do capítulo 2. Esta equação de movimento fornece a dinâmica dos operadores quânticos. Dessa maneira,  $\dot{d}_0(t)$ , será dado por:

$$\dot{d}_0(t) = \frac{i}{\hbar} [\mathcal{H}, d_0](t) \quad (37)$$

que por questões de simplicidade, adotamos  $\hbar = 1$ . Substituindo o hamiltoniano do sistema, que foi escrito na equação (25) do capítulo 2, teremos:

$$\begin{aligned} \dot{d}_0(t) = & i[\mathcal{H}_L, d_0](t) + i[\mathcal{H}_D, d_0](t) + i[\mathcal{H}_{DL}, d_0](t) + i[\mathcal{H}_{DC}, d_0](t) \\ & + i[\mathcal{H}_C, d_0](t) \end{aligned} \quad (38)$$

Dando continuidade para o cálculo do sistema de 1 sítio, vamos calcular a equação (38) para cada termo, isto é, cada parcela é calculada separadamente. Temos:

$$[\mathcal{H}_L, d_0] = 0 \quad (39)$$

$$[H_D, d_0] = -\epsilon_d d_0 \quad (40)$$

$$[H_{DL}, d_0] = -\sum_{k\alpha} V_\alpha c_{k\alpha} \quad (41)$$

$$[\mathcal{H}_{DC}, d_0] = -\lambda c_1 \quad (42)$$

$$[\mathcal{H}_C, d_0] = 0 \quad (43)$$

Substituindo as equações (39) até (43) em (38), obtemos:

$$\dot{d}_0(t) = -i\epsilon_d d_0(t) - i\sum_{k\alpha} V_\alpha c_{k\alpha}(t) - i\lambda c_1(t) \quad (44)$$

Na equação (44), observamos que o operador  $d_0$  interage com os eletrodos e com o primeiro sítio da cadeia de átomos em zigue zague através do parâmetro de acoplamento  $\lambda$ . Fazendo  $\lambda = 0$ , temos que o ponto quântico interage apenas com os eletrodos (leads). Substituindo a equação (44) na equação (36), temos:

$$\left(i\frac{\partial}{\partial t} - \epsilon_d\right) \mathbf{G}_{d_0 d_0}^r(\mathbf{t}, \mathbf{t}') = \delta(\mathbf{t} - \mathbf{t}') + \sum_{k\alpha} V_\alpha \mathbf{G}_{k\alpha, d_0}^r(\mathbf{t}, \mathbf{t}') + \lambda \mathbf{G}_{c_1 d_0}^r(\mathbf{t}, \mathbf{t}') \quad (45)$$

com,

$$G_{k\alpha,d_0}^r(t,t') = -i\theta(t-t')\langle\{c_{k\alpha}(t),d_0^\dagger(t')\}\rangle \quad (46)$$

$$G_{c_1d_0}^r(t,t') = -i\theta(t-t')\langle\{c_1(t),d_0^\dagger(t')\}\rangle \quad (47)$$

A equação (45) exerce toda a dinâmica do ponto quântico, sendo este acoplado com os leads e com o primeiro sítio da cadeia de átomos em zigue zague. Todavia, é necessário encontrar as funções de Green relacionadas aos eletrodos, dado por  $G_{k\alpha,d_0}^r(t,t')$  e, também, ao primeiro sítio da cadeia de átomos, dado por  $G_{c_1d_0}^r(t,t')$ . Começamos calculando a equação (46), derivando esta, obtemos:

$$\begin{aligned} i\frac{\partial}{\partial t}G_{k\alpha,d_0}^r(t,t') &= \delta(t-t')\langle\{c_{k\alpha}(t),d_0^\dagger(t')\}\rangle \\ &+ \theta(t-t')\langle\{\dot{c}_{k\alpha}(t),d_0^\dagger(t')\}\rangle \end{aligned} \quad (48)$$

contudo,

$$\langle\{c_{k\alpha}(t),d_0^\dagger(t')\}\rangle = 0 \quad (49)$$

portanto,

$$i\frac{\partial}{\partial t}G_{k\alpha,d_0}^r(t,t') = \theta(t-t')\langle\{\dot{c}_{k\alpha}(t),d_0^\dagger(t')\}\rangle \quad (50)$$

A partir da equação (50), iremos calcular  $\dot{c}_{k\alpha}(t)$  dado por:

$$\dot{c}_{k\alpha}(t) = [\mathcal{H}, c_{k\alpha}](t) \quad (51)$$

Substituindo o hamiltoniano na equação (51), temos:

$$\dot{c}_{k\alpha}(t) = i[\mathcal{H}_L, c_{k\alpha}](t) + i[\mathcal{H}_D, c_{k\alpha}](t) + i[\mathcal{H}_{DL}, c_{k\alpha}](t) + i[\mathcal{H}_{DC}, c_{k\alpha}](t) + \quad (52)$$

$$+ i[\mathcal{H}_C, c_{k\alpha}](t).$$

Calculando cada termo da equação (52), isto é:

$$[\mathcal{H}_L, c_{k\alpha}] = -\epsilon_k c_{k\alpha} \quad (53)$$

$$[\mathcal{H}_D, c_{k\alpha}] = 0 \quad (54)$$

$$[\mathcal{H}_{DL}, c_{k\alpha}] = -V_{k\alpha} d_0 \quad (55)$$

$$[\mathcal{H}_{DC}, c_{k\alpha}] = 0 \quad (56)$$

$$[\mathcal{H}_C, c_{k\alpha}] = 0 \quad (57)$$

Substituindo a equação (53) até (57) na equação (52), temos:

$$\dot{c}_{k\alpha}(t) = -i\epsilon_k c_{k\alpha}(t) - iV_{k\alpha} d_0(t) \quad (58)$$

Observamos que a equação (58) descreve a interação dos eletrodos com o ponto quântico. Substituindo a equação (58) na equação (50), obtemos:

$$\left(i \frac{\partial}{\partial t} - \epsilon_k\right) G_{k\alpha, d_0}^r(\mathbf{t}, \mathbf{t}') = V_{k\alpha} G_{d_0 d_0}^r(\mathbf{t}, \mathbf{t}') \quad (59)$$

com,

$$G_{d_0 d_0}^r(\mathbf{t}, \mathbf{t}') = -i\theta(t - t') \langle \{d_0(\mathbf{t}), d_0^\dagger(\mathbf{t}')\} \rangle \quad (60)$$

Agora, vamos resolver a equação (47), derivando-a teremos:

$$i \frac{\partial}{\partial t} G_{c_1 d_0}^r(\mathbf{t}, \mathbf{t}') = \delta(t - t') \langle \{c_1(\mathbf{t}), d_0^\dagger(\mathbf{t}')\} \rangle \quad (61)$$

$$+\theta(t-t')\langle\{\dot{c}_1(t), d_0^\dagger(t')\}\rangle$$

entretanto,

$$\{c_1(t), d_0^\dagger(t')\} = 0 \quad (62)$$

e a equação (61) torna-se:

$$i\frac{\partial}{\partial t}G_{c_1d_0}^r(t, t') = \theta(t-t')\langle\{\dot{c}_1(t), d_0^\dagger(t')\}\rangle \quad (63)$$

Na equação (63), iremos calcular  $\dot{c}_1(t)$  utilizando a equação de Heisenberg, dessa forma:

$$\dot{c}_1(t) = i[\mathcal{H}, c_1](t) \quad (64)$$

ou,

$$\begin{aligned} \dot{c}_1(t) = & i[\mathcal{H}_L, c_1](t) + i[\mathcal{H}_D, c_1](t) + i[\mathcal{H}_{DL}, c_1](t) + i[\mathcal{H}_{DC}, c_1](t) + \\ & + i[\mathcal{H}_C, c_1](t). \end{aligned} \quad (65)$$

Calculando cada parcela da equação (65), ou seja:

$$[\mathcal{H}_L, c_1] = 0 \quad (66)$$

$$[\mathcal{H}_D, c_1] = 0 \quad (67)$$

$$[\mathcal{H}_{DL}, c_1] = 0 \quad (68)$$

$$[\mathcal{H}_{DC}, c_1] = -\lambda d_0 \quad (69)$$

$$[\mathcal{H}_C, c_1] = 0 \quad (70)$$

Com os resultados obtidos nas equações (66) à (70), substituímos na equação (65) e, obtemos:

$$\dot{c}_1(t) = -i\lambda d_0(t) \quad (71)$$

Substituindo a equação (71) na equação (63), temos:

$$i \frac{\partial}{\partial t} G_{c_1 d_0}^r(t, t') = \lambda G_{d_0 d_0}^r(t, t') \quad (72)$$

sendo  $G_{d_0 d_0}^r$  dado pela equação (60).

A equação (72) mostra a interação entre o ponto quântico e o primeiro sítio da cadeia de átomos em zigue zague. Dessa forma, para o sistema proposto no capítulo 2 e com apenas 1 sítio, foi encontrado as equações (45), (59) e (72), todas no domínio do tempo e, que descrevem as interações físicas do sistema e, com isso, podemos trabalhar nelas para que possamos encontrar a função de Green do sistema: Ponto quântico acoplado a um único sítio.

Devido a otimização dos cálculos, as equações (45), (59) e (72), que estão no domínio do tempo, serão repassadas para o domínio da frequência por meio de uma transformada de Fourier [48-49] aplicada nas respectivas funções de Green com  $t' = 0$ . Isto nos fornece melhor possibilidade de investigar as propriedades do sistema através da função de Green que iremos calcular. Portanto, as equações no domínio da energia ou frequência serão dadas por:

$$(\omega - \epsilon_d) G_{d_0 d_0}^r(\omega) = 1 + \sum_{k\alpha} V_{k\alpha}^* G_{k\alpha, d_0}^r(\omega) + \lambda G_{c_1 d_0}^r(\omega) \quad (73)$$

$$(\omega - \epsilon_k) G_{k\alpha, d_0}^r(\omega) = V_{k\alpha} G_{d_0 d_0}^r(\omega) \quad (74)$$

$$\omega G_{c_1 d_0}^r(\omega) = \lambda G_{d_0 d_0}^r(\omega) \quad (75)$$

Organizando as equações (74) e (75), temos:

$$G_{k\alpha, d_0}^r(\omega) = \frac{V_{k\alpha}}{(\omega - \epsilon_k)} G_{d_0 d_0}^r(\omega) \quad (76)$$



$$G_{c_1 d_0}^r(\omega) = \frac{\lambda}{\omega} G_{d_0 d_0}^r(\omega) \quad (77)$$

Substituindo as equações (76) e (77) na equação (73), obtemos o seguinte resultado:

$$(\omega - \epsilon_d) G_{d_0 d_0}^r(\omega) = 1 + \sum_{k\alpha} \frac{V_{k\alpha}^* V_{k\alpha}}{(\omega - \epsilon_k)} G_{d_0 d_0}^r(\omega) + \frac{\lambda^2}{\omega} G_{d_0 d_0}^r(\omega) \quad (78)$$

organizando a equação (78) teremos:

$$G_{d_0 d_0}^r(\omega) = \frac{1}{(\omega - \epsilon_d) - \sum_{k\alpha} \frac{|V_{k\alpha}|^2}{(\omega - \epsilon_k)} - \frac{\lambda^2}{\omega}} \quad (79)$$

Na equação (79) iremos definir que:

$$i\Gamma = - \sum_{k\alpha} \frac{|V_{k\alpha}|^2}{(\omega - \epsilon_k)} \quad (80)$$

sendo a equação (80) o nível de alargamento de energia entre o PQ e os eletrodos representado por uma função Lorentziana. E, portanto, a equação (79) torna-se:

$$G_{d_0 d_0}^r(\omega) = \frac{1}{\omega - \epsilon_d + i\Gamma - \frac{\lambda^2}{\omega}} \quad (81)$$

A equação (81) fornece a função de Green que descreve toda a dinâmica do sistema proposto no capítulo 2, porém apenas para 1 sítio. Ressaltamos que, se  $\lambda = 0$ , não haverá acoplamento entre ponto quântico e a cadeia de átomos em zigue zague. E portanto, recuperamos a função de Green exata que descreve o ponto quântico mais leads (eletrodos), dada por:

$$G_{d_0 d_0}^r(\omega) = \frac{1}{\omega - \epsilon_d + i\Gamma} \quad (82)$$

### 3.4 A função de Green do ponto quântico com 2 sítios na cadeia de átomos em zigue zague.

De forma análoga ao tópico 3.3 do capítulo 3, daremos continuidade ao método iterativo. Calculamos agora a função de Green exata para o sistema de cadeia de átomos em zigue zague com 2 sítios.

Partindo da equação (38) e calculando cada parcela desta equação, obtemos os resultados apresentados nas equações (39), (40), (41), (42) e (43). E a equação de movimento para o ponto quântico será dado pela equação (44),

$$\dot{d}_0(t) = -i\epsilon_d d_0(t) - i \sum_{k\alpha} V_\alpha c_{k\alpha}(t) - i\lambda c_1(t)$$

Substituindo a equação (44) na equação (36), obtemos a equação (45),

$$\left(i \frac{\partial}{\partial t} - \epsilon_d\right) G_{d_0 d_0}^r(t, t') = \delta(t - t') + \sum_{k\alpha} V_{k\alpha} G_{k\alpha, d_0}^r(t, t') + \lambda G_{c_1 d_0}^r(t, t')$$

com  $G_{k\alpha, d_0}^r$  e  $G_{c_1 d_0}^r$  dados respectivamente pelas equações (46) e (47).

A equação (45) descreve as interações do sistema estudado no capítulo 2 para o caso de uma cadeia de átomos em zigue zague com 2 sítios. Esta equação mostra que as propriedades físicas do ponto quântico dependem do acoplamento entre os eletrodos e o primeiro sítio da cadeia de átomos em zigue zague. Todavia, para calcularmos a equação (45) devemos primeiramente calcular as equações (46) e (47), devido esta dependência. Iniciando o cálculo pela equação (46) e derivando-a, obtemos a equação (50). E a partir desta equação, precisamos calcular a equação (51) e, também, cada parcela da equação (52),

$$\begin{aligned} \dot{c}_{k\alpha}(t) = & i[\mathcal{H}_L, c_{k\alpha}](t) + i[\mathcal{H}_D, c_{k\alpha}](t) + i[\mathcal{H}_{DL}, c_{k\alpha}](t) + i[\mathcal{H}_{DC}, c_{k\alpha}](t) + \\ & + i[\mathcal{H}_C, c_{k\alpha}](t), \end{aligned}$$

e o resultado de cada parcela da equação (52) são dados pelas equações (53), (54), (55), (56) e (57). Substituindo a equação (58) na equação (50), chegamos na equação (59),

$$\left(i \frac{\partial}{\partial t} - \epsilon_k\right) \mathbf{G}_{k\alpha, d_0}^r(\mathbf{t}, \mathbf{t}') = V_{k\alpha} \mathbf{G}_{d_0 d_0}^r(\mathbf{t}, \mathbf{t}')$$

Vamos agora resolver a equação (47), que derivando e usando a equação (62), obtemos a equação (63). Nesta equação, precisamos calcular  $\dot{c}_1(t)$  que é dado pela equação (64). Substituindo o hamiltoniano do sistema, evidenciado no capítulo 2 pelas equações (25), (26), (27), (28), (29) e (30) na equação (64), obtemos os resultados mostrados nas equações (66), (67), (68) e (69). Porém, o comutador do hamiltoniano da cadeia  $\mathcal{H}_C$  com o primeiro sítio da cadeia de átomos em zigue zague é dado por:

$$[\mathcal{H}_C, c_1] = h_1 c_2 + \Delta_1 c_2^\dagger, \quad (83)$$

e a equação (64) torna-se:

$$\dot{c}_1(t) = -i\lambda d_0 + ih_1 c_2 + i\Delta_1 c_2^\dagger. \quad (84)$$

Substituindo a equação (84) na equação (63), temos:

$$i \frac{\partial}{\partial t} \mathbf{G}_{c_1 d_0}^r(\mathbf{t}, \mathbf{t}') = \lambda \mathbf{G}_{d_0 d_0}^r(\mathbf{t}, \mathbf{t}') - h_1 \mathbf{G}_{c_2 d_0}^r(\mathbf{t}, \mathbf{t}') - \Delta_1 \mathbf{G}_{c_2^\dagger d_0}^r(\mathbf{t}, \mathbf{t}') \quad (85)$$

com  $G_{d_0 d_0}^r$  dado pela equação (60) e, além disso:

$$G_{c_2 d_0}^r(t, t') = -i\theta(t - t') \langle \{c_2(t), d_0^\dagger(t')\} \rangle \quad (86)$$

e,

$$G_{c_2^\dagger d_0}^r(t, t') = -i\theta(t - t') \langle \{c_2^\dagger(t), d_0^\dagger(t')\} \rangle \quad (87)$$

Obtido a equação (85), que descreve a dinâmica do sistema proposto no capítulo 2, porém apenas para 2 sítios. Derivando a equação (86), teremos:

$$i \frac{\partial}{\partial t} G_{c_2 d_0}^r(t, t') = \theta(t - t') \langle \{\dot{c}_2, d_0^\dagger(t')\} \rangle \quad (88)$$

Devemos calcular  $\dot{c}_2(t)$  através da equação de movimento de Heisenberg dada por:

$$\dot{c}_2(t) = i[\mathcal{H}, c_2](t) \quad (89)$$

e substituindo o hamiltoniano do sistema descrito no capítulo 2 na equação (89), obtemos:

$$\begin{aligned} \dot{c}_2(t) = & i[\mathcal{H}_L, c_2](t) + i[\mathcal{H}_D, c_2](t) + i[\mathcal{H}_{DL}, c_2](t) \\ & + i[\mathcal{H}_{DC}, c_2](t) + i[\mathcal{H}_C, c_2](t). \end{aligned} \quad (90)$$

Calculando cada parcela da equação (90),

$$[\mathcal{H}_L, c_2] = 0 \quad (91)$$

$$[\mathcal{H}_D, c_2] = 0 \quad (92)$$

$$[\mathcal{H}_{DL}, c_2] = 0 \quad (93)$$

$$[\mathcal{H}_{DC}, c_2] = 0 \quad (94)$$

$$[\mathcal{H}_C, c_2] = h_1 c_1 - \Delta_1 c_1^\dagger \quad (95)$$

Substituindo as equações (91) à (95) na equação (90), chegamos ao resultado,

$$\dot{c}_2(t) = ih_1 c_1 - i\Delta_1 c_1^\dagger \quad (96)$$

E substituindo a equação (96) na equação (88), temos:

$$i \frac{\partial}{\partial t} G_{c_2 d_0}^r(\mathbf{t}, \mathbf{t}') = -h_1 G_{c_1 d_0}^r(\mathbf{t}, \mathbf{t}') + \Delta_1 G_{c_1^\dagger d_0}^r(\mathbf{t}, \mathbf{t}') \quad (97)$$

Pela equação (97), vamos calcular  $G_{c_1^\dagger d_0}^r$ , dado por:

$$G_{c_1^\dagger d_0}^r(t, t') = -i\theta(t - t')\langle\{c_1^\dagger(t), d_0^\dagger(t')\}\rangle \quad (98)$$

e derivando a equação (98), obtemos:

$$i\frac{\partial}{\partial t}G_{c_1^\dagger d_0}^r(t, t') = \theta(t - t')\langle\{\dot{c}_1^\dagger, d_0^\dagger(t')\}\rangle \quad (99)$$

Pela equação (99), devemos calcular  $\dot{c}_1^\dagger(t)$  utilizando a equação de movimento de Heisenberg, dada por:

$$\dot{c}_1^\dagger(t) = i[\mathcal{H}, c_1^\dagger](t) \quad (100)$$

E substituindo o hamiltoniano do sistema na equação (100), temos:

$$\begin{aligned} \dot{c}_1^\dagger(t) = & i[\mathcal{H}_L, c_1^\dagger](t) + i[\mathcal{H}_D, c_1^\dagger](t) + i[\mathcal{H}_{DL}, c_1^\dagger](t) + i[\mathcal{H}_{DC}, c_1^\dagger](t) \\ & + i[\mathcal{H}_C, c_1^\dagger](t) \end{aligned} \quad (101)$$

Calculando cada parcela da equação (101), chegamos aos resultados:

$$[\mathcal{H}_L, c_1^\dagger] = 0 \quad (102)$$

$$[\mathcal{H}_D, c_1^\dagger] = 0 \quad (103)$$

$$[\mathcal{H}_{DL}, c_1^\dagger] = 0 \quad (104)$$

$$[\mathcal{H}_{DC}, c_1^\dagger] = \lambda d_0^\dagger \quad (105)$$

$$[\mathcal{H}_C, c_1^\dagger] = -h_1 c_2^\dagger - \Delta_1 c_2 \quad (106)$$

Substituindo as equações (102) à (106) na equação (101), temos:

$$\dot{c}_1^\dagger(t) = i\lambda d_0^\dagger - ih_1 c_2^\dagger - i\Delta_1 c_2 \quad (107)$$

Substituindo a equação (107) na equação (99), obtemos o resultado:

$$i \frac{\partial}{\partial t} G_{c_1^\dagger d_0}^r(t, t') = -\lambda G_{d_0^\dagger d_0}^r(t, t') + \Delta_1 G_{c_2 d_0}^r(t, t') + h_1 G_{c_2^\dagger d_0}^r(t, t') \quad (108)$$

com,

$$G_{d_0^\dagger d_0}^r(t, t') = -i\theta(t - t') \langle \{d_0^\dagger(t), d_0^\dagger(t')\} \rangle \quad (109)$$

além disso,  $G_{c_2 d_0}^r$  é dado pela equação (86) e temos também:

$$G_{c_2^\dagger d_0}^r(t, t') = -i\theta(t - t') \langle \{c_2^\dagger(t), d_0^\dagger(t')\} \rangle \quad (110)$$

Vamos calcular a equação (109) que equivale a função de Green do ponto quântico. Derivando (109), teremos:

$$i \frac{\partial}{\partial t} G_{d_0^\dagger d_0}^r(t, t') = \theta(t - t') \langle \{\dot{d}_0^\dagger(t), d_0^\dagger(t')\} \rangle \quad (111)$$

Na equação (111), devemos calcular  $\dot{d}_0^\dagger$  através da equação de Heisenberg, logo:

$$\dot{d}_0^\dagger = i[\mathcal{H}, d_0^\dagger](t) \quad (112)$$

Substituindo o hamiltoniano descrito no capítulo 2 na equação (112), obtemos:

$$\begin{aligned} \dot{d}_0^\dagger = & i[\mathcal{H}_L, d_0^\dagger](t) + i[\mathcal{H}_D, d_0^\dagger](t) + i[\mathcal{H}_{DL}, d_0^\dagger](t) + i[\mathcal{H}_{DK}, d_0^\dagger](t) \\ & + i[\mathcal{H}_K, d_0^\dagger](t) \end{aligned} \quad (113)$$

onde cada parcela é calculada separadamente e os resultados são:

$$[\mathcal{H}_L, d_0^\dagger] = 0 \quad (114)$$

$$[\mathcal{H}_D, d_0^\dagger] = \epsilon_d d_0^\dagger \quad (115)$$

$$[\mathcal{H}_{DL}, d_0^\dagger] = \sum_{k\alpha} V_{k\alpha} c_{k\alpha}^\dagger \quad (116)$$

$$[\mathcal{H}_{DC}, d_0^\dagger] = \lambda c_1^\dagger \quad (117)$$

$$[\mathcal{H}_C, d_0^\dagger] = 0 \quad (118)$$

Substituindo as equações (114) à (118) na equação (113), temos:

$$\dot{d}_0^\dagger = i\epsilon_d d_0^\dagger + i \sum_{k\alpha} V_{k\alpha} c_{k\alpha}^\dagger + i \lambda c_1^\dagger \quad (119)$$

E, substituindo a equação (119) na equação (111), teremos:

$$\left(i \frac{\partial}{\partial t} + \epsilon_d\right) G_{d_0^\dagger d_0}^r(t, t') = - \sum_{k\alpha} V_{k\alpha} G_{c_{k\alpha}^\dagger d_0}^r(t, t') - \lambda G_{c_1^\dagger d_0}^r(t, t') \quad (120)$$

com,

$$G_{c_{k\alpha}^\dagger d_0}^r(t, t') = -i\theta(t - t') \langle \{c_{k\alpha}^\dagger, d_0^\dagger(t')\} \rangle \quad (121)$$

ademais,  $G_{c_1^\dagger d_0}^r$  é dado pela equação (88).

Calculando a equação (121), derivando-a vamos obter:

$$i \frac{\partial}{\partial t} G_{c_{k\alpha}^\dagger d_0}^r(t, t') = \theta(t - t') \langle \{ \dot{c}_{k\alpha}^\dagger, d_0^\dagger(t') \} \rangle \quad (122)$$

Calculamos  $\dot{c}_{k\alpha}^\dagger$  através da equação de movimento de Heisenberg, assim:

$$\dot{c}_{k\alpha}^\dagger = i[\mathcal{H}, c_{k\alpha}^\dagger](t) \quad (123)$$

Substituindo o hamiltoniano do sistema na equação (123), deste modo:

$$\begin{aligned} \dot{c}_{k\alpha}^\dagger(t) = & i[\mathcal{H}_L, c_{k\alpha}^\dagger](t) + i[\mathcal{H}_D, c_{k\alpha}^\dagger](t) + i[\mathcal{H}_{DL}, c_{k\alpha}^\dagger](t) \\ & + i[\mathcal{H}_{DC}, c_{k\alpha}^\dagger](t) + i[\mathcal{H}_C, c_{k\alpha}^\dagger](t) \end{aligned} \quad (124)$$

Calculando separadamente cada parcela da equação (124), podemos escrever que:

$$[\mathcal{H}_L, c_{k\alpha}^\dagger] = \epsilon_k c_{k\alpha}^\dagger \quad (125)$$

$$[\mathcal{H}_D, c_{k\alpha}^\dagger] = 0 \quad (126)$$

$$[\mathcal{H}_{DL}, c_{k\alpha}^\dagger] = V_{k\alpha} d_0^\dagger \quad (127)$$

$$[\mathcal{H}_{DC}, c_{k\alpha}^\dagger] = 0 \quad (128)$$

$$[\mathcal{H}_C, c_{k\alpha}^\dagger] = 0 \quad (129)$$

assim, a equação (124) torna-se:

$$\dot{c}_{k\alpha}^\dagger(t) = i\epsilon_k c_{k\alpha}^\dagger + iV_{k\alpha} d_0^\dagger \quad (130)$$

A equação (130) mostra a interação dos leads com o ponto quântico através do parâmetro de acoplamento  $V_{k\alpha}$ . Substituindo a equação (130) na equação (122), o resultado é:

$$\left(i \frac{\partial}{\partial t} + \epsilon_k\right) \mathbf{G}_{c_{k\alpha}^\dagger d_0}^r(t, t') = -V_{k\alpha} \mathbf{G}_{d_0^\dagger d_0}^r(t, t') \quad (131)$$

Agora, vamos calcular  $G_{c_2^\dagger d_0}^r(t, t')$  da equação (108), que representa a função de Green definida pela equação (87) e, esta, evidencia a dinâmica para o segundo sítio do sistema descrito no capítulo 2. Por conseguinte:

$$G_{c_2^\dagger d_0}^r(t, t') = -i\theta(t - t')\{c_2^\dagger, d_0^\dagger(t')\}$$



Derivando a equação (87), obtemos o seguinte resultado:

$$i \frac{\partial}{\partial t} G_{c_2^\dagger d_0}^r(t, t') = \theta(t - t') \{\{\dot{c}_2^\dagger, d_0^\dagger(t')\}\} \quad (132)$$

Calculamos  $\dot{c}_2^\dagger$  através da equação de movimento de Heisenberg, teremos:

$$\dot{c}_2^\dagger(t) = i[\mathcal{H}, c_2^\dagger](t) \quad (133)$$

Substituindo o hamiltoniano do sistema descrito no capítulo 2 na equação (133), o resultado é dado por:

$$\begin{aligned} \dot{c}_2^\dagger(t) = & i[\mathcal{H}_L, c_2^\dagger](t) + i[\mathcal{H}_D, c_2^\dagger](t) + i[\mathcal{H}_{DL}, c_2^\dagger](t) \\ & + i[\mathcal{H}_{DC}, c_2^\dagger](t) + i[\mathcal{H}_C, c_2^\dagger](t) \end{aligned} \quad (134)$$

e calculando cada parcela da equação (134), temos:

$$[\mathcal{H}_L, c_2^\dagger] = 0 \quad (135)$$

$$[\mathcal{H}_D, c_2^\dagger] = 0 \quad (136)$$

$$[\mathcal{H}_{DL}, c_2^\dagger] = 0 \quad (137)$$

$$[\mathcal{H}_{DC}, c_2^\dagger] = 0 \quad (138)$$

$$[\mathcal{H}_C, c_2^\dagger] = -h_1 c_1^\dagger + \Delta_1 c_1 \quad (139)$$

Substituindo os resultados das equações (135) à (139) na equação (134), vamos ter:

$$\dot{c}_2^\dagger(t) = -ih_1 c_1^\dagger + i\Delta_1 c_1 \quad (140)$$

Substituindo a equação (140) na equação (132), podemos escrever que:

$$i \frac{\partial}{\partial t} G_{c_2^\dagger d_0}^r(t, t') = h_1 G_{c_1^\dagger d_0}^r(t, t') - \Delta_1 G_{c_1 d_0}^r(t, t') \quad (141)$$

### 3.5 Equações no domínio da frequência para o sistema contendo 2 sítios.

As equações (45), (59), (85), (97), (108), (120), (131) e (141), destacadas em negrito, representam a dinâmica completa do sistema: Ponto quântico acoplado a leads e a cadeia de átomos em zigue zague, com 2 sítios. Estas equações resultaram da interação de cada componente do sistema com o hamiltoniano proposto no capítulo 2. E desta forma, aplicamos a transformada de Fourier nas funções de Green a fim de transformá-las do domínio do tempo para o domínio da frequência com  $t' = 0$  [48-49]. Este recurso utilizado neste trabalho, visa otimizar os cálculos para o sistema estudado.

$$(\omega - \epsilon_d) G_{d_0 d_0}^r(\omega) = 1 + \sum_{k\alpha} V_\alpha G_{k\alpha, d_0}^r(\omega) + \lambda G_{c_1 d_0}^r(\omega) \quad (142)$$

$$(\omega + \epsilon_d) G_{d_0^\dagger d_0}^r(\omega) = - \sum_{k\alpha} V_{k\alpha} G_{c_{k\alpha}^\dagger d_0}^r(\omega) - \lambda G_{c_1^\dagger d_0}^r(\omega) \quad (143)$$

$$(\omega - \epsilon_k) G_{c_{k\alpha} d_0}^r(\omega) = V_{k\alpha} G_{d_0 d_0}^r(\omega) \quad (144)$$

$$(\omega + \epsilon_k) G_{c_{k\alpha}^\dagger d_0}^r(\omega) = - V_{k\alpha} G_{d_0^\dagger d_0}^r(\omega) \quad (145)$$

$$\omega G_{c_1 d_0}^r(\omega) = \lambda G_{d_0 d_0}^r(\omega) - h_1 G_{c_2 d_0}^r(\omega) - \Delta_1 G_{c_2^\dagger d_0}^r(\omega) \quad (146)$$

$$\omega G_{c_1^\dagger d_0}^r(\omega) = - \lambda G_{d_0^\dagger d_0}^r(\omega) + h_1 G_{c_2^\dagger d_0}^r(\omega) + \Delta_1 G_{c_2 d_0}^r(\omega) \quad (147)$$

$$\omega G_{c_2 d_0}^r(\omega) = -h_1 G_{c_1 d_0}^r(\omega) + \Delta_1 G_{c_1^\dagger d_0}^r(\omega) \quad (148)$$

$$\omega G_{c_2^\dagger d_0}^r(\omega) = h_1 G_{c_1^\dagger d_0}^r(\omega) - \Delta_1 G_{c_1 d_0}^r(\omega) \quad (149)$$

Com as equações (142) à (149) no domínio da frequência, iremos transformar cada par de equações para o formalismo matricial e, este será discutido na próxima secção.

### 3.6 O formalismo matricial para as equações no domínio da frequência para o sistema contendo 2 sítios.

Nesta secção, vamos agrupar aos pares as equações (142) à (149) e transformá-las para o formalismo matricial, facilitando desta maneira, os cálculos para encontrar a função de Green exata para o sistema contendo ponto quântico mais 2 sítios na cadeia de átomos em zigue zague. Observe que neste tópico, as matrizes serão destacadas em negrito e com letra maiúscula. Logo, para o par de equações (142) e (143), temos:

$$(\omega - \epsilon_d)G_{d_0 d_0}^r(\omega) = 1 + \sum_{k\alpha} V_{k\alpha} G_{k\alpha, d_0}^r(\omega) + \lambda G_{c_1 d_0}^r(\omega)$$

$$(\omega + \epsilon_d)G_{d_0^\dagger d_0}^r(\omega) = - \sum_{k\alpha} V_{k\alpha} G_{c_{k\alpha}^\dagger d_0}^r(\omega) - \lambda G_{c_1^\dagger d_0}^r(\omega)$$

obtemos a equação matricial,

$$\mathbf{W}\mathbf{G}_0 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + \mathbf{P}\mathbf{G}_{k\alpha} + \mathbf{Z}\mathbf{G}_1 \quad (150)$$

sendo as matrizes definidas por:

$$\mathbf{W} = \begin{bmatrix} (\omega - \epsilon_d) & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & (\omega + \epsilon_d) \end{bmatrix} \quad (151)$$

$$\mathbf{G}_0 = \begin{bmatrix} G_{d_0 d_0}^r(\omega) \\ G_{d_0^\dagger d_0}^r(\omega) \end{bmatrix} \quad (152)$$

$$\mathbf{P} = \begin{bmatrix} \sum_{k\alpha} V_{k\alpha} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & -\sum_{k\alpha} V_{k\alpha} \end{bmatrix} \quad (153)$$

$$\mathbf{G}_{k\alpha} = \begin{bmatrix} \mathbf{G}_{c_{k\alpha},d_0}^r(\omega) \\ \mathbf{G}_{c_{k\alpha}^\dagger,d_0}^r(\omega) \end{bmatrix} \quad (154)$$

$$\mathbf{Z} = \begin{bmatrix} \lambda & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & -\lambda \end{bmatrix} \quad (155)$$

$$\mathbf{G}_1 = \begin{bmatrix} \mathbf{G}_{c_1,d_0}^r(\omega) \\ \mathbf{G}_{c_1^\dagger,d_0}^r(\omega) \end{bmatrix} \quad (156)$$

Para as equações (144) e (145),

$$(\omega - \epsilon_k) \mathbf{G}_{c_{k\alpha},d_0}^r(\omega) = V_{k\alpha} \mathbf{G}_{d_0,d_0}^r(\omega)$$

$$(\omega + \epsilon_k) \mathbf{G}_{c_{k\alpha}^\dagger,d_0}^r(\omega) = -V_{k\alpha} \mathbf{G}_{d_0^\dagger,d_0}^r(\omega)$$

Podemos escrever que:

$$\mathbf{G}_{k\alpha} = \mathbf{V} \mathbf{G}_0 \quad (157)$$

com  $\mathbf{G}_0$  e  $\mathbf{G}_{k\alpha}$  dados pelas equações (152) e (154), respectivamente. Ademais,

$$V = \begin{bmatrix} \frac{V_{k\alpha}}{\omega - \epsilon_k} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & -\frac{V_{k\alpha}}{\omega + \epsilon_k} \end{bmatrix} \quad (158)$$

E para o par de equações (146) e (147),

$$\omega G_{c_1 d_0}^r(\omega) = \lambda G_{d_0 d_0}^r(\omega) - h_1 G_{c_2 d_0}^r(\omega) - \Delta_1 G_{c_2^\dagger d_0}^r(\omega)$$

$$\omega G_{c_1^\dagger d_0}^r(\omega) = -\lambda G_{d_0^\dagger d_0}^r(\omega) + h_1 G_{c_2^\dagger d_0}^r(\omega) + \Delta_1 G_{c_2 d_0}^r(\omega)$$

Na forma matricial, podemos escrever como:

$$\mathbf{G}_1 = \mathbf{Q} \mathbf{G}_0 + \mathbf{J} \mathbf{G}_2 \quad (159)$$

Com  $\mathbf{G}_0$  e  $\mathbf{G}_1$  dados pelas equações (152) e (156), respetivamente. Além disso,

$$\mathbf{Q} = \begin{bmatrix} \frac{\lambda}{\omega} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & -\frac{\lambda}{\omega} \end{bmatrix} \quad (160)$$

$$\mathbf{J} = \begin{bmatrix} -\frac{h_1}{\omega} & -\frac{\Delta_1}{\omega} \\ \frac{\Delta_1}{\omega} & \frac{h_1}{\omega} \end{bmatrix} \quad (161)$$

$$\mathbf{G}_2 = \begin{bmatrix} G_{c_2 d_0}^r(\omega) \\ G_{c_2^\dagger d_0}^r(\omega) \end{bmatrix} \quad (162)$$

E por fim, transformamos para forma matricial as equações (148) e (149),

$$\omega G_{c_2 d_0}^r(\omega) = -h_1 G_{c_1 d_0}^r(\omega) + \Delta_1 G_{c_1^\dagger d_0}^r(\omega)$$

$$\omega G_{c_2^\dagger d_0}^r(\omega) = h_1 G_{c_1^\dagger d_0}^r(\omega) - \Delta_1 G_{c_1 d_0}^r(\omega)$$

portanto,

$$\mathbf{G}_2 = \mathbf{H} \mathbf{G}_1 \quad (163)$$

com  $\mathbf{G}_1$  e  $\mathbf{G}_2$  dados pelas equações (156) e (162), respectivamente. E,

$$\mathbf{H} = \begin{bmatrix} -\frac{\Delta_1}{\omega} & \frac{h_1}{\omega} \\ -\frac{h_1}{\omega} & \frac{\Delta_1}{\omega} \end{bmatrix} \quad (164)$$

Em resumo, temos as equações (150), (157), (159) e (163) que descrevem a física do sistema: Ponto quântico mais cadeia de átomos em zigue zague, com apenas 2 sítios. Isto é,

$$\mathbf{W} \mathbf{G}_0 = \begin{pmatrix} \mathbf{1} \\ \mathbf{0} \end{pmatrix} + \mathbf{P} \mathbf{G}_{k\alpha} + \mathbf{Z} \mathbf{G}_1$$

$$\mathbf{G}_{k\alpha} = \mathbf{V} \mathbf{G}_0$$

$$\mathbf{G}_1 = \mathbf{Q} \mathbf{G}_0 + \mathbf{J} \mathbf{G}_2$$

$$\mathbf{G}_2 = \mathbf{H} \mathbf{G}_1$$

A partir destas equações com formalismo matricial, podemos encontrar  $G_{d_0 d_0}^r(\omega)$ , que é a função de Green exata para o sistema estudado. Para isso, faremos interações de cada sítio com o seu anterior. Começamos pelo sítio 2 e, substituindo a equação (163) na equação (159), teremos:

$$\mathbf{G}_1 = \left\{ \begin{pmatrix} \mathbf{1} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{1} \end{pmatrix} - \mathbf{J} \mathbf{H} \right\}^{-1} \mathbf{Q} \mathbf{G}_0 \quad (165)$$

Substituindo a equação (157) e (165) na equação (150), chegamos ao resultado:

$$WG_0 - PVG_0 - Z \left\{ \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} - JH \right\}^{-1} QG_0 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (166)$$

por definição,

$$T = Z \left\{ \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} - JH \right\}^{-1} Q \quad (167)$$

em vista disso,

$$[W - PV - T]G_0 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (168)$$

organizando a equação (168),

$$G_0 = [W - PV - T]^{-1} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (169)$$

onde,

$$C = [W - PV - T]^{-1}, \quad (170)$$

lembrando que  $G_0$ ,  $W$ ,  $P$ ,  $V$  e  $T$  são dadas pelas equações (152), (151), (153), (158) e (167), respectivamente.

Além disto, precisamos calcular a equação matricial (170). Após seu cálculo, substituímos seu resultado na equação (169), e assim sendo, acharemos a função de Green  $G_{a_0 a_0}^r(\omega)$  desejada. Por conseguinte,

$$PV = \begin{bmatrix} \sum_{k\alpha} \frac{V_{k\alpha}^2}{\omega - \epsilon_k} & 0 \\ 0 & \sum_{k\alpha} \frac{V_{k\alpha}^2}{\omega + \epsilon_k} \end{bmatrix} \quad (171)$$

por definição,

$$i\Gamma = - \sum_{k\alpha} \frac{V_{k\alpha}^2}{\omega - \epsilon_k}, \quad (172)$$

desse modo,

$$PV = \begin{bmatrix} i\Gamma & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & i\Gamma \end{bmatrix} \quad (173)$$

Calculando a equação (167), obtemos:

$$\mathbf{T} = \begin{bmatrix} \frac{(1 - \Theta)\lambda^2}{\omega(1 - 2\Theta)} & \frac{\Theta\lambda^2}{\omega(1 - 2\Theta)} \\ \frac{\Theta\lambda^2}{\omega(1 - 2\Theta)} & \frac{(1 - \Theta)\lambda^2}{\omega(1 - 2\Theta)} \end{bmatrix} \quad (174)$$

com,

$$\Theta = \frac{2\Delta^2}{\omega^2} \quad (175)$$

Além disso, precisamos definir que:

$$R(\omega) = \frac{(1 - \Theta)}{\omega(1 - 2\Theta)} \quad (176)$$

$$S(\omega) = \frac{\Theta}{\omega(1 - 2\Theta)} \quad (177)$$

A equação (174) torna-se:

$$\mathbf{T} = \begin{bmatrix} R(\omega)\lambda^2 & S(\omega)\lambda^2 \\ S(\omega)\lambda^2 & R(\omega)\lambda^2 \end{bmatrix} \quad (178)$$



Substituindo as equações (151), (173) e (178) na equação (169), teremos:

$$\mathbf{G}_0 = \begin{bmatrix} \omega - \epsilon_d + i\Gamma - R(\omega)\lambda^2 & -S(\omega)\lambda^2 \\ -S(\omega)\lambda^2 & \omega + \epsilon_d + i\Gamma - R(\omega)\lambda^2 \end{bmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (179)$$

Após o cálculo da matriz inversa, a equação (179) torna-se:

$$\mathbf{G}_0 = \begin{pmatrix} \frac{\omega + \epsilon_d + i\Gamma - R\lambda^2}{(\omega - \epsilon_d + i\Gamma - R\lambda^2)(\omega + \epsilon_d + i\Gamma - R\lambda^2) - S^2\lambda^4} \\ \frac{S\lambda^2}{(\omega - \epsilon_d + i\Gamma - R\lambda^2)(\omega + \epsilon_d + i\Gamma - R\lambda^2) - S^2\lambda^4} \end{pmatrix} \quad (180)$$

A função de Green do sistema será dada por:

$$G_{d_0 d_0}^r = \frac{\omega + \epsilon_d + i\Gamma - R\lambda^2}{(\omega - \epsilon_d + i\Gamma - R\lambda^2)(\omega + \epsilon_d + i\Gamma - R\lambda^2) - S^2\lambda^4} \quad (181)$$

Organizando a equação (181), temos:

$$G_{d_0 d_0}^r = \frac{1}{\omega - \epsilon_d + i\Gamma - \lambda^2 R(\omega) \left\{ 1 + \lambda^2 \frac{S^2(\omega)/R(\omega)}{\omega + \epsilon_d - R(\omega)\lambda^2 + i\Gamma} \right\}} \quad (182)$$

e definindo,

$$T(\omega) = \frac{S^2(\omega)}{R(\omega)} \quad (183)$$

$$\tilde{R}(\omega) = \frac{T(\omega)}{\omega + \epsilon_d - R(\omega)\lambda^2 + i\Gamma} \quad (184)$$

Portanto, a função de Green do sistema: Ponto quântico mais cadeia de átomos em zigue zague com 2 sítios é:

$$G_{d_0 d_0}^r = \frac{1}{\omega - \epsilon_d + i\Gamma - \lambda^2 R(\omega) \{1 + \lambda^2 \tilde{R}(\omega)\}} \quad (185)$$

com  $R(\omega)$  e  $\tilde{R}(\omega)$  dados pelas equações (176) e (184), respectivamente.

Para o caso  $\Delta = 0$  na equação (185), ou seja, desacoplando o substrato supercondutor da cadeia de átomos em zigue zague, obtemos:

$$G_{d_0 d_0}^r = \frac{1}{\omega - \epsilon_d + i\Gamma - \frac{\lambda^2}{\omega}} \quad (186)$$

E no caso limite  $\lambda = 0$ , isto é, desacoplando a cadeia de átomos em zigue zague, readquirimos o resultado esperado para o ponto quântico com os eletrodos apenas, temos:

$$G_{d_0 d_0}^r = \frac{1}{\omega - \epsilon_d + i\Gamma} \quad (187)$$

### 3.7 A função de Green do ponto quântico com 3 sítios na cadeia de átomos em zigue zague.

Vamos resolver a equação (47) para o sistema com 3 sítios, ou seja:

$$G_{c_1 d_0}^r(t, t') = -i\theta(t - t') \langle \{c_1(t), d_0^\dagger(t')\} \rangle$$

Derivando a equação (47) obtemos a equação (61). E substituindo a equação (62) na equação (61) chegamos na equação (63), dada por:

$$i \frac{\partial}{\partial t} G_{c_1 d_0}^r(t, t') = \theta(t - t') \langle \{\dot{c}_1(t), d_0^\dagger(t')\} \rangle$$

Na equação (63), iremos calcular  $\dot{c}_1(t)$  através da equação de Heisenberg, mostrado na equação (64) e, também expresso na equação (65), isto é:

$$\dot{c}_1(t) = i[\mathcal{H}_L, c_1](t) + i[\mathcal{H}_D, c_1](t) + i[\mathcal{H}_{DL}, c_1](t) + i[\mathcal{H}_{DC}, c_1](t) + i[\mathcal{H}_C, c_1](t)$$

Calculando cada parcela da equação (65) para o sistema ponto quântico acoplado a cadeia de átomos em zigue zague com 3 sítios, temos como resultado de cada parcela da equação (65), as equações (66) a (69) e:

$$[\mathcal{H}_C, c_1] = h_1 c_2 + \Delta_1 c_2^\dagger + h_2 c_3 + \Delta_2 c_3^\dagger \quad (188)$$

Substituindo as equações (66) a (69) e a equação (188) na equação (65), teremos o resultado:

$$\dot{c}_1(t) = -i\lambda d_0 + ih_1 c_2 + i\Delta_1 c_2^\dagger + ih_2 c_3 + i\Delta_2 c_3^\dagger \quad (189)$$

A equação (189) mostra que o sítio 1 interage com o ponto quântico através do parâmetro de acoplamento  $\lambda$ , com o sítio 2 por meio da constante de acoplamento  $h_1$  e do parâmetro de Cooper  $\Delta_1$  e, com o sítio 3 através da constante de acoplamento  $h_2$  e do parâmetro de Cooper  $\Delta_2$ . Substituindo a equação (189) na equação (63), temos:

$$\begin{aligned} i \frac{\partial}{\partial t} G_{c_1 d_0}^r(t, t') &= \lambda G_{d_0 d_0}^r(t, t') - h_1 G_{c_2 d_0}^r(t, t') - \Delta_1 G_{c_2^\dagger d_0}^r(t, t') \\ &\quad - h_2 G_{c_3 d_0}^r(t, t') - \Delta_2 G_{c_3^\dagger d_0}^r(t, t') \end{aligned} \quad (190)$$

com  $G_{d_0 d_0}^r$ ,  $G_{c_2 d_0}^r$  e  $G_{c_2^\dagger d_0}^r$  dadas pelas equações (61), (86) e (87), respectivamente. Além disso,

$$G_{c_3 d_0}^r(t, t') = -i\theta(t - t') \langle \{c_3(t), d_0^\dagger(t')\} \rangle \quad (191)$$

e,

$$G_{c_3^\dagger d_0}^r(t, t') = -i\theta(t - t') \langle \{c_3^\dagger(t), d_0^\dagger(t')\} \rangle \quad (192)$$

Na equação (190) devemos calcular  $G_{c_2 d_0}^r$ ,  $G_{c_2^\dagger d_0}^r$ ,  $G_{c_3 d_0}^r$  e  $G_{c_3^\dagger d_0}^r$ . Começamos por  $G_{c_2 d_0}^r$ , ou seja:

$$G_{c_2 d_0}^r(t, t') = -i\theta(t - t') \langle \{c_2(t), d_0^\dagger(t')\} \rangle$$

e derivando a equação (86), obtemos a equação (88). Nesta equação vamos calcular  $\dot{c}_2(t)$ , expresso pela equação (89), através da equação de Heisenberg. Assim, chegamos a equação (90), dada por:

$$\dot{c}_2(t) = i[\mathcal{H}_L, c_2](t) + i[\mathcal{H}_D, c_2](t) + i[\mathcal{H}_{DL}, c_2](t) + i[\mathcal{H}_{DC}, c_2](t) + i[\mathcal{H}_C, c_2](t)$$

e o resultado de cada parcela da equação (90) são dadas pelas equações (91) a (94) e, ademais:

$$[\mathcal{H}_C, c_2] = h_1 c_1 - \Delta_1 c_1^\dagger \quad (193)$$

Substituindo as equações (91) a (94) e a equação (193) na equação (90), obtemos:

$$\dot{c}_2(t) = ih_1 c_1 - i\Delta_1 c_1^\dagger \quad (194)$$

A equação (194) mostra o sítio 2 interagindo apenas com o sítio 1 através da constante de acoplamento  $h_1$  e pelo parâmetro de Cooper  $\Delta_1$ . Substituindo a equação (194) na equação (88), chegamos ao resultado:

$$i \frac{\partial}{\partial t} G_{c_2 d_0}^r(t, t') = -h_1 G_{c_1 d_0}^r(t, t') + \Delta_1 G_{c_1^\dagger d_0}^r(t, t') \quad (195)$$

com  $G_{c_1 d_0}^r$  e  $G_{c_1^\dagger d_0}^r$  mostrados nas equações (47) e, por:

$$G_{c_1^\dagger d_0}^r(t, t') = -i\theta(t - t') \{ \dot{c}_1^\dagger(t), d_0^\dagger(t') \} \quad (196)$$

Iremos agora resolver a equação (196). Para isto, devemos derivá-la, ou seja:

$$i \frac{\partial}{\partial t} G_{c_1^\dagger d_0}^r(t, t') = \theta(t - t') \{ \dot{c}_1^\dagger, d_0^\dagger(t') \} \quad (197)$$

Na equação (197) devemos calcular  $\dot{c}_1^\dagger$  através da equação de Heisenberg, portanto teremos:

$$\dot{c}_1^\dagger(t) = i[\mathcal{H}, c_1^\dagger](t) \quad (198)$$

Substituindo o hamiltoniano do sistema escrito no capítulo 2 na equação (198), temos:

$$\begin{aligned} \dot{c}_1^\dagger(t) = & i[\mathcal{H}_L, c_1^\dagger](t) + i[\mathcal{H}_D, c_1^\dagger](t) + i[\mathcal{H}_{DL}, c_1^\dagger](t) + i[\mathcal{H}_{DC}, c_1^\dagger](t) \\ & + i[\mathcal{H}_C, c_1^\dagger](t) \end{aligned} \quad (199)$$

Calculando cada parcela da equação (199), vamos obter os seguintes resultados:

$$[\mathcal{H}_L, c_1^\dagger] = 0 \quad (200)$$

$$[\mathcal{H}_D, c_1^\dagger] = 0 \quad (201)$$

$$[\mathcal{H}_{DL}, c_1^\dagger] = 0 \quad (202)$$

$$[\mathcal{H}_{DC}, c_1^\dagger] = \lambda d_0 \quad (203)$$

$$[\mathcal{H}_C, c_1^\dagger] = -\Delta_1 c_2 - h_1 c_2^\dagger - \Delta_2 c_3 - h_2 c_3^\dagger \quad (204)$$

Substituindo as equações (200) a (204) na equação (199), obtemos:

$$\dot{c}_1^\dagger(t) = i\lambda d_0 - i\Delta_1 c_2 - ih_1 c_2^\dagger - i\Delta_2 c_3 - ih_2 c_3^\dagger \quad (205)$$

Substituindo a equação (205) na equação (197), chegamos no resultado:

$$\begin{aligned} i \frac{\partial}{\partial t} \mathbf{G}_{c_1^\dagger d_0}^r(\mathbf{t}, \mathbf{t}') & \\ & = -\lambda \mathbf{G}_{d_0^\dagger d_0}^r(\mathbf{t}, \mathbf{t}') + \Delta_1 \mathbf{G}_{c_2 d_0}^r(\mathbf{t}, \mathbf{t}') + h_1 \mathbf{G}_{c_2^\dagger d_0}^r(\mathbf{t}, \mathbf{t}') \\ & + \Delta_2 \mathbf{G}_{c_3 d_0}^r(\mathbf{t}, \mathbf{t}') + h_2 \mathbf{G}_{c_3^\dagger d_0}^r(\mathbf{t}, \mathbf{t}') \end{aligned} \quad (206)$$

Pela equação (206), vamos calcular  $G_{d_0^\dagger d_0}^r$  que está representada pela equação (109). Isto é:

$$G_{d_0^\dagger d_0}^r(t, t') = -i\theta(t - t')\{d_0^\dagger(t), d_0^\dagger(t')\}$$

Derivando a equação (109), obtemos a equação (111). Nesta equação precisamos calcular  $\dot{d}_0^\dagger$  através da equação de movimento de Heisenberg. Dessa forma, substituindo o hamiltoniano do sistema apresentado no capítulo 2 na equação (111), teremos a equação (113), representada por:

$$\dot{d}_0^\dagger = i[\mathcal{H}_L, d_0^\dagger](t) + i[\mathcal{H}_D, d_0^\dagger](t) + i[\mathcal{H}_{DL}, d_0^\dagger](t) + i[\mathcal{H}_{DC}, d_0^\dagger](t) + i[\mathcal{H}_C, d_0^\dagger](t)$$

Vamos calcular cada parcela da equação (113). Com isso, os resultados são fornecidos pelas equações (114) a (118). Que substituindo na equação (113), obtemos a equação (119). E por fim, substituindo a equação (119) na equação (111), o resultado é dado pela equação (120), deste modo:

$$\left(i\frac{\partial}{\partial t} + \epsilon_d\right) G_{d_0^\dagger d_0}^r(\mathbf{t}, \mathbf{t}') = -\sum_{k\alpha} V_{k\alpha} G_{c_{k\alpha}^\dagger d_0}^r(\mathbf{t}, \mathbf{t}') - \lambda G_{c_1^\dagger d_0}^r(\mathbf{t}, \mathbf{t}')$$

com  $G_{c_{k\alpha}^\dagger d_0}^r$  e  $G_{c_1^\dagger d_0}^r$  dadas pelas equações (121) e (196), respectivamente.

Observando a equação (120), vamos calcular  $G_{c_{k\alpha}^\dagger d_0}^r$  representado pela equação (121), dessa forma:

$$G_{c_{k\alpha}^\dagger d_0}^r(\mathbf{t}, \mathbf{t}') = -i\theta(t - t')\{c_{k\alpha}^\dagger, d_0^\dagger(t')\}$$

Derivando a equação (121) chegamos na equação (122), onde vamos calcular  $\dot{c}_{k\alpha}^\dagger$  através da equação de Heisenberg representada pela equação (123), ou seja:

$$\dot{c}_{k\alpha}^\dagger = i[\mathcal{H}, c_{k\alpha}^\dagger](t)$$

Substituindo o hamiltoniano do sistema descrito no capítulo 2 na equação (123), chegamos ao resultado da equação (124), que é:

$$\dot{c}_{k\alpha}^\dagger(t) = i[\mathcal{H}_L, c_{k\alpha}^\dagger](t) + i[\mathcal{H}_D, c_{k\alpha}^\dagger](t) + i[\mathcal{H}_{DL}, c_{k\alpha}^\dagger](t) + i[\mathcal{H}_{DC}, c_{k\alpha}^\dagger](t) + i[\mathcal{H}_C, c_{k\alpha}^\dagger](t)$$

Vamos calcular cada parcela da equação (124). Seus resultados estão expressos nas equações (125) a (129). E substituindo-os na equação (124), temos a equação (130), assim:

$$\dot{c}_{k\alpha}^\dagger(t) = i\epsilon_k c_{k\alpha}^\dagger + iV_{k\alpha} d_0^\dagger$$

E por fim, substituindo a equação (130) na equação (122), obtemos a equação (131), isto é:

$$\left(i \frac{\partial}{\partial t} + \epsilon_k\right) G_{c_{k\alpha}^\dagger d_0}^r(t, t') = -V_{k\alpha} G_{d_0^\dagger d_0}^r(t, t')$$

Retornando na equação (206), vamos calcular  $G_{c_2^\dagger d_0}^r$  dada pela equação (87). Por conseguinte:

$$G_{c_2^\dagger d_0}^r(t, t') = -i\theta(t - t') \langle \{c_2^\dagger, d_0^\dagger(t')\} \rangle$$

e derivando a equação (87), chegamos na equação (132), sendo assim:

$$i \frac{\partial}{\partial t} G_{c_2^\dagger d_0}^r(t, t') = \theta(t - t') \langle \{\dot{c}_2^\dagger, d_0^\dagger(t')\} \rangle$$

Na equação (132), vamos calcular  $\dot{c}_2^\dagger$  através da equação de movimento de Heisenberg, representada pela equação (133). Em vista disto:

$$\dot{c}_2^\dagger(t) = i[\mathcal{H}, c_2^\dagger](t)$$

Substituindo o hamiltoniano do sistema descrito no capítulo 2 na equação (133), temos:

$$\dot{c}_2^\dagger(t) = i[\mathcal{H}_L, c_2^\dagger](t) + i[\mathcal{H}_D, c_2^\dagger](t) + i[\mathcal{H}_{DL}, c_2^\dagger](t) + i[\mathcal{H}_{DC}, c_2^\dagger](t) + i[\mathcal{H}_C, c_2^\dagger](t)$$

Posteriormente, calculamos cada parcela da equação (133), onde os resultados são mostrados nas equações (135) a (139). Substituindo estes resultados na equação (133), obtemos a equação (140). E ainda, substituindo a equação (140) na equação (132), tem-se a equação (141), ou seja:

$$i \frac{\partial}{\partial t} G_{c_2^\dagger d_0}^r(t, t') = h_1 G_{c_1^\dagger d_0}^r(t, t') - \Delta_1 G_{c_1 d_0}^r(t, t')$$

Pela equação (206), vamos calcular  $G_{c_3 d_0}^r(t, t')$ , que é expressa por:

$$G_{c_3 d_0}^r(t, t') = -i\theta(t - t') \langle \{c_3, d_0^\dagger(t')\} \rangle \quad (207)$$

e derivando a equação (207) obtemos:

$$i \frac{\partial}{\partial t} G_{c_3 d_0}^r(t, t') = \theta(t - t') \langle \{ \dot{c}_3(t), d_0^\dagger(t') \} \rangle \quad (208)$$

Devemos calcular  $\dot{c}_3(t)$  utilizando a equação de movimento de Heisenberg, ou melhor:

$$\dot{c}_3(t) = i[\mathcal{H}, c_3](t), \quad (209)$$

e substituindo o hamiltoniano do sistema descrito no capítulo 2 na equação (209), temos:

$$\begin{aligned} \dot{c}_3(t) = & i[\mathcal{H}_L, c_3](t) + i[\mathcal{H}_D, c_3](t) + i[\mathcal{H}_{DL}, c_3](t) + i[\mathcal{H}_{DK}, c_3](t) \\ & + i[\mathcal{H}_K, c_3](t) \end{aligned} \quad (210)$$

Calculando separadamente cada parcela da equação (210), os resultados são:

$$[\mathcal{H}_L, c_3] = 0 \quad (211)$$

$$[\mathcal{H}_D, c_3] = 0 \quad (212)$$



$$[\mathcal{H}_{DL}, c_3] = 0 \quad (213)$$

$$[\mathcal{H}_{DK}, c_3] = 0 \quad (214)$$

$$[\mathcal{H}_C, c_3] = h_2 c_1 - \Delta_2 c_1^\dagger \quad (215)$$

e substituindo as equações (211) a (215) na equação (210), vamos obter:

$$\dot{c}_3(t) = ih_2 c_1 - i\Delta_2 c_1^\dagger \quad (216)$$

Observamos que o sítio 3 interage com o sítio 1 através do parâmetro de acoplamento  $h_2$  e com o substrato supercondutor por meio do parâmetro de Cooper  $\Delta_2$ .

E finalmente, substituindo a equação (216) na equação (208) teremos a função de Green do sítio 3 dada por:

$$i \frac{\partial}{\partial t} G_{c_3 d_0}^r(t, t') = -h_2 G_{c_1 d_0}^r(t, t') + \Delta_2 G_{c_1^\dagger d_0}^r(t, t') \quad (217)$$

Por fim, vamos calcular  $G_{c_3^\dagger d_0}^r(t, t')$ . Por definição podemos escrever que:

$$G_{c_3^\dagger d_0}^r(t, t') = -i\theta(t - t') \langle \{c_3^\dagger, d_0^\dagger(t')\} \rangle \quad (218)$$

e derivando a equação (218), obtém-se:

$$i \frac{\partial}{\partial t} G_{c_3^\dagger d_0}^r(t, t') = \theta(t - t') \langle \{\dot{c}_3^\dagger(t), d_0^\dagger(t')\} \rangle \quad (219)$$

Vamos calcular  $\dot{c}_3^\dagger(t)$  que está inserido na equação (219). Para isto, utilizaremos a equação de movimento de Heisenberg. Por conseguinte:

$$\dot{c}_3^\dagger(t) = i[\mathcal{H}, c_3^\dagger](t) \quad (220)$$

e substituindo o hamiltoniano descrito no capítulo 2 na equação (220), tem-se:

$$\begin{aligned} \dot{c}_3^\dagger(t) = & i[\mathcal{H}_L, c_3^\dagger](t) + i[\mathcal{H}_D, c_3^\dagger](t) + i[\mathcal{H}_{DL}, c_3^\dagger](t) \\ & + i[\mathcal{H}_{DC}, c_3^\dagger](t) + i[\mathcal{H}_C, c_3^\dagger](t) \end{aligned} \quad (221)$$

Vamos calcular cada parcela da equação (221). Sendo assim:

$$[\mathcal{H}_L, c_3^\dagger] = 0 \quad (222)$$

$$[\mathcal{H}_D, c_3^\dagger] = 0 \quad (223)$$

$$[\mathcal{H}_{DL}, c_3^\dagger] = 0 \quad (224)$$

$$[\mathcal{H}_{DC}, c_3^\dagger] = 0 \quad (225)$$

$$[\mathcal{H}_C, c_3^\dagger] = -h_2 c_1^\dagger + \Delta_2 c_1 \quad (226)$$

Vamos substituir as equações (222) a (226) na equação (221). Desse modo:

$$\dot{c}_3^\dagger(t) = -ih_2 c_1^\dagger + i\Delta_2 c_1 \quad (227)$$

Substituindo a equação (227) na equação (219), temos:

$$i \frac{\partial}{\partial t} \mathbf{G}_{c_3^\dagger d_0}^r(\mathbf{t}, \mathbf{t}') = h_2 \mathbf{G}_{c_1^\dagger d_0}^r(\mathbf{t}, \mathbf{t}') - \Delta_2 \mathbf{G}_{c_1 d_0}^r(\mathbf{t}, \mathbf{t}') \quad (228)$$

### 3.8 Equações no domínio da frequência para o sistema com 3 sítios

As equações (45), (59), (120), (131), (141), (190), (195), (206), (217) e (228) destacadas em negrito, representam a dinâmica completa do sistema: Ponto quântico acoplado a leads e a cadeia de átomos em zigue zague, com 3 sítios. Estas equações resultaram da interação de cada

componente do sistema com o hamiltoniano proposto no capítulo 2. De maneira análoga a subsecção 3.4.1 deste trabalho, aplicamos a transformada de Fourier nas funções de Green encontradas a fim de transformá-las do domínio do tempo para o domínio da frequência.

$$(\omega - \epsilon_d)G_{d_0 d_0}^r(\omega) = 1 + \sum_{k\alpha} V_{k\alpha} G_{k\alpha, d_0}^r(\omega) + \lambda G_{c_1 d_0}^r(\omega)$$

$$(\omega + \epsilon_d)G_{d_0^\dagger d_0}^r(\omega) = - \sum_{k\alpha} V_{k\alpha} G_{c_{k\alpha}^\dagger d_0}^r(\omega) - \lambda G_{c_1^\dagger d_0}^r(\omega)$$

$$(\omega - \epsilon_k)G_{c_{k\alpha} d_0}^r(\omega) = V_{k\alpha} G_{d_0 d_0}^r(\omega)$$

$$(\omega + \epsilon_k)G_{c_{k\alpha}^\dagger d_0}^r(\omega) = - V_{k\alpha} G_{d_0^\dagger d_0}^r(\omega)$$

$$\begin{aligned} \omega G_{c_1 d_0}^r(\omega) &= \lambda G_{d_0 d_0}^r(\omega) - h_1 G_{c_2 d_0}^r(\omega) - \Delta_1 G_{c_2^\dagger d_0}^r(\omega) \\ &\quad - h_2 G_{c_3 d_0}^r(\omega) - \Delta_2 G_{c_3^\dagger d_0}^r(\omega) \end{aligned} \quad (229)$$

$$\begin{aligned} \omega G_{c_1^\dagger d_0}^r(\omega) &= - \lambda G_{d_0^\dagger d_0}^r(\omega) + \Delta_1 G_{c_2 d_0}^r(\omega) + h_1 G_{c_2^\dagger d_0}^r(\omega) \\ &\quad + \Delta_2 G_{c_3 d_0}^r(\omega) + h_2 G_{c_3^\dagger d_0}^r(\omega) \end{aligned} \quad (230)$$

$$\omega G_{c_2 d_0}^r(\omega) = - h_1 G_{c_1 d_0}^r(\omega) + \Delta_1 G_{c_1^\dagger d_0}^r(\omega) \quad (231)$$

$$\omega G_{c_2^\dagger d_0}^r(\omega) = - \Delta_1 G_{c_1 d_0}^r(\omega) + h_1 G_{c_1^\dagger d_0}^r(\omega) \quad (232)$$

$$\omega G_{c_3 d_0}^r(\omega) = - h_2 G_{c_1 d_0}^r(\omega) + \Delta_2 G_{c_1^\dagger d_0}^r(\omega) \quad (233)$$

$$\omega G_{c_3^\dagger d_0}^r(\omega) = - \Delta_2 G_{c_1 d_0}^r(\omega) + h_2 G_{c_1^\dagger d_0}^r(\omega) \quad (234)$$

Com as equações no domínio da frequência descritas nesta secção 3.7, cada par de equações será transformado para o formalismo matricial e, este será discutido na próxima secção.

### 3.9 O formalismo matricial para equações no domínio da frequência para o sistema contendo 3 sítios.

Nesta secção, vamos agrupar aos pares as equações descritas na secção 3.7 e transformá-las para o formalismo matricial, facilitando desta maneira, os cálculos para encontrar a função de Green exata para o sistema contendo ponto quântico mais 3 sítios na cadeia de átomos em zigue zague. Observe que neste tópico, as matrizes serão destacadas em negrito e com letra maiúscula. Logo, para o par de equações (142) e (143) a seguir, temos:

$$(\omega - \epsilon_d)G_{d_0 d_0}^r(\omega) = 1 + \sum_{k\alpha} V_{k\alpha} G_{k\alpha, d_0}^r(\omega) + \lambda G_{c_1 d_0}^r(\omega)$$

$$(\omega + \epsilon_d)G_{d_0^\dagger d_0}^r(\omega) = - \sum_{k\alpha} V_{k\alpha} G_{c_{k\alpha}^\dagger d_0}^r(\omega) - \lambda G_{c_1^\dagger d_0}^r(\omega)$$

onde sua equação matricial já foi calculada na secção 3.5 e dada pela equação (150), isto é:

$$\mathbf{W}\mathbf{G}_0 = \begin{pmatrix} \mathbf{1} \\ \mathbf{0} \end{pmatrix} + \mathbf{P}\mathbf{G}_{k\alpha} + \mathbf{Z}\mathbf{G}_1$$

com  $\mathbf{W}$ ,  $\mathbf{G}_0$ ,  $\mathbf{P}$ ,  $\mathbf{G}_{k\alpha}$ ,  $\mathbf{Z}$  e  $\mathbf{G}_1$  representados pelas equações (151), (152), (153), (154), (155) e (156), respectivamente.

Analogamente como feito para as equações (142) e (143), ou seja, foram transformadas do domínio da frequência para o formalismo matricial, vamos fazer agora para o par de equações (144) e (145), desse modo:

$$(\omega - \epsilon_k)G_{c_{k\alpha}, d_0}^r(\omega) = V_{k\alpha} G_{d_0 d_0}^r(\omega)$$

$$(\omega + \epsilon_k)G_{c_{k\alpha}^\dagger d_0}^r(\omega) = -V_{k\alpha} G_{d_0^\dagger d_0}^r(\omega)$$

onde a equação matricial foi calculada na secção 3.5 e representada pela equação (157). Por conseguinte:

$$\mathbf{G}_{k\alpha} = \mathbf{V}\mathbf{G}_0$$

com  $\mathbf{G}_0$ ,  $\mathbf{G}_{k\alpha}$  e  $\mathbf{V}$  dados pelas equações (152), (154) e (158), respectivamente.

Para o par de equações (229) e (230),

$$\omega G_{c_1 d_0}^r(\omega) = \lambda G_{d_0 d_0}^r(\omega) - h_1 G_{c_2 d_0}^r(\omega) - \Delta_1 G_{c_2^\dagger d_0}^r(\omega) - h_2 G_{c_3 d_0}^r(\omega) - \Delta_2 G_{c_3^\dagger d_0}^r(\omega)$$

$$\omega G_{c_1^\dagger d_0}^r(\omega) = -\lambda G_{d_0^\dagger d_0}^r(\omega) + \Delta_1 G_{c_2 d_0}^r(\omega) + h_1 G_{c_2^\dagger d_0}^r(\omega) + \Delta_2 G_{c_3 d_0}^r(\omega) + h_2 G_{c_3^\dagger d_0}^r(\omega)$$

Na forma matricial podemos escrever como:

$$\mathbf{G}_1 = \mathbf{Q}\mathbf{G}_0 + \mathbf{S}\mathbf{G}_2 + \mathbf{K}\mathbf{G}_3 \quad (235)$$

com  $\mathbf{G}_0$ ,  $\mathbf{G}_1$ ,  $\mathbf{Q}$  e  $\mathbf{G}_2$  representados pelas equações (152), (156), (157) e (162), respectivamente.

Ademais:

$$\mathbf{S} = \begin{bmatrix} -\frac{h_1}{\omega} & -\frac{\Delta_1}{\omega} \\ \frac{\Delta_1}{\omega} & \frac{h_1}{\omega} \end{bmatrix} \quad (236)$$

e

$$\mathbf{K} = \begin{bmatrix} -\frac{h_2}{\omega} & -\frac{\Delta_2}{\omega} \\ \frac{\Delta_2}{\omega} & \frac{h_2}{\omega} \end{bmatrix} \quad (237)$$

Para o quarto par de equações (231) e (232),

$$\omega G_{c_2 d_0}^r(\omega) = -h_1 G_{c_1 d_0}^r(\omega) + \Delta_1 G_{c_1^\dagger d_0}^r(\omega)$$

$$\omega G_{c_2^\dagger d_0}^r(\omega) = -\Delta_1 G_{c_1 d_0}^r(\omega) + h_1 G_{c_1^\dagger d_0}^r(\omega)$$

Na forma matricial teremos:

$$\mathbf{G}_2 = \mathbf{N}\mathbf{G}_1 \quad (238)$$

com  $\mathbf{G}_1$  e  $\mathbf{G}_2$  representados pelas equações (156) e (160), respectivamente. Além disto,

$$\mathbf{N} = \begin{bmatrix} -\frac{h_1}{\omega} & \frac{\Delta_1}{\omega} \\ -\frac{\Delta_1}{\omega} & \frac{h_1}{\omega} \end{bmatrix} \quad (239)$$

E por fim, temos o par de equações (233) e (234),

$$\omega G_{c_3 d_0}^r(\omega) = -h_2 G_{c_1 d_0}^r(\omega) + \Delta_2 G_{c_1^\dagger d_0}^r(\omega)$$

$$\omega G_{c_3^\dagger d_0}^r(\omega) = -\Delta_2 G_{c_1 d_0}^r(\omega) + h_2 G_{c_1^\dagger d_0}^r(\omega)$$

Sua forma matricial será dada por:

$$\mathbf{G}_3 = \mathbf{M}\mathbf{G}_1 \quad (240)$$

com  $\mathbf{G}_1$  dado pela equação (156). E também,

$$\mathbf{G}_3 = \begin{bmatrix} G_{c_3 d_0}^r(\omega) \\ G_{c_3^\dagger d_0}^r(\omega) \end{bmatrix} \quad (241)$$

$$\mathbf{M} = \begin{bmatrix} -\frac{h_2}{\omega} & \frac{\Delta_2}{\omega} \\ -\frac{\Delta_2}{\omega} & \frac{h_2}{\omega} \end{bmatrix} \quad (242)$$

Em resumo, temos as equações no formalismo matricial (150), (157), (235), (238) e (240) que mostram a física do sistema: Ponto quântico mais cadeia de átomos em zigue zague, com 3 sítios. Isto é,

$$WG_0 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + PG_{k\alpha} + ZG_1$$

$$G_{k\alpha} = VG_0$$

$$G_1 = QG_0 + SG_2 + KG_3$$

$$G_2 = NG_1$$

$$G_3 = MG_1$$

A partir destas equações no formalismo matricial, podemos encontrar  $G_{d_0d_0}^r(\omega)$ , que é a função de Green exata para o sistema estudado. Para isso, faremos interações de cada sítio com o seu anterior. Substituindo as equações (240) e (238) na equação (235), teremos:

$$G_1 = (I - SN - KM)^{-1}QG_0 \quad (243)$$

Substituindo as equações (157) e (243) na equação (150), obtemos:

$$[W - PV - Z(I - SN - KM)^{-1}Q]G_0 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (244)$$

com

$$T_1 = Z(I - SN - KM)^{-1}Q \quad (245)$$

e portanto, a equação (244) torna-se:

$$\mathbf{G}_0 = [\mathbf{W} - \mathbf{P}\mathbf{V} - \mathbf{T}_1]^{-1} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (246)$$

Calculando a equação (245), seu resultado é dado por:

$$\mathbf{T}_1 = \begin{bmatrix} \frac{(1 - \Theta_1)\lambda^2}{\omega(1 - 2\Theta_1)} & \frac{\Theta_1\lambda^2}{\omega(1 - 2\Theta_1)} \\ \frac{\Theta_1\lambda^2}{\omega(1 - 2\Theta_1)} & \frac{(1 - \Theta_1)\lambda^2}{\omega(1 - 2\Theta_1)} \end{bmatrix} \quad (247)$$

com,

$$\Theta_1 = \frac{4\Delta^2}{\omega^2} \quad (248)$$

Além disso, definimos  $R_1(\omega)$  e  $S_1(\omega)$  da seguinte maneira:

$$R_1(\omega) = \frac{(1 - \Theta_1)}{\omega(1 - 2\Theta_1)} \quad (249)$$

$$S_1(\omega) = \frac{\Theta_1}{\omega(1 - 2\Theta_1)} \quad (250)$$

e desta maneira, a equação (247) tornar-se-á:

$$\mathbf{T}_1 = \begin{bmatrix} R_1(\omega)\lambda^2 & S_1(\omega)\lambda^2 \\ S_1(\omega)\lambda^2 & R_1(\omega)\lambda^2 \end{bmatrix} \quad (251)$$

Substituindo matrizes  $\mathbf{W}$ ,  $\mathbf{P}\mathbf{V}$  e  $\mathbf{T}_1$ , representadas pelas equações (151), (173) e (251), na equação (246), chegamos ao resultado:

$$\mathbf{G}_0 = \begin{bmatrix} \omega - \epsilon_d + i\Gamma - R_1(\omega)\lambda^2 & -S_1(\omega)\lambda^2 \\ -S_1(\omega)\lambda^2 & \omega + \epsilon_d + i\Gamma - R_1(\omega)\lambda^2 \end{bmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (252)$$



Calculando a matriz inversa da equação (252), temos:

$$G_{d_0 d_0}^r(\omega) = \frac{1}{\omega - \epsilon_d + i\Gamma - \lambda^2 R_1(\omega) \left\{ 1 + \lambda^2 \frac{S_1^2(\omega)/R_1(\omega)}{\omega + \epsilon_d + i\Gamma - R_1(\omega)\lambda^2} \right\}} \quad (253)$$

além do mais, definindo,

$$T(\omega) = \frac{S_1^2(\omega)}{R_1(\omega)} \quad (254)$$

$$\tilde{R}_1(\omega) = \frac{T(\omega)}{\omega + \epsilon_d + i\Gamma - R_1(\omega)\lambda^2} \quad (255)$$

Portanto, a função de Green exata do sistema: Ponto quântico mais cadeia de átomos em zigue zague com 3 sítios é:

$$G_{d_0 d_0}^r(\omega) = \frac{1}{\omega - \epsilon_d + i\Gamma - R_1(\omega)\lambda^2 \{1 + \lambda^2 \tilde{R}_1(\omega)\}} \quad (256)$$

com  $R_1(\omega)$  e  $\tilde{R}_1(\omega)$  dados pelas equações (249) e (255), respectivamente.

Para o caso  $\Delta = 0$ , ou seja, desacoplando o substrato supercondutor da cadeia de átomos em zigue zague, as equações (249), (250), (254) e (255) tornam-se respectivamente:

$$R_1(\omega) = \frac{1}{\omega} \quad (257)$$

$$S_1(\omega) = 0 \quad (258)$$

$$T(\omega) = 0 \quad (259)$$

$$\tilde{R}_1(\omega) = 0 \quad (260)$$

e conseqüentemente a equação (256), para o mesmo caso, será dada pela equação (186).

No caso limite  $\lambda = 0$ , isto é, desacoplando a cadeia de átomos em zigue zague, readquirimos o resultado esperado para o ponto quântico com os eletrodos apenas, mostrado pela equação (187).

### 3.10 O conjunto de equações matriciais generalizadas para $n$ sítios

Através do método recursivo validado pelo trabalho pioneiro de Meier e Wingreen [49], que aplicaram este método a um sistema de dois terminais acoplados à uma região central do tipo PQ, calculamos exatamente o conjunto de equações matriciais acopladas na fase topológica que descrevem a configuração exata para o modelo representado pela Figura 7 contendo  $n$  sítios de acordo com,

$$\mathbf{G}_n = \mathbf{H}\mathbf{G}_{n-2} \quad (261)$$

$$\mathbf{G}_{n-1} = \mathbf{H}\mathbf{G}_{n-3} + \mathbf{J}\mathbf{G}_{n-2} \quad (262)$$

$$\mathbf{G}_{n-2} = \mathbf{H}\mathbf{G}_{n-4} + \mathbf{J}\mathbf{G}_{n-3} + \mathbf{S}\mathbf{G}_{n-1} + \mathbf{K}\mathbf{G}_n \quad (263)$$

⋮

$$\mathbf{G}_3 = \mathbf{H}\mathbf{G}_1 + \mathbf{J}\mathbf{G}_2 + \mathbf{S}\mathbf{G}_4 + \mathbf{K}\mathbf{G}_5 \quad (264)$$

$$\mathbf{G}_2 = \mathbf{J}\mathbf{G}_1 + \mathbf{S}\mathbf{G}_3 + \mathbf{K}\mathbf{G}_4 \quad (265)$$

$$\mathbf{G}_1 = \mathbf{Q}\mathbf{G}_0 + \mathbf{S}\mathbf{G}_2 + \mathbf{K}\mathbf{G}_3 \quad (266)$$

$$\mathbf{W}\mathbf{G}_0 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + \mathbf{P}\mathbf{V}G_{k\alpha} + \mathbf{Z}\mathbf{G}_1 \quad (267)$$

sendo,

$$\mathbf{H} = \begin{bmatrix} -\frac{h_2}{\omega} & \frac{\Delta_2}{\omega} \\ -\frac{\Delta_2}{\omega} & \frac{h_2}{\omega} \end{bmatrix}; \mathbf{J} = \begin{bmatrix} -\frac{h_1}{\omega} & \frac{\Delta_1}{\omega} \\ -\frac{\Delta_1}{\omega} & \frac{h_1}{\omega} \end{bmatrix};$$

$$\mathbf{K} = \begin{bmatrix} -\frac{h_2}{\omega} & -\frac{\Delta_2}{\omega} \\ \frac{\Delta_2}{\omega} & \frac{h_2}{\omega} \end{bmatrix}; \mathbf{S} = \begin{bmatrix} -\frac{h_1}{\omega} & -\frac{\Delta_1}{\omega} \\ \frac{\Delta_1}{\omega} & \frac{h_1}{\omega} \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{Q} = \begin{bmatrix} \frac{\lambda}{\omega} & 0 \\ 0 & -\frac{\lambda}{\omega} \end{bmatrix}; \mathbf{Z} = \begin{bmatrix} \lambda & 0 \\ 0 & -\lambda \end{bmatrix};$$

$$\mathbf{W} = \begin{bmatrix} (\omega - \epsilon_d) & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & (\omega + \epsilon_d) \end{bmatrix}; \mathbf{PV} = \begin{bmatrix} j\Gamma & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & j\Gamma \end{bmatrix}.$$

na qual, as matrizes  $\mathbf{H}$ ,  $\mathbf{J}$ ,  $\mathbf{S}$  e  $\mathbf{K}$  representam os valores de amplitudes de pareamento e hoppings para os sítios vizinhos na cadeia;  $\mathbf{Q}$  e  $\mathbf{Z}$  mostram os acoplamentos entre o PQ e o primeiro sítio da cadeia zigue zague;  $\mathbf{W}$  e  $\mathbf{PV}$  correspondem ao nível de energia do PQ e o nível de alargamento de energia entre os eletrodos e o PQ, respectivamente.

Na próxima seção, apresentamos o caso específico do modelo proposto contendo: Ponto quântico acoplado a eletrodos através de fatores de acoplamentos simétricos dados por  $\Gamma = \Gamma_E = \Gamma_D$ . Além disso, o PQ está acoplado a cadeia zigue zague contendo cinco sítios através do fator de acoplamento  $\lambda$  e a cadeia está sobre um supercondutor topológico.

### 3.11 A função de Green exata para o modelo contendo 5 sítios

Motivados pela proposta de utilizar um ponto quântico acoplado à uma cadeia zigue zague composta por duas cadeias de Kitaev contendo cinco sítios ligada pelos parâmetros  $\Delta_1 h_1$  e  $\Delta_2 h_2$  sobre um supercondutor topológico, podemos calcular a função de Green do modelo contendo uma cadeia de átomos em zigue zague para uma quantidade finita tão grande quanto desejado conforme mostrado por Kraus et al [5] para um sistema contendo 30 sítios e Yacov E. Kraus [51] para uma grade periódica 70 x 70.

Desta forma, baseado no conjunto de equações matriciais acopladas para o modelo proposto contendo  $n$  sítios (equações 261 a 267), podemos considerar um caso específico para a cadeia zigue zague contendo cinco sítios, isto é,  $i = 5$  e obter a função de Green que rege o modelo proposto a fim de obter posteriormente a detecção de estados ligados de Majorana por meio da condutância linear do sistema por exemplo, conforme mostrado no capítulo 4. Para

este caso, as equações (272) a (277) descrevem a configuração do modelo através das equações matriciais para nossa cadeia zigue zague contendo cinco sítios, representada pela Figura 7, portanto,

$$G_5 = \mathbf{H}G_3 \quad (268)$$

$$G_4 = \mathbf{H}G_2 + \mathbf{J}G_3 \quad (269)$$

$$G_3 = \mathbf{H}G_1 + \mathbf{J}G_2 + \mathbf{S}G_4 + \mathbf{K}G_5 \quad (270)$$

$$G_2 = \mathbf{J}G_1 + \mathbf{S}G_3 + \mathbf{K}G_4 \quad (271)$$

$$G_1 = \mathbf{Q}G_0 + \mathbf{S}G_2 + \mathbf{K}G_3 \quad (272)$$

$$\mathbf{W}G_0 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + \mathbf{P}V G_{k\alpha} + \mathbf{Z}G_1 \quad (273)$$

As equações (268) a (273) mostram as interações entre os sítios adjacentes através dos termos de acoplamentos descritos pelas matrizes  $\mathbf{H}$ ,  $\mathbf{J}$ ,  $\mathbf{K}$ ,  $\mathbf{S}$ ,  $\mathbf{Q}$ ,  $\mathbf{Z}$ ,  $\mathbf{W}$  e  $\mathbf{P}V$ , apresentadas na seção anterior e, de acordo com o Hamiltoniano do modelo dado pela equação (25).

A Figura 7 e a equação (269) por exemplo, mostram o quarto sítio interagindo com o segundo e o terceiro sítio através das matrizes de acoplamento  $\mathbf{H}$  e  $\mathbf{J}$ , que representam os acoplamentos de amplitudes de pareamento do supercondutor topológico com a cadeia zigue zague e o hopping existente entre os vizinhos próximos na cadeia. Além disso, a equação (270) exhibe as interações eletrônicas entre o terceiro sítio com o primeiro, segundo, quarto e quinto sítio através das matrizes de acoplamento  $\mathbf{H}$ ,  $\mathbf{J}$ ,  $\mathbf{S}$  e  $\mathbf{K}$ , respectivamente.

A descrição da configuração para o modelo contendo cinco sítios corresponde ao conjunto de equações acopladas (268) a (273). Usando o método iterativo matricial para desacoplar essas equações, obtemos  $\mathbf{G}'_0$ , que corresponde a uma matriz 2x1 e representa a função de green exata do PQ dada por:

$$\mathbf{G}'_0 = [\mathbf{W} - \mathbf{P}V - \mathbf{T}_i]^{-1} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (274)$$

Com  $T_i$  a matriz de ordem 2x2 escrita na forma:

$$\mathbf{T}_i = \begin{bmatrix} R_i(\omega)\lambda^2 & S_i(\omega)\lambda^2 \\ S_i(\omega)\lambda^2 & R_i(\omega)\lambda^2 \end{bmatrix}, \quad (275)$$

e os elementos  $R_i(\omega)$  e  $S_i(\omega)$  da matriz espalhamento (275) para  $i = 4$  e  $i = 5$  (equações 276 a 279), respectivamente, são:

$$R_4(\omega) = \frac{(24\Delta^4 - 12\Delta^2\omega^2 + \omega^4)}{48\Delta^4\omega - 16\Delta^2\omega^3 + \omega^5} \quad (276)$$

$$S_4(\omega) = \frac{4\Delta^2(-6\Delta^2 + \omega^2)}{48\Delta^4\omega - 16\Delta^2\omega^3 + \omega^5} \quad (277)$$

$$R_5(\omega) = \frac{(-32\Delta^6 + 72\Delta^4\omega^2 - 18\Delta^2\omega^4 + \omega^6)}{-64\Delta^6\omega + 96\Delta^4\omega^3 - 20\Delta^2\omega^5 + \omega^7} \quad (278)$$

$$S_5(\omega) = \frac{2\Delta^2(16\Delta^4 - 12\Delta^2\omega^2 + \omega^4)}{-64\Delta^6\omega + 96\Delta^4\omega^3 - 20\Delta^2\omega^5 + \omega^7} \quad (279)$$

Portanto, substituindo as equações (275) a (279) na equação (274), obtém-se a função de Green exata do PQ, representada por  $G_{d_0d_0}^r(\omega)$ , de acordo com a Ref. [3].

$$G_{d_0d_0}^r(\omega) = \frac{1}{\omega - \epsilon_d + i\Gamma - R_i(\omega)\lambda^2\{1 + \lambda^2\tilde{R}_i(\omega)\}} \quad (280)$$

com,

$$\tilde{R}_i(\omega) = \frac{B_i(\omega)}{\omega + \epsilon_d + i\Gamma - R_i(\omega)\lambda^2}; \quad (281)$$

e,

$$B_i(\omega) = \frac{S_i^2(\omega)}{R_i(\omega)} \quad (282)$$

De posse de todas as funções de Green já calculadas no capítulo 3 para o modelo: Ponto quântico acoplado a cadeia de átomos em zigue zague, tratar-se-á no próximo capítulo dos resultados da transmitância  $T(\omega)$ , condutância  $G_c(\omega)$  e densidade de estados LDOS obtidos acerca do sistema proposto contendo três, quatro e cinco sítios na fase trivial, fase topológica e situação topológica mais geral.

## Capítulo 4: RESULTADOS

“Se cheguei até aqui, foi porque me apoiei no ombro de gigantes”  
(Sir Isaac Newton)

Neste capítulo vamos tratar dos resultados obtidos a partir das funções de Green calculadas nos capítulos 2 e 3 deste trabalho. Utilizando estas funções de Green exatas já calculadas e substituindo-as nas equações (31) e (32), condutância e densidade de estados, respectivamente, identificamos assinaturas de férmions comuns e MBS no sistema estudado. Para mostrar como funciona essa análise, vamos inicialmente ilustrar os resultados adquiridos para um caso mais simples, chamado fase trivial, que é definida pelas condições:  $\mu < 0$  e  $h_\alpha = \Delta_\alpha = 0$ . Neste caso, existe apenas um único estado fundamental, que corresponde a detecção de férmions comuns (elétrons). Além deste caso, vamos também analisar a fase topológica, que é definida pelas condições  $\mu = 0$  e  $h_\alpha = \Delta_\alpha = \Delta$ , que mostra como os modos de Majorana emergem nas extremidades da cadeia de átomos em zigue zague e, ainda, será investigado o caso da situação topológica mais geral, mas ainda pertencente à fase topológica e definido por  $\mu \neq 0$  e  $\Delta \neq h$ .

### 4.1 A densidade de estados LDOS para o caso da fase topológica e situação topológica mais geral na cadeia de átomos em zigue zague.

Consideramos o caso simétrico para os eletrodos com parâmetros de acoplamento dados por  $\Gamma = \Gamma_E = \Gamma_D$  e, portanto, garantimos detecção de MBS no modelo descrito pela figura 7 através do controle dos parâmetros livres  $\lambda$ ,  $\Delta$ ,  $\Gamma$ ,  $h$  e  $\epsilon_d$ , com unidade de medida de energia expressa em eletrovolts (eV).

Estes resultados sugerem três configurações para a cadeia zigue zague, isto é, detecção de MBS para três, quatro e cinco sítios na fase topológica (FT) e situação topológica mais geral (STG).

A Figura 9a mostra a LDOS como função da energia para o modelo proposto na Figura 7, inicialmente com o fio contendo 3 sítios, fixando o nível de energia do PQ em  $\epsilon_d = -5$ ,  $\Gamma = 1$  e variando os parâmetros  $\lambda$  and  $\Delta$ , resultando em três processos de transição.

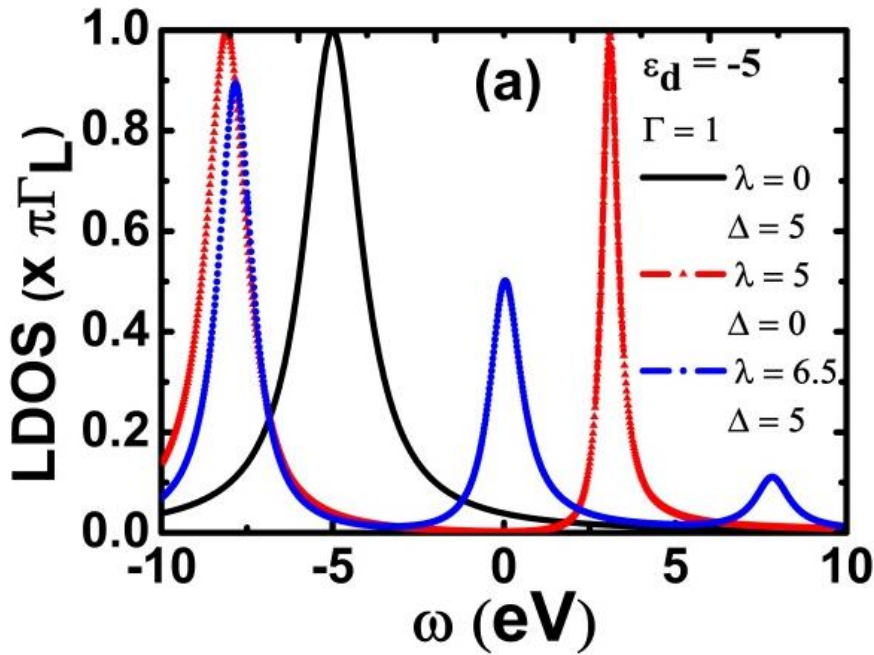


Figura 9a: LDOS com parâmetros fixos  $\epsilon_d = -5$  e  $\Gamma_R = \Gamma_L = \Gamma/2$  e acoplamento entre PQ e a cadeia ( $\lambda$ ) e amplitude de pareamento ( $\Delta$ ) variando de acordo com  $\lambda = 0$  e  $\Delta = 5$  (cor preta);  $\lambda = 5$  e  $\Delta = 0$  (cor vermelha) e  $\lambda = 6.5$  e  $\Delta = 5$  (cor azul).

A Figura 9a corresponde a fase topológica (FT) para  $\mu = 0$  and  $h_\alpha = \Delta_\alpha = \Delta = h$  [5,42]. Para o nível de fermi  $\epsilon_f = 0$ , o pico de Majorana (curva azul) surge quando a cadeia está fortemente acoplada ao PQ ( $\lambda = 6.5$ ) e ao supercondutor ( $\Delta = 5.0$ ), respectivamente. A curva vermelha correspondente a fase trivial com  $\lambda = 5$  e  $\Delta = 0$  mostra um *gap* de energia em  $\omega = 0$ , típico de assinatura de férmions comuns sobre o nanofio. Além disso, a curva preta representa o tunelamento eletrônico para  $\lambda = 0$  e  $\Delta = 5$ , ou seja, a cadeia é desconectada do PQ e o supercondutor topológico é fortemente acoplado à cadeia.

Na Figura 9b foram realizados os cálculos para obter a densidade de estado eletrônica LDOS do modelo proposto contendo três, quatro e cinco sítios. Fixamos os parâmetros  $\epsilon_d$  e  $\Gamma_R = \Gamma_L = \Gamma/2$  e, além disso, os acoplamentos entre PQ-cadeia ( $\lambda$ ) e, hopping  $h_\alpha$  foram variados.



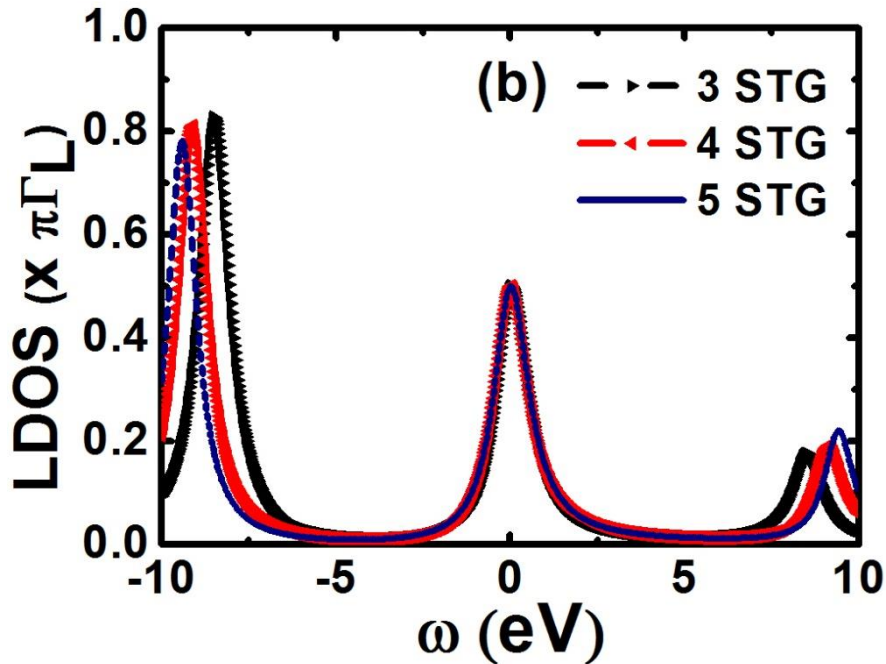


Figura 9b: LDOS com parâmetros fixados em  $\varepsilon_d = -5$  e  $\Gamma_R = \Gamma_L = \Gamma/2$  na STG para três, quatro e cinco sítios com acoplamentos sintonizados em  $\varepsilon_d = -5$ ,  $\Gamma = 1.2$ ,  $\Delta_\alpha = 0.2h_\alpha$ , variando numericamente  $\lambda$  e  $h_\alpha$ .

Neste caso, os parâmetros de acoplamento foram sintonizados e fixados em  $\varepsilon_d = -5$ ,  $\Gamma = 1.2$ . Além disso, variando os parâmetros  $\Delta_\alpha = 0.2h_\alpha$ ,  $\lambda$  e  $h_\alpha$  de acordo com  $\lambda = 7.5$  e  $h_\alpha = 3.1$  (cor preta);  $\lambda = 8.2$  e  $h_\alpha = 3.8$  (cor vermelha);  $\lambda = 8.5$  e  $h_\alpha = 6.8$  (cor azul). Portanto, para garantir presença de MBS sobre a cadeia para três, quatro e cinco sítios na situação topológica mais geral em  $\omega = 0$ , devemos aumentar numericamente os valores de sintonização dos parâmetros de acoplamento entre PQ-cadeia e hopping para os três processos.

#### 4.2 A transmitância para o caso da fase topológica e situação topológica mais geral na cadeia de átomos em zigue zague.

Na Fig. 9c e na Fig. 9d, as curvas de transmitância foram calculadas para três, quatro e cinco sítios na fase topológica (TP) e na situação topológica mais geral (STG), respectivamente.

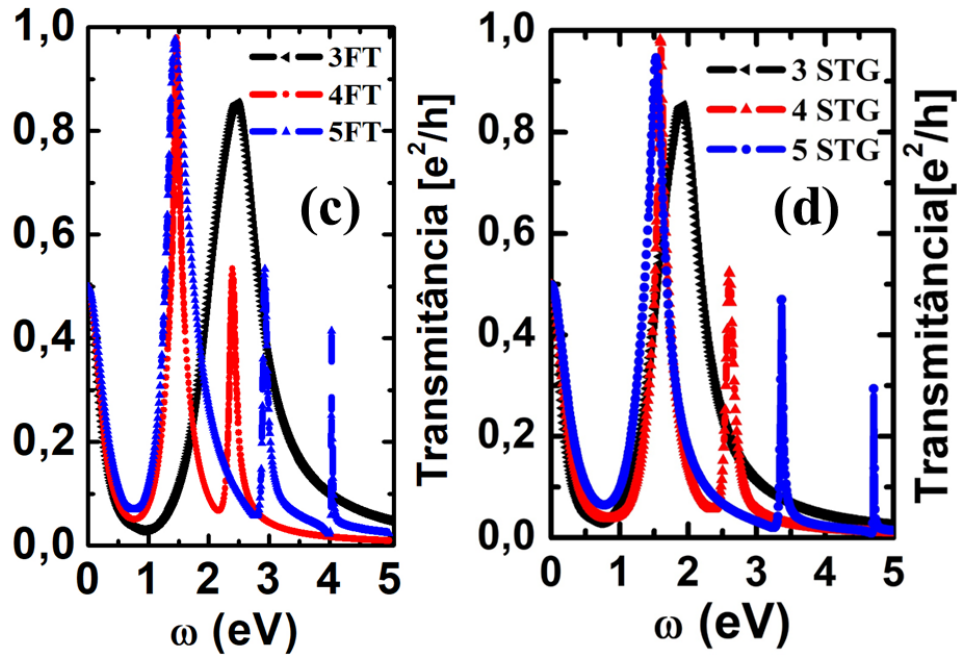


Figura 9: (c) Cálculo da transmitância na FT ( $h_\alpha = \Delta_\alpha = \Delta = h$ ) para 3 sítios com parâmetros sintonizados em  $\Gamma = 0.9, \lambda = 2.8, \Delta = 0.45$ ; 4 sítios com  $\Gamma = 0.45, \lambda = 1.45, \Delta = 0.6$ ; 5 sítios com  $\Gamma = 0.7, \lambda = 1.5, \Delta = 1.11$ . Para figura (d) temos a transmitância na STG ( $\mu = 0$  and  $h_\alpha \neq \Delta_\alpha$ ),  $\varepsilon_d = 0$  E  $\Delta_\alpha = 0.2h_\alpha$  calculada para 3 sítios com parâmetros  $\Gamma = 0.7, \lambda = 1.7, h = 0.175$ ; 4 sítios com  $\Gamma = 0.43, \lambda = 1.6, h = 0.325$ ; 5 sítios com  $\Gamma = 0.52, \lambda = 1.45, h = 0.65$ .

Investigamos a transmitância do modelo proposto na Figura 9c e 9d. Aqui foram obtidas as curvas de transmitância na FT e STG, respectivamente, com  $\varepsilon_d = 0$  para a cadeia de 3 a 5 sítios e sintonizados os demais parâmetros a fim de garantir MBS em  $\omega = 0$ .

Quando acoplamos o quarto e o quinto sítio à extremidade da cadeia, o número de interações aumenta. Conseqüentemente, a complexidade dos possíveis hoppings entre os sítios aumenta e surgem novos picos.

Na Figura 9c e 9d temos a maior contribuição do primeiro pico adjacente ao MBS e ainda para 3 sítios um deslocamento deste pico para próximo do nível de Fermi. Além disso, na Figura 9d, para a STG, uma dependência de  $h$  foi adicionada aos parâmetros livres e mais uma vez, confirmamos que a topologia da cadeia cria sub-intervalos próximos ao nível de Fermi, devido ao tipo de acoplamento entre os sítios vizinhos.

Ao adicionar um sítio na cadeia para a fase topológica (FT) e situação topológica mais geral (STG), aumentamos o número de interações eletrônicas possíveis entre sítios, isto é, aumenta-se a complexidade de hoppings na cadeia contendo quatro sítios.

Acoplando o substrato do supercondutor topológico na cadeia zigue zague em  $\Delta = 0.6$  (curva vermelha na FT) e  $\Delta = 0.065$  (curva vermelha na STG), respectivamente, observamos

dois picos adjacentes de férmions regulares próximos ao nível de Fermi, porém garantimos MBS nas extremidades da cadeia para quatro sítios.

Ao incluir mais um sítio na cadeia zigue zague, aumentamos a complexidade de hoppings na cadeia, surgindo três picos adjacentes próximos ao nível de Fermi, sendo estes caracterizados por férmions regulares, porém sintonizando adequadamente o acoplamento da amplitude de pareamento em  $\Delta = 1.11$  (curva azul na FT) e  $\Delta = 0.13$  (curva azul na STG), ainda garantimos presença de MBS nas extremidades da cadeia contendo cinco sítios.

### 4.3 A condutância para o caso da fase topológica e situação topológica mais geral na cadeia de átomos em zigue zague.

A Figura 10 mostra a condutância  $G_c(\omega)$  na situação topológica mais geral STG para a grade contendo cinco sítios. Foram fixados os parâmetros do nível de energia do PQ  $\varepsilon_d$ , o acoplamento dos eletrodos  $\Gamma$  e PQ-cadeia  $\lambda$ .

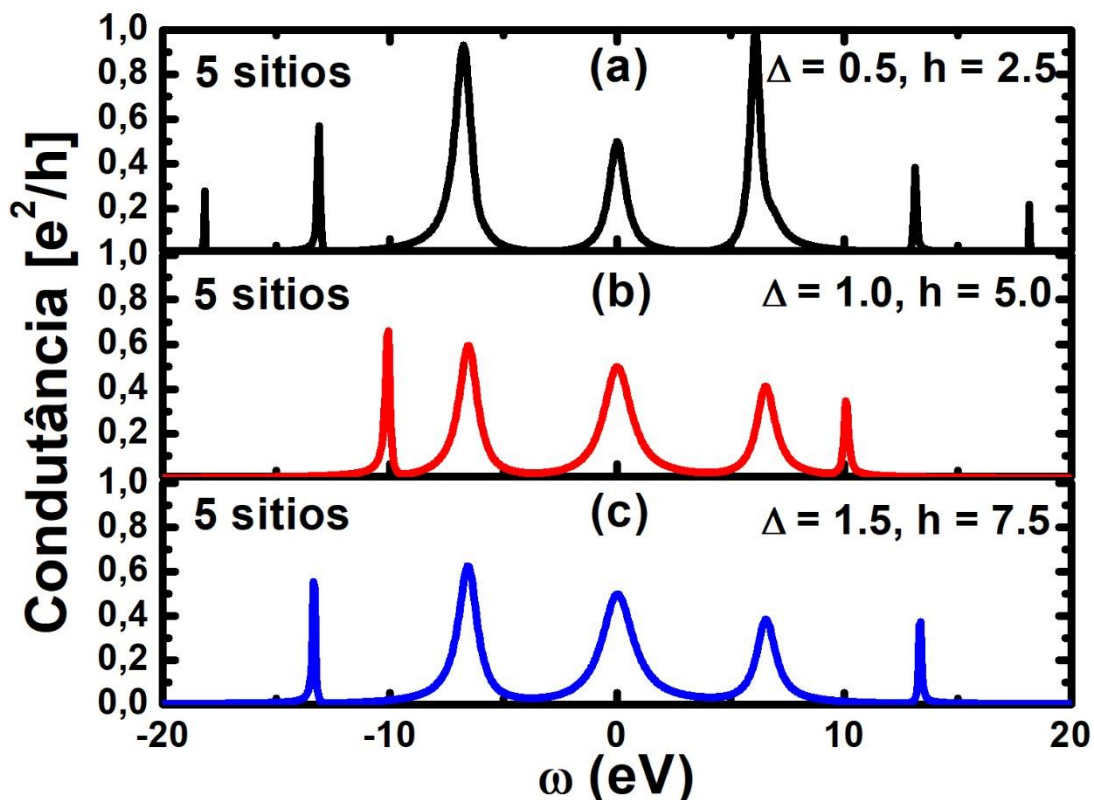


Figura 10: Condutância do modelo proposto na STG contendo cinco sítios com parâmetros fixados em  $\varepsilon_d = -3$ ;  $\Gamma = 1$ ;  $\lambda = 8.5\Gamma$ . (a) Variando amplitude de pareamento e hopping com  $\Delta = 0.5$  e  $h = 2.5$  (cor preta); (b) Amplitude de pareamento e hopping sintonizados em  $\Delta = 1.0$  e  $h = 5.0$  (cor vermelha); (c) Amplitude de pareamento e hopping sintonizados em  $\Delta = 1.5$  e  $h = 7.5$  (cor azul).

Para assegurar MBS, o sistema é sintonizado de acordo com  $\varepsilon_d = -3$ ;  $\Gamma = 1$ ;  $\lambda = 8.5\Gamma$  e variamos os acoplamentos de hoppings com dependência  $h = \Delta/0.2$  para três amplitudes de pareamento:  $\Delta = 0.5$ ,  $\Delta = 1.0$  and  $\Delta = 1.5$ , respectivamente.

As escolhas das amplitudes de pareamento baseiam-se experimentalmente na técnica de dissociação de pares de Cooper induzida por Raman ou moléculas de Feshbach, formando um reservatório atômico BCS [5-6]. Para  $\Delta = 1.5$  foi obtido o melhor sinal para MBS; para  $\Delta = 0.5$  preservamos MBS e garantimos mobilidade de elétrons na cadeia quando  $h = 2.5$ .

A escolha do parâmetro de acoplamento  $h$  (hopping) para o modelo proposto é experimentalmente ancorado no tipo da geometria estudada da cadeia, fazendo referência a uma grade óptica, obtida pela técnica de átomos frios [6-7]. Esta técnica experimental permite o controle da amplitude de acoplamento  $h_1 = h_2 = h$  presente no hamiltoniano do modelo e, conseqüentemente, a construção da geometria da cadeia em zigue zague.

A Figura 11 mostra a condutância do modelo contendo cinco sítios com os parâmetros de acoplamento do ponto quântico  $\varepsilon_d$ , acoplamento dos eletrodos  $\Gamma$  e parâmetro de Cooper  $\Delta$ , previamente fixados e com hopping ( $h$ ) variando.

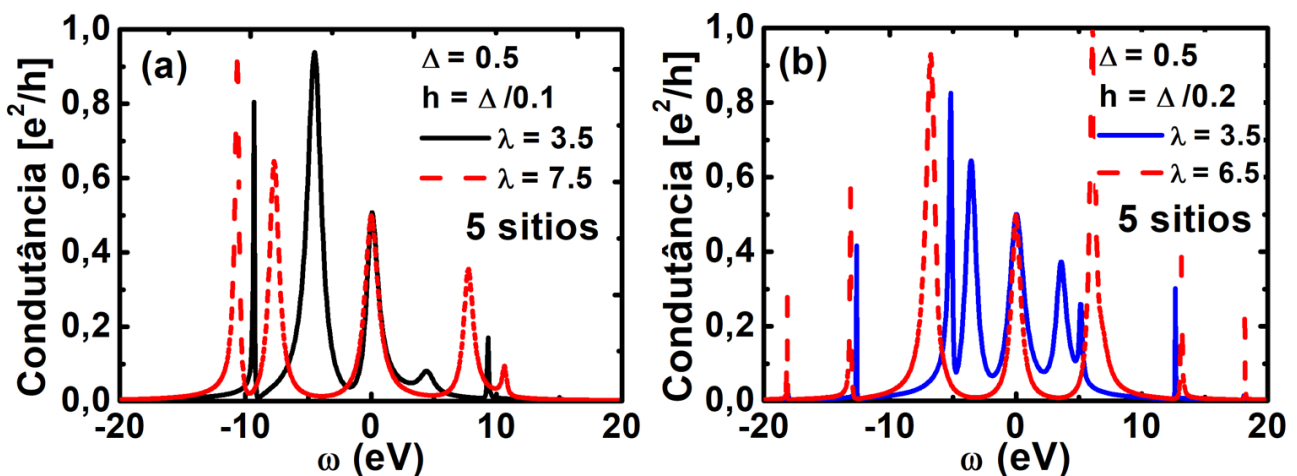


Figura 11: Condutância do modelo contendo cinco sítios com parâmetros fixados e sintonizados em  $\varepsilon_d = 1$ ,  $\Delta = 0.5$ ,  $\Gamma = 1$ . (a) Hopping variando de acordo com  $h = \Delta/0.1$  e acoplamento dot-cadeia sintonizado em  $\lambda = 3.5$  e  $\lambda = 7.5$ . (b) Hopping variando de acordo com  $h = \Delta/0.2$  e acoplamento sintonizado em  $\lambda = 3.5$  e  $\lambda = 6.5$ .

Ademais, investigamos o acoplamento entre PQ-cadeia ( $\lambda$ ) com parâmetros sintonizados em  $\varepsilon_d = -1$ ,  $\Delta = 0.5$ ,  $\Gamma = 1$  para dois tipos de hoppings com dependência em relação ao acoplamento do parâmetro de Cooper na situação topológica mais geral (STG). Na Figura 11a consideramos a dependência  $h = \Delta / 0.1$  e na Figura 11b a dependência torna-se  $h = \Delta / 0.2$

e, além disso, para ambos os casos, o acoplamento entre os sítios (hoppings) é sensível e, ao mesmo tempo, garante MBS nas extremidades do nanofios.

Para a Figura 11a com a dependência  $h = \Delta / 0.1$ , a condutância mostra dois picos de tunelamento eletrônico e na Figura 11b, com a dependência  $h = \Delta / 0.2$  três picos de férmions regulares são apresentados. Além disso, confirmamos assinatura de MBS em  $\omega = 0$  e, mais uma vez, os valores de hopping limitam a mobilidade eletrônica sobre a cadeia.

Uma possível técnica experimental para estudar o fenômeno é a *Mechanical Break Junction* (MBJ) [8-10] em estruturas de nanofios. Devido à dependência do MBS com o parâmetro de acoplamento entre PQ-cadeia ( $\lambda$ ), foi analisado que MBS pode ser mecanicamente modulado em experimentos de MBJ [50], alterando a distância entre o PQ e a cadeia.

Nesses sistemas, um fio metálico (fio de ouro por exemplo) é esticado até que a cadeia 1D de poucos átomos preencha a lacuna entre o ponto quântico antes do rompimento completo do nanofio.

A Figura 12 mostra a condutância do modelo contendo cinco sítios. Foram fixados o nível de energia do PQ ( $\epsilon_d$ ), acoplamento entre os eletrodos ( $\Gamma$ ) e amplitude de pareamento ( $\Delta$ ). Além disso, variamos o acoplamento PQ-cadeia ( $\lambda$ ) e hopping ( $h$ ), respectivamente.

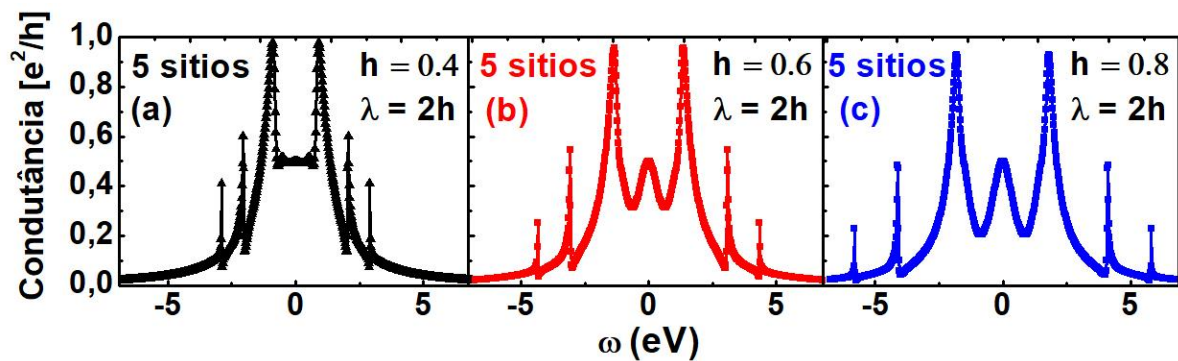


Figura 12: Condutância do modelo contendo cinco sítios com parâmetros sintonizados e fixados em  $\epsilon_d = 0$ ,  $\Gamma = 1$  e parâmetro de Cooper  $\Delta = 2$ . (a) Variando hopping em  $h = 0.4$  e o acoplamento PQ-cadeia em  $\lambda = 2h$ . (b) Variando hopping em  $h = 0.6$  e o acoplamento PQ-cadeia em  $\lambda = 2h$ . (c) Variando hopping em  $h = 0.8$  e acoplamento PQ-cadeia em  $\lambda = 2h$ .

Foram sintonizados e fixados os parâmetros  $\epsilon_d = 0$ ,  $\Gamma = 1$ ,  $\Delta = 2$  e variamos os parâmetros de acoplamento de hopping  $h$  e acoplamento PQ-cadeia de acordo com a dependência  $\lambda = 2h$ . Para  $h = 0.4$  correspondente a Figura 12a (cor preta) garantimos mobilidade de tunelamento eletrônico, entretanto, sem a presença de MBS.

Na Figura 12b para  $h = 0.6$  (cor vermelha) detectamos férmions comuns em  $\omega \cong \pm 4,8$ ,  $2,9$  e  $1,5$  e, MBS em  $\omega = 0$ . Ademais, na Figura 12c (cor azul), o valor de hopping  $h = 0,8$

garante um melhor sinal de MBS em  $\omega = 0$  e, também, confirma presença de mobilidade de tunelamento eletrônico sobre a cadeia.

A interação hopping  $h$  de curto alcance afeta a detecção de MBS, enquanto a interação de longo alcance suficientemente forte induz o surgimento de MBS nas extremidades da cadeia e, portanto, leva ao pico de condutância  $G_{\text{pico}} = e^2 / 2h$ , como mostrado nas figuras 12b e 12c. Tais resultados têm o potencial de monitorar o espectro de MBS na cadeia triangular relacionando-o a técnicas experimentais aplicáveis ao modelo proposto.

## Capítulo 5: CONCLUSÕES E PERSPECTIVAS

“O pensamento é apenas um lampejo entre duas longas noites, mas este lampejo é tudo”  
(Henri Poincaré)

### 5.1 Conclusões

O sistema: Ponto quântico acoplado a uma cadeia de átomos em zigue zague, exibida nesta tese, é uma proposta para uma nova classe de nanodispositivos. Utilizamos o formalismo de funções de Green no equilíbrio para calcular a função de Green exata que rege todo o modelo e, desta maneira, obtemos os gráficos para densidade de estados eletrônica (LDOS), transmitância e condutância linear, que mostram as assinaturas de férmions de Majorana sobre o sistema. Os resultados apresentados foram estudados para a fase trivial, fase topológica e situação topológica mais geral definidas por:  $\mu < 0$  e  $h_\alpha = \Delta_\alpha = 0$ ,  $\mu = 0$  e  $h_\alpha = \Delta_\alpha = \Delta$  e  $\mu \neq 0$  e  $\Delta \neq h$ , respectivamente, com o sistema apresentado com três, quatro e cinco sítios. Além disso, observamos que para a fase trivial e fase topológica, a função de Green independe do número de sítios  $L$  da cadeia.

No modelo escolhido, além de estudarmos as propriedades físicas através da densidade de estados eletrônica (LDOS), transmitância e condutância linear, observamos a presença de modos zero de Majorana nas extremidades da cadeia. Ademais, o ponto quântico estando acoplado a um modo zero fermiônico regular, tem-se a formação de um pico na condutância em  $G = e^2/h$ , assinalando a presença de férmions regulares, observado na fase trivial do sistema. Entretanto, assinaturas de férmions de Majorana foram observadas quando o pico da condutância à temperatura zero é reduzida a um fator  $1/2$ , isto é,  $G = e^2/2h$ . E isto é notado na fase topológica.

Confirmamos que a topologia da cadeia em zigue zague cria sub-*gaps* próximos ao nível de Fermi, devido ao aumento da complexidade de hoppings na cadeia para o modelo com desordem fraca, com quatro e cinco sítios.

As análises foram geradas pela escolha de parâmetros livres, como tais experimentalmente ancorados no tipo de geometria da cadeia estudada. Ela pode se referir a: (i) uma grade óptica, viável através do uso da técnica de *cold atoms* e (ii) em parceria com outra técnica, como a *Mechanical Break Junction* (MBJ) devido à interface PQ-cadeia na geometria *T-shaped*.

A fim de diminuir o número de interações entre os sítios da cadeia e, conseqüentemente, reduzir o número de picos adjacentes ao MBS na cadeia em zigue zague de átomos contendo

cinco sítios, utilizamos a situação topológica mais geral (STG) para tal efeito, com  $\mu \neq 0$  e  $\Delta \neq h$ .

O efeito da desordem na cadeia não afeta a estrutura qualitativa do espectro de energia do estado ligado de Majorana desde que os parâmetros de acoplamento estejam sintonizados adequadamente, a fim de garantir modo zero de Majorana nas extremidades da cadeia; no entanto, para o sítio 5, temos a eliminação de um par de picos adjacentes em relação à MBS, como pode ser observado nas figuras 10a, 10b e 10c.

Com base em um modelo mais realista para obtenção de MBS em cadeias lineares, redes e nanofios, nossos resultados estão de acordo com a literatura.

Este procedimento mostra um estudo analítico e numérico em sistemas com parâmetros que são acessíveis experimentalmente. Mostramos que ele pode ser aplicado a sistemas nos quais os PQs são definidos por outro processo, por exemplo, formado por InAs, InSb ou nanofio único.

## 5.2 Perspectivas

- Investigar o sistema proposto através da teoria de transporte eletrônico, dando ênfase ao cálculo da condutância diferencial e corrente para o mesmo com intuito de modelar o design do nanodispositivo.
- Substituir os eletrodos metálicos descritos nesta tese por eletrodos supercondutores, possibilitando a eliminação do substrato supercondutor topológico presente no modelo proposto desta tese e, portanto, investigar propriedades de transporte eletrônico neste novo modelo para a cadeia zigue zague contendo  $n$  sítios.



## Referencias

- [1] M. S. Costa, Uma Nova Classe de Nano Dispositivo: Ponto Quântico Acoplado a Cadeia de Kitaev Detectando Férmions de Majorana. Dissertação realizada no PPGF-UFFA, (2014).
- [2] Kitaev, A Yu.: Unpaired Majorana fermions in quantum wires. **Phys.-Usp.** **44**, 131-136, (2001). Doi: 1070/1063-7869/44/10S/S29
- [3] Liu, DE, Baranger, HU.: Detecting a Majorana-fermion zero mode using a quantum dot. *Phys. Rev. B* **84**, (2011). Doi: 10.1103/PhysRevB.84.201308.
- [4] P. H. Penteadó, Transport Through Leaked Majorana Modes in Quantum Dots and Adatoms. Tese realizada no IFSC-USP, (2004).
- [5] Kraus, CV, Diehl, S., Zoller, P., Baranov, MA.: Preparing and probing atomic Majorana fermions and topological order in optical lattices. *New Journal of Physics* **14**, (2012). Doi: 10.1088/1367-2630/14/11/113036.
- [6] Jiang, L. et al.: Majorana Fermions in Equilibrium and in Driven Cold-Atom Quantum Wires. *Phys. Rev. Lett.* **106**, (2011). Doi: 10.1103/PhysRevLett.106.220402.
- [7] Zhang, C, Tewari, S., Lutchyn, RM., Das Sarma, S.:  $p_x + ip_y$  Superfluid from s-Wave Interactions of Fermionic Cold Atoms. *Phys. Rev. Lett.* **101**, (2008). Doi: 10.1103/PhysRevLett.101.160401.
- [8] Smit, R.H.M, Noat, Y., Untiedt, C., Lang, ND., van Hemert, MC., Ruitenbeek, JM.: Measurement of the conductance of a hydrogen molecule. *Nature* **419**, (2002). Doi: 10.1038/nature01103.
- [9] Reichert, J, Ochs, R., Beckmann, D., Weber, HB., Mayor, M., Loehneysen, Hv.: Driving current through single organic molecules. *Phys. Rev. Lett.* **88**, (2002). Doi: 10.1103/PhysRevLett.88.176804.
- [10] Wang, L, Ling, W., Zhang, L., Xiang, D.: Advance of Mechanically Controllable Break Junction for Molecular Electronics. *Top. Curr. Chem.* **375**, (2017). Doi: 10.1007/s41061-017-0149-0.
- [11] Law KT, Lee PA., Ng T K.: Majorana Fermion Induced Resonant Andreev Reflection. *Phys Rev Lett* **103**, (2009). Doi: 10.1103 / PhysRevLett.103.237001.
- [12] Zeng, Q-B., Chen, S., You, L., Lu, R.: Transport through a quantum dot coupled to two Majorana bound states. *Front. Phys.* **12**, (2017). Doi: <https://doi.org/10.1007/s11467-016-0620-3>.
- [13] Vernek, E, Penteadó, PH., Seridonio, AC.: Egues, C.: Subtle leakage of a Majorana mode into a quantum dot. *Phys. Rev. B* **89**, (2014). Doi: 10.1103/PhysRevB.89.165314.
- [14] Leijnse, M., Flensberg, K.: Scheme to measure Majorana fermion lifetimes using a quantum dot. *Phys. Rev. B*, **84**, (2011). Doi: [doi.org/10.1103/PhysRevB.84.140501](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.84.140501).

- [15] Benito, M., Platero, G.: Floquet Majorana férmions in superconducting quantum dots. *Physica E: Low-dimensional systems and Nanostructures*, **74**, (2015). Doi: <https://doi.org/10.1016/j.physe.2015.08.030>.
- [16] Li, Z-Z., Lam, C-H., You, J. Q.: Probing Majorana bound states via counting statistics of a single electron transistor. *Scientific Reports* **5**, (2015). Doi: [10.1038/srep11416](https://doi.org/10.1038/srep11416).
- [17] Xue, Y, Datta, S., Ratner, MA.: First-Principles Based Matrix-Green's Function Approach to Molecular Electronic Devices: General Formalism. *Chem. Phys.* **281**, (2002). Doi: [10.1016/S0301-0104\(02\)00446-9](https://doi.org/10.1016/S0301-0104(02)00446-9).
- [18] Gong, W-J., Zhang, S-F., Li, Z-C., Yi, G., Zheng, Y-S.: Detection of a Majorana fermion zero mode by a T-shaped quantum-dot structure. *Phys. Rev. B.* **89**, (2014). Doi: <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.89.245413>.
- [19] De Franceschi, S., Kouwenhoven, L., Schönberger, C., Wernsdorfer, W.: Hybrid superconductor-quantum dot devices. *Nat. Nanotech.* **5**, (2011). Doi: [10.1038/nnano.2010.173](https://doi.org/10.1038/nnano.2010.173).
- [20] Petroff, P., Logan, GR, Wiegmann, W.: Toward quantum well wires: Fabrication and optical properties. *App. Phys. Lett.*, **41**, (1982). Doi: <https://doi.org/10.1063/1.93610>.
- [21] Steiner, T. *Semiconductor Nanostructures for Optoelectronic Applications*. Artech House, 2004.
- [22] C. R. Chaves, Síntese, silanização e caracterização de pontos quânticos de CdTe/CdS e CdS/Cd(OH)<sub>2</sub> para aplicações em sistemas biológicos. Tese de doutorado realizada no PGMTR-UFPE. (2011).
- [23] J. H. R. da S. Cachetas, Desenvolvimento e ensaios biológicos de bionanosistemas baseados em pontos quânticos de CdSe/ZnS. Dissertação de mestrado realizada na Escola de Ciências-Universidade do Minho, (2013).
- [24] Reed, M., Bate, R., Bradshaw, K., Duncan, W., Frensley, W., Lee, J., Shih, H.: Spatial quantization in GaAs-AlGaAs multiple quantum dots. *Journal of Vacuum Science & Technology B: Microelectronics and Nanometer Structures*, **4**, (1986). Doi: <https://doi.org/10.1116/1.583331>.
- [25] Fukui, T., Ando, S., Tokura, Y., Toriyama T., GaAs tetrahedral quantum dot structures fabricated using selective area metalorganic chemical vapor deposition. *App. Phys. Lett.*, **58**, (1991). Doi: <https://doi.org/10.1063/1.105026>
- [26] Chiquito, A J., Pontos quânticos: átomos artificiais e transistores atômicos. *Rev. Bras. Ens. Fis.* **23**, (2001). Doi: <http://dx.doi.org/10.1590/S1806-11172001000200004>.
- [27] Reed, M.A et al., *Quantum Dot Resonant Tunneling Spectroscopy*. U. Rößler, 1989.
- [28] Reed, M.A.: Quantum dots. *Scientific American*, **268**, (1993). Doi: [10.1038/scientificamerican0193-118](https://doi.org/10.1038/scientificamerican0193-118).

- [29] Chukwuocha, E. O., Onyeaju, M.C., Harry, T. S. T.: Theoretical Studies on the Effect of Confinement on Quantum Dots Using the Brus Equation. *World Jour. of Cond. Matt. Phys.* **2**, (2012). Doi: <http://dx.doi.org/10.4236/wjcmp.2012.22017>.
- [30] C. F. Destefani, Efeitos das interações elétron-elétron e Spin-órbita nas propriedades magneto-eletrônicas e de magneto-transporte de sistemas confinados. Tese de doutorado realizada no IFSC-USP, (2003).
- [31] Kang K., Min, B. I.: Effect of quantum confinement on electron tunneling through a quantum dot. *Phys. Rev. B*, **55**, (1997). Doi: <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.55.15412>.
- [32] A. R. H. Nuñez, Transporte eletrônico em sistemas mesoscópicos. Tese de doutorado realizada no CBPF, (2009).
- [33] F. M. de Souza. Transporte quântico em spintrônica: Corrente e shot noise via funções de Green de não-equilíbrio. Tese de doutorado realizada no IFSC-USP, (2004).
- [34] Flensberg, K.: Capacitance and conductance of mesoscopic systems connected by quantum point contacts. *Phys. Rev. B*, **48**, (1993). Doi: <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.48.11156>.
- [35] Matveev, K.A., Coulomb blockade at almost perfect transmission. *Phys. Rev. B*, **51**, (1995). Doi: <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.51.1743>.
- [36] Deus, F., Hernández, A.R., Continentino, M.A.: Adiabatic charge and spin pumping through interacting quantum dots. *J. Phys.: Condens. Matter*, **24**, (2012). Doi: <https://doi.org/10.1088/0953-8984/24/35/356001>.
- [37] Lake, R., Klimeck, G., Bowen, R. C., Jovanovic, D.: Single and multiband modeling of quantum electron transport through layered semiconductor devices. *J. of App. Phys.*, **81**, (1997). Doi: <https://doi.org/10.1063/1.365394>.
- [38] Sakurai, J. J.: *Modern Quantum Mechanics*, Revised Edition, Addison-Wesley 1994.
- [39] Griffiths, D.: *Introduction to Quantum Mechanics*, 2<sup>a</sup> Edition, Benjamin Cummings, 2004.
- [40] Dirac, P.A.: The Quantum theory of electron. *Proc. Roy. Soc. Lond. A*, **117**, (1928). Doi: [10.1098/rspa.1928.0023](https://doi.org/10.1098/rspa.1928.0023).
- [41] Majorana, E.: Teoria simmetrica dell'elettrone e del positrone. *Nuovo Cimento*. **14**, 171-184, (1937). Doi: [10.1007/bf02961314](https://doi.org/10.1007/bf02961314).
- [42] Alicea, J.: New directions in the pursuit of Majorana fermions in solid state systems. *Rep. Prog. Phys.* **75**, (2012). Doi: [10.1088 / 0034-4885 / 75/7/076501](https://doi.org/10.1088/0034-4885/75/7/076501).
- [43] You, J.Q., Wang, Z.D., Zhang, W., Nori, F.: Encode a qubit with Majorana modes in superconducting circuits. *Sc. Rep.* **4**, (2014). Doi: <https://doi.org/10.1038/srep05535>.
- [44] Mourik, V, Zuo, K., Frolov, SM., Plissard, SR., Bakkers, EPAM., Kouwenhoven, LP.: Signatures of Majorana fermions in hybrid superconductor-semiconductor nanowire devices. *Sci* **336**, 1003-1007, (2012). Doi: [10.1126/science.1222360](https://doi.org/10.1126/science.1222360).

- [45] Sato, M., and Ando, Y.: Topological superconductors: a review. *Rep. Prog. Phys.* **80**, (2017). Doi: 10.1088/1361-6633/aa6ac7.
- [46] Gong, W.-J., Zhang, S.-F., Li, Z.-C., Yi, G., Zheng, Y.-S.: Detection of a Majorana fermion zero mode by a T-shaped quantum-dot structure. *Phys. Rev. B.* **89**, (2014). Doi: <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.89.245413>
- [47] Leijnse, M, Flensberg, K.: Quantum Information Transfer between Topological and Spin Qubit Systems. *Phys. Rev. Lett.* **107**, (2011). Doi: 10.1103 / PhysRevLett.107.210502.
- [48] Budich, J. C., Trauzettel, B.:  $Z_2$  Green's function topology of Majorana wires. *N. J.of Phys.* **15**, (2013). Doi: doi:10.1088/1367-2630/15/6/065006.
- [49] Kadanoff, L.P., Baym, G.: *Quantum Statistical Mechanics: Green's function Methods in equilibrium and Nonequilibrium Problems*, 1 st edition, W.A. Benjamin, (1962).
- [50] Perrin, M.L, Verzijl, C.J.O., Martin, C.A., Shaikh, A.J., Eelkema, R., van EschJan, H., van Ruitenbeek, J.M., Thijssen, J.M., van der Zant, H.S.J., Dulic, D.: Large tunable image-charge effects in single-molecule junctions. *Nat. Nanotechnol.* **8**, (2013). Doi: 10.1038/nnano.2013.26.
- [51] Kraus, Y.E., Stern, A.: Majorana fermions on a disordered triangular lattice. *New Journal of Physics* **13**, (2011). Doi: 10.1088/1367-2630/13/10/105006.

**Anexo – Publicação na *Journal computational of Electronics***



# Majorana bound states in a quantum dot device coupled with a superconductor zigzag chain

Antonio T. M. Beirão<sup>1</sup> · Miraci Silva Costa<sup>2</sup> · Alexandre de S. Oliveira<sup>1</sup> · Jorsi J. da C. Cunha<sup>2</sup> · Shirsley S. da Silva<sup>3</sup> · Jordan Del Nero<sup>1,2,4</sup>

© Springer Science+Business Media, LLC, part of Springer Nature 2018

## Abstract

Research in condensed matter physics on topological insulators and superconductors has contributed greatly to the characterization of the surface properties and zero modes of nanowires. In this work we investigated theoretically, using the recursive Green's function approach, electron transport through a T-shaped single-level spinless quantum dot, connected to a zigzag chain and coupled to a  $p$ -wave superconductor. This model is an extension of the Kitaev chain for a triangular network of finite size with three, four, and five sites. We found that the Majorana zero modes can be tuned through the coupling parameters of the device and that the linear conductance shows Majorana bound states (MBS) in the topological phase, being maximally robust in the general topological phase. This more realistic model permits the detection of MBS via control of the parameters governing the electronic tunneling and could be helpful for relevant experiments.

**Keywords** Majorana fermions · Recursive Green's function approach · Kitaev chain · Electronic nanodevices · Quantum dot · T-shaped · Qubit · Majorana bound states (MBS)

## 1 Introduction

Majorana fermions (MFs) are neutral particles that constitute their own antiparticles. Although first proposed to describe fundamental particles [1], they gained importance after Majorana bound states (MBS) were detected. This implies the degeneracy of the fundamental state and allows the system to support excitations with non-Abelian statistics (i.e., particles that are neither fermions nor bosons) [2]. There is currently a significant interest in topological quantum computers [3], which make use of degenerate ground states of topological matter to encode qubits [4].

Experiments with ultracold atoms [5, 6] in optical networks offer great control over both the mobility and the intensity of the interactions of periodic arrangements and have been proposed to detect Majorana fermions using semiconductor wires, topological superconductors, insulators, and magnetic adatoms. Moreover, experimental realization of a proximity-induced topological superconductor was recently reported [7], forming states connected to MBS in InSb nanowires.

The Kitaev chain [8] is a model for detecting Majorana fermions through the MBS located at the ends of a one-dimensional (1D) chain above a topological superconductor of spin-triplet or  $p$ -wave type. The superconductor that supports a Majorana fermion must necessarily be topological [9, 10].

The MBS wavefunctions observed experimentally for a long nanowire by Mourik et al. [7] decay exponentially when a large degree of disorder is included in the model [11]. Furthermore, study of finite-length chains is relevant, because they are exactly solvable and MBS are perfectly located at the ends. Moreover, experimentally, long semiconductor nanowires coupled with the surface of a superconductor [12] can basically be considered to be segmented by disorder into a smaller number of coherent chains [7].

✉ Antonio T. M. Beirão  
thiago.ppgee.ufpa@gmail.com

<sup>1</sup> Pós-graduação em Engenharia Elétrica, Universidade Federal do Pará, Belém, PA 66075-970, Brazil

<sup>2</sup> Pós-graduação em Física, Universidade Federal do Pará, Belém, PA 66075-970, Brazil

<sup>3</sup> Faculdade de Física, Universidade Federal do Pará, Ananindeua, PA 67030-000, Brazil

<sup>4</sup> Faculdade de Física, Universidade Federal do Pará, Belém, PA 66075-110, Brazil

A specific type of arrangement with triangular zigzag geometry has been investigated. In this case, adding one or more sites to the zigzag chain produces coupled inverted triangles (chiral modes) [13]. In this work, we consider a zigzag chain and the influence of such a triangular network on the emergence of unpaired Majorana modes, corresponding to a tight-binding representation of a 1D chain above a topological superconductor [13].

The system consists of two leads in contact with a single-level quantum dot (QD) [14], coupled to a nanowire of zigzag atoms above a topological superconductor (TS) with  $p$ -wave pairing (Fig. 1a). The QD is a possible candidate for detection of MBS [15–17]. Study of quantum transport through a QD coupled with MBS (QD-MBS) also extends to system configurations based on a T-shaped QD structure [18]. More recently, study of quantum transport through QD-MBS was extended to multi-QD systems [19].

The chemical potential  $\mu$ , hopping  $h$ , and pairing amplitude  $\Delta$  induce relatively complex couplings; the model illustrated in Fig. 1a is analyzed in two phases: (a) the trivial phase with  $\mu < 0$  and  $\Delta = h = 0$ , and (b) the topological phase with  $\mu = 0$  and  $\Delta = h \neq 0$ , as well as (b.1) the more general topological situation with  $\mu \neq 0$  and  $\Delta \neq h$ , which still lies in the topological phase [2, 13] (Fig. 1c).

In Fig. 1c, the green curve shows the transition between the trivial and topological phases. Any point on this curve corresponds to the system in phase transition, i.e.,  $E_Z = \sqrt{\Delta^2 + \mu^2}$ , where  $E_Z$  is the Zeeman energy due to the external magnetic field  $\mathbf{B}$ . Below the green curve, the system is represented by the trivial phase with  $E_Z < \sqrt{\Delta^2 + \mu^2}$ ; Above the green curve, the system is characterized by the topological phase (b) with  $\mu = 0$ ,  $h_\alpha = \Delta_\alpha = \Delta = h \neq 0$  and by the more general topological situation with  $\mu \neq 0$  and  $\Delta \neq h$  (b.1), but still in the topological phase.

The model with five sites is investigated based on the phase diagram in Fig. 1d, plotted as pairing amplitude ( $\Delta$ ) versus QD chain coupling ( $\lambda$ ). The topological phase is robust and sensitive for  $\Delta \approx 0.1$ , characterizing the phase transition and ensuring detection of Majorana fermions for  $G_C(\omega) = 0.5$ .

We carried out calculations at the thermodynamic limit in the context of Green's functions [16, 20], focusing on finite-size effects by varying the free parameters of the model for three, four, and five sites, for further projection of the behavior for  $n$  sites. In fact, we performed calculations under conditions of very low temperatures and small potential differences [21], such that the temperature almost does not affect the conductance curve and quantum effects are preserved.

The aim of this work is to consider a more realistic configuration based on the complexity of the triangular network chain (triangular disorder) [22]. This model is an extension of the Kitaev chain [13] and, in addition, is an experimentally realistic example for detection of Majorana fermions [17].

## 2 Methodology

We consider a single-level quantum dot (QD), in contact with spinless leads, coupled to a nanowire of zigzag atoms formed by two Kitaev chains (with odd or even sites) [13, 22] above a topological superconductor with  $p$ -wave pairing.

The system is split into three parts: quantum dot (QD), leads (L), and zigzag chain atoms (C), as shown by the Hamiltonian in Eq. 1.

The Hamiltonian of a finite 1D chain of size  $L$  is given by

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_D + \mathcal{H}_L + \mathcal{H}_{DL} + \mathcal{H}_{DC} + \mathcal{H}_C, \quad (1)$$

where  $\mathcal{H}_D = \epsilon_d d_0^\dagger d_0$  describes the quantum dot with energy tuned to  $\epsilon_d$ ,  $\mathcal{H}_L = \sum_{k\alpha} \epsilon_k c_{k\alpha}^\dagger c_{k\alpha}$  describes the left and right metallic leads with chemical potential  $\mu_L = 0$ , and  $\mathcal{H}_{DC} = \lambda d_0^\dagger c_1 + \lambda c_1^\dagger d_0$  and  $\mathcal{H}_{DL} = \sum_{k\alpha} V_{k\alpha} (c_{k\alpha}^\dagger d_0 + d_0^\dagger c_{k\alpha})$  describe the coupling between the QD and the first site of the zigzag chain or leads, respectively. In addition,  $V_{k\alpha}$  represents the tunneling between the QD and leads, and  $\lambda \geq 0$  the coupling between the QD and the chain.

We consider single-component fermions on a finite 1D chain of size  $L$  with Hamiltonian  $\mathcal{H}_C = \mathcal{H}_{\alpha=1} + \mathcal{H}_{\alpha=2} + \mathcal{H}_\mu$ ,

where  $\mathcal{H}_\mu = -\mu \sum_{i=1}^L (c_i^\dagger c_i)$  is the number operator, and

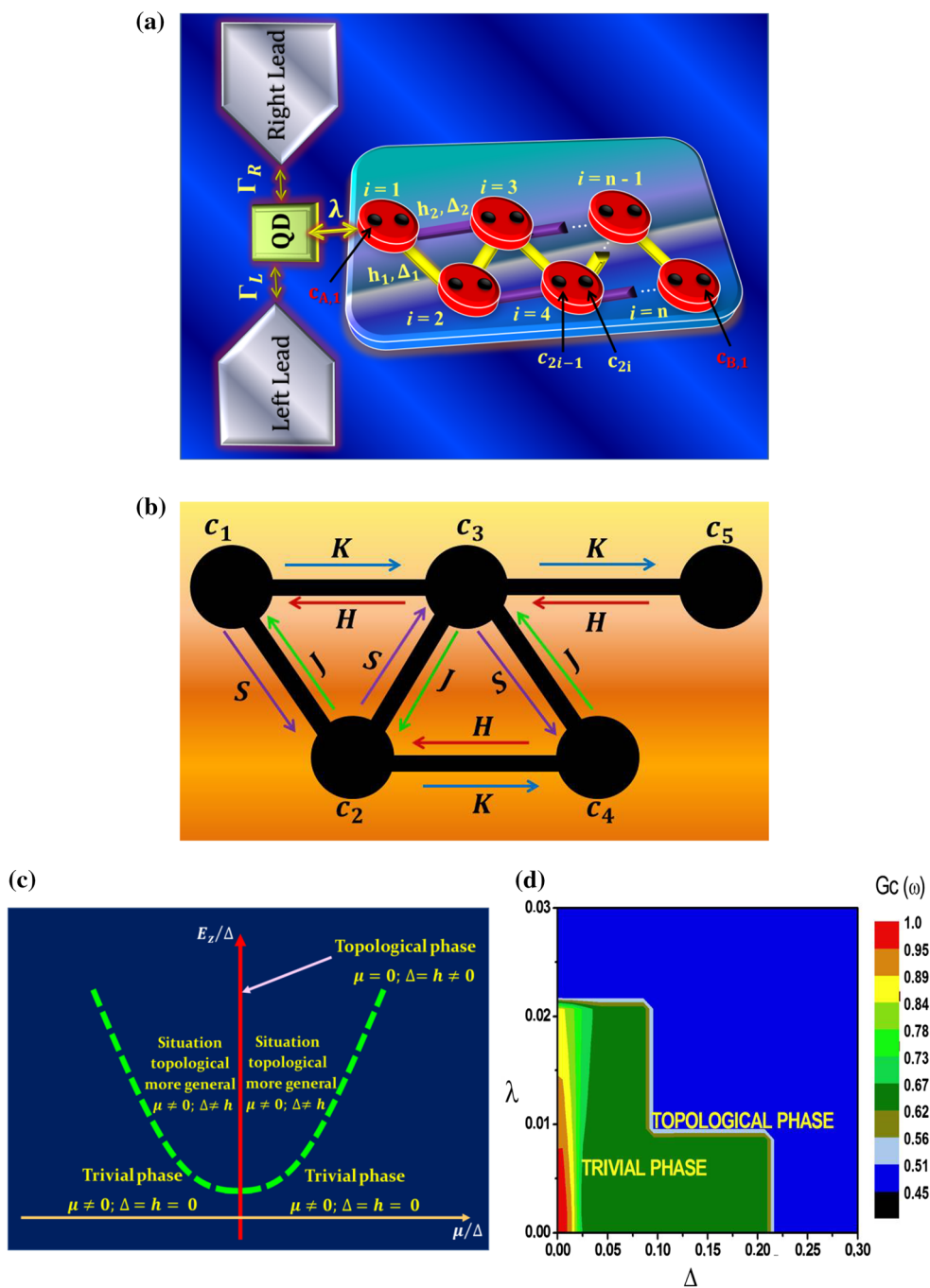
$$\mathcal{H}_\alpha = \sum_{i=1}^{L-\alpha} \left( -h_\alpha c_i^\dagger c_{i+\alpha} - h_\alpha c_{i+\alpha}^\dagger c_i + \Delta_\alpha c_i c_{i+\alpha} + \Delta_\alpha c_{i+\alpha}^\dagger c_i^\dagger \right) \quad (2)$$

describes the interactions between electrons at adjacent sites and the interactions due to the proximity of the superconductor to the chain. Moreover,  $c_i$  and  $c_i^\dagger$  are fermionic operators ( $i = 1, 2, \dots, L$ ),  $h_\alpha \geq 0$ , and  $\Delta_\alpha = |\Delta_\alpha| e^{j\theta_\alpha}$  with  $\alpha = 1$  and  $\alpha = 2$  representing intersite hopping and the pairing amplitudes of the topological superconductor, respectively; the arbitrary phase is  $\theta$ , and  $j$  is the imaginary complex unit. The pairing amplitude terms in  $\mathcal{H}_\alpha$  are obtained using Raman-induced dissociation of Cooper pairs or Feshbach molecules forming a Bardeen–Cooper–Schrieffer (BCS) atomic reservoir [13].

Majorana fermions are represented by  $\xi_{kl}$ , where  $k = A, B$  through  $c_l = e^{-j\theta/2} (\xi_{Bl} + j\xi_{Al})/2$  and  $c_l^\dagger = e^{j\theta/2} (\xi_{Bl} - j\xi_{Al})/2$ ,  $l = 0, 1, 2, \dots, N$  (where  $l = 0$  is the QD) [8]. The  $\xi_{kl}$  satisfy  $[\xi_{kl}, \xi_{k'l'}]_+ = 2\delta_{kk'}\delta_{ll'}$  and  $\xi_{kl} = \xi_{kl}^\dagger$ .

We use the recursive Green's function approach [16, 17, 20], based on Green's functions calculated to describe the configuration indicated in Fig. 1a and the interactions between neighboring sites in the chain as shown in Fig. 2b.

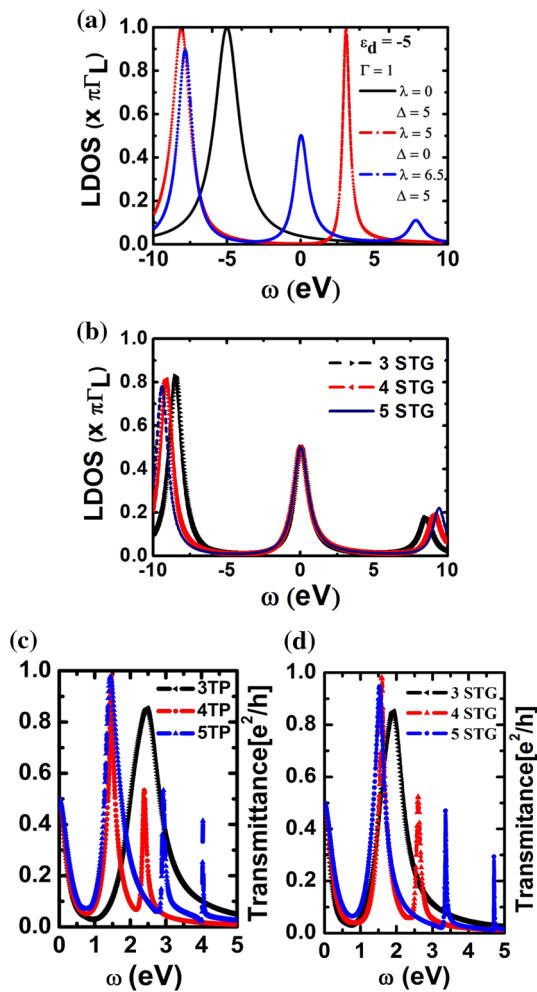
The recursive method was validated by the pioneering work of Meier and Wingreen [23], who applied the Green's function method to a two-terminal system coupled to the



**Fig. 1** **a** A quantum dot with single level, coupled with two electrodes, with respective couplings  $\Gamma_L$  and  $\Gamma_R$ , connected to a zigzag chain of atoms with  $n$  sites via a coupling constant  $\lambda$ , where the chain is above a superconductor substrate with  $p$ -wave pairing.  $c_{2i-1}$  and  $c_{2i}$  are the Majorana operators for each site.  $c_{A,1}$  and  $c_{B,1}$  are the MBS at the ends of the 1D chain. The coupling constants within the chain are  $h_1, \Delta_1$  and  $h_2, \Delta_2$ , called hopping and pairing amplitudes, respectively. **b** The elec-

tronic interaction between the five sites of the zigzag chain, measured by the **K**, **H**, **J**, and **S** coupling matrices. These matrices are presented in Sect. 2 and reveal how much electron tunneling occurs between the sites of the chain. **c** Diagram representing the difference between the trivial and topological phases [2]. **d** Phase diagram  $(\Delta) \times (\lambda) \times G_C(\omega)$ . The topological phase with Majorana zero modes corresponds to the blue region in the figure for the system containing five sites





**Fig. 2** **a** LDOS with fixed parameters  $\epsilon_d = -5$  and  $\Gamma_R = \Gamma_L = \Gamma/2$  and coupling between the QD and the chain ( $\lambda$ ) and pairing amplitudes ( $\Delta$ ) varying as  $\lambda = 0$  and  $\Delta = 5$  (black color),  $\lambda = 5$  and  $\Delta = 0$  (red color), and  $\lambda = 6.5$  and  $\Delta = 5$  (blue color). **b** LDOS with fixed parameters  $\epsilon_d = -5$  and  $\Gamma_R = \Gamma_L = \Gamma/2$  in the more general topological situation for three, four, and five sites with parameters tuned to  $\epsilon_d = -5$ ,  $\Gamma = 1.2$ , and  $\Delta_\alpha = 0.2h_\alpha$ , and numerically varied  $\lambda$  and  $h_\alpha$ . **c** Calculated transmittance in TP ( $h_\alpha = \Delta_\alpha = \Delta = h$ ) with  $\epsilon_d = 0$  for: 3TP with parameters  $\Gamma = 0.9$ ,  $\lambda = 2.8$ ,  $\Delta = 0.45$ ; 4TP with  $\Gamma = 0.45$ ,  $\lambda = 1.45$ ,  $\Delta = 0.6$ ; 5TP with  $\Gamma = 0.7$ ,  $\lambda = 1.5$ ,  $\Delta = 1.11$ . **d** Calculated transmittance in STG ( $\mu = 0$  and  $h_\alpha \neq \Delta_\alpha$ ) with  $\epsilon_d = 0$  and  $\Delta_\alpha = 0.2h_\alpha$  for: 3STG with parameters  $\Gamma = 0.7$ ,  $\lambda = 1.7$ ,  $h = 0.175$ ; 4STG with  $\Gamma = 0.43$ ,  $\lambda = 1.6$ ,  $h = 0.325$ ; 5STG with  $\Gamma = 0.52$ ,  $\lambda = 1.45$ ,  $h = 0.65$

central region of a QD. The coupled matrix equations for the topological phase describe the configuration for the model containing  $n$  sites (Fig. 1a). The set of the coupled matrix equations for  $n$  sites can be represented as

$$G_n = \mathbf{H}G_{n-2}, \quad (3)$$

$$G_{n-1} = \mathbf{H}G_{n-3} + \mathbf{J}G_{n-2}, \quad (4)$$

$$G_{n-2} = \mathbf{H}G_{n-4} + \mathbf{J}G_{n-3} + \mathbf{S}G_{n-1} + \mathbf{K}G_n, \quad (5)$$

⋮

$$G_3 = \mathbf{H}G_1 + \mathbf{J}G_2 + \mathbf{S}G_4 + \mathbf{K}G_5, \quad (6)$$

$$G_2 = \mathbf{J}G_1 + \mathbf{S}G_3 + \mathbf{K}G_4, \quad (7)$$

$$G_1 = \mathbf{Q}G_0 + \mathbf{S}G_2 + \mathbf{K}G_3, \quad (8)$$

$$\mathbf{W}G_0 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + \mathbf{P}V G_{k\alpha} + \mathbf{Z}G_1. \quad (9)$$

Therefore, the set of coupled matrix equations for  $n$  sites is defined by Eqs. (3)–(9), with

$$\mathbf{H} = \begin{bmatrix} -\frac{\hbar_2}{\omega} & \frac{\Delta_2}{\omega} \\ -\frac{\Delta_2}{\omega} & \frac{\hbar_2}{\omega} \end{bmatrix}; \quad \mathbf{J} = \begin{bmatrix} -\frac{\hbar_1}{\omega} & \frac{\Delta_1}{\omega} \\ -\frac{\Delta_1}{\omega} & \frac{\hbar_1}{\omega} \end{bmatrix}; \quad \mathbf{S} = \begin{bmatrix} -\frac{\hbar_1}{\omega} & -\frac{\Delta_1}{\omega} \\ \frac{\Delta_1}{\omega} & \frac{\hbar_1}{\omega} \end{bmatrix} \quad (10)$$

$$\mathbf{K} = \begin{bmatrix} -\frac{\hbar_2}{\omega} & -\frac{\Delta_2}{\omega} \\ \frac{\Delta_2}{\omega} & \frac{\hbar_2}{\omega} \end{bmatrix}; \quad \mathbf{Q} = \begin{bmatrix} \frac{\lambda}{\omega} & 0 \\ 0 & -\frac{\lambda}{\omega} \end{bmatrix}; \quad \mathbf{Z} = \begin{bmatrix} \lambda & 0 \\ 0 & -\lambda \end{bmatrix}; \quad (11)$$

$$\mathbf{W} = \begin{bmatrix} (\omega - \epsilon_d) & 0 \\ 0 & (\omega + \epsilon_d) \end{bmatrix}; \quad \mathbf{P}V = \begin{bmatrix} j\Gamma & 0 \\ 0 & j\Gamma \end{bmatrix} \quad (12)$$

such that the matrices  $\mathbf{H}$ ,  $\mathbf{J}$ ,  $\mathbf{S}$ , and  $\mathbf{K}$  represent the values of the pairing amplitudes and hopping for nearest neighbors as well as next nearest neighbors,  $\mathbf{Q}$  and  $\mathbf{Z}$  show the coupling between the QD and the first site, and  $\mathbf{W}$  and  $\mathbf{P}V$  represent the level of the QD and the level broadening between the electrode and the QD, respectively.

We performed calculations to obtain the Green's function of the model proposed in Fig. 1a for the largest finite quantity desired, as shown by Kraus et al. [13] for a system containing 30 sites and Kraus [22] for a periodic  $70 \times 70$  lattice.

Based on the set of coupled matrix equations for  $n$  sites, we consider the specific case of a zigzag chain with five sites, i.e.,  $i = 5$  (Eqs. 13–18), for which we have

$$G_5 = \mathbf{H}G_3, \quad (13)$$

$$G_4 = \mathbf{H}G_2 + \mathbf{J}G_3, \quad (14)$$

$$G_3 = \mathbf{H}G_1 + \mathbf{J}G_2 + \mathbf{S}G_4 + \mathbf{K}G_5, \quad (15)$$

$$G_2 = \mathbf{J}G_1 + \mathbf{S}G_3 + \mathbf{K}G_4, \quad (16)$$

$$G_1 = \mathbf{Q}G_0 + \mathbf{S}G_2 + \mathbf{K}G_3, \quad (17)$$

$$\mathbf{W}G_0 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + \mathbf{P}V G_{k\alpha} + \mathbf{Z}G_1. \quad (18)$$

Equations (13)–(18) represent the interactions between adjacent sites through the matrices (10) to (12).

Figure 1a and Eq. (14) show the fourth site interacting with the second and third site via the matrices  $\mathbf{H}$  and  $\mathbf{J}$  that represent the pairing amplitudes of the topological superconductor to the chain and hopping for nearest neighbors as well as next nearest neighbors, respectively.

Using the iterative method to decouple the set of equations (13) to (18), we obtain  $G'_0$ , a  $2 \times 1$  matrix that represents the Green's function of the QD, given by

$$G'_0 = [W - PV - T_i]^{-1} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \tag{19}$$

with  $T_i$  a  $2 \times 2$  matrix given by

$$T_i = \begin{bmatrix} R_i(\omega)\lambda^2 & S_i(\omega)\lambda^2 \\ S_i(\omega)\lambda^2 & R_i(\omega)\lambda^2 \end{bmatrix}, \tag{20}$$

and the elements  $R_i(\omega)$  and  $S_i(\omega)$  of the scattering matrix (20) for  $i = 4$  and  $i = 5$  sites, respectively, are

$$R_4(\omega) = \frac{(24\Delta^4 - 12\Delta^2\omega^2 + \omega^4)}{48\Delta^4\omega - 16\Delta^2\omega^3 + \omega^5};$$

$$S_4(\omega) = \frac{4\Delta^2(-6\Delta^2 + \omega^2)}{48\Delta^4\omega - 16\Delta^2\omega^3 + \omega^5}, \tag{21}$$

$$R_5(\omega) = \frac{(-32\Delta^6 + 72\Delta^4\omega^2 - 18\Delta^2\omega^4 + \omega^6)}{-64\Delta^6\omega + 96\Delta^4\omega^3 - 20\Delta^2\omega^5 + \omega^7};$$

$$S_5(\omega) = \frac{2\Delta^2(16\Delta^4 - 12\Delta^2\omega^2 + \omega^4)}{-64\Delta^6\omega + 96\Delta^4\omega^3 - 20\Delta^2\omega^5 + \omega^7}, \tag{22}$$

Therefore, inserting Eqs. (20)–(22) into Eq. (19), one obtains the exact Green's function  $G^r_{d_0d_0}(\omega)$ , according to Ref. [17].

The Green's function of the QD can be expressed as

$$G^r_{d_0d_0}(\omega) = \frac{1}{\omega - \epsilon_d + i\Gamma - R_i(\omega)\lambda^2 \{1 + \lambda^2 \tilde{R}_i(\omega)\}}, \tag{23}$$

with

$$\tilde{R}_i(\omega) = \frac{B_i(\omega)}{\omega + \epsilon_d + i\Gamma - R_i(\omega)\lambda^2} \tag{24}$$

and

$$B_i(\omega) = \frac{S_i^2(\omega)}{R_i(\omega)}. \tag{25}$$

After obtaining  $G^r_{d_0d_0}(\omega)$ , we detected MBS in the topological phase (TP) and in the more general topological situation (STG, b.1) described in the previous section, and calculated the transmittance  $T(\omega)$ , conductance  $G_C(\omega)$ , and local density of states (LDOS)  $\rho(\omega)$  of the device containing three, four, and five sites, respectively, where  $T(\omega) = G_C(\omega) = -\Gamma \text{Im}\{G^r_{d_0d_0}(\omega)\}$  and  $\rho(\omega) = \left(\frac{-1}{\pi}\right) \text{Im}\{G^r_{d_0d_0}(\omega)\}$ .

### 3 Results

According to the formulation described above, we consider symmetric coupling  $\Gamma = \Gamma_R = \Gamma_L$  and control the free parameters  $\lambda$ ,  $\Delta$ , and  $\Gamma$ . For a nanowire with three sites, we adjusted the level of the QD to  $\epsilon_d = -5$  and varied the parameters  $\Gamma$ ,  $\lambda$ , and  $\Delta$ .

The LDOS in Fig. 2a with  $\mu = 0$  and  $h_\alpha = \Delta_\alpha = \Delta = h$  corresponds to the topological phase (TP) [2, 13]. The Majorana peak appears at the Fermi level  $\epsilon_f = 0$  (blue curve) when the chain is strongly coupled to the QD with  $\lambda = 6.5$  and to the superconductor with  $\Delta = 5.0$ .

In the trivial phase, the red curve with  $\lambda = 5$  and  $\Delta = 0$  shows a gap at  $\omega = 0$ , typical of common fermions, and for  $\Delta = 0$  and  $\lambda = 0$  (black curve), resulting in electron tunneling. Therefore, this T-shaped structure also exhibited nonlocal processes, such as electron tunneling (ET) and Majorana bound states (MBS).

This process extends to the LDOS of the more general topological situation (STG) with  $\mu \neq 0$  and  $h_\alpha \neq \Delta_\alpha$  (Fig. 2b). In this case, we tuned  $\epsilon_d = -5$ ,  $\Gamma = 1.2$ ,  $\Delta_\alpha = 0.2h_\alpha$ , with  $\lambda$  and  $h_\alpha$  varying to  $\lambda = 7.5$  and  $h_\alpha = 3.1$  (black color),  $\lambda = 8.2$  and  $h_\alpha = 3.8$  (red color), and  $\lambda = 8.5$  and  $h_\alpha = 6.8$  (blue color). This reconfirms the robustness of the MBS for  $\omega = 0$ , even with the increased complexity of the hopping processes in the chain (Fig. 1b).

Assuming  $\epsilon_d = 0$ , we obtained the transmittance curves in the TP (Fig. 2c) and STG (Fig. 2d) for chains of 3–5 sites, tuning the remaining parameters to guarantee MBS for  $\omega = 0$ . By coupling the fourth and fifth sites to the end of the chain, the number of interactions is increased. As a result, the complexity of possible hoppings between sites increases, and new peaks arise.

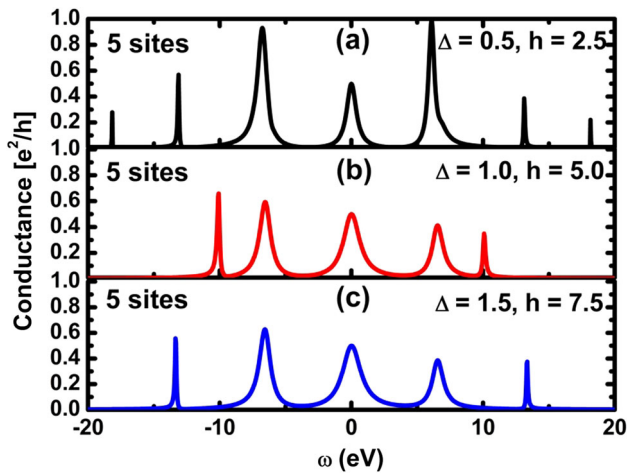
In both Fig. 2c and d, the largest contribution comes from the first peak adjacent to the MBS, and even in 3STG, this peak shifts to close to the Fermi level.

In Fig. 2d, for STG, a dependence on  $h$  was added to the free parameters, and the results again confirm that the topology of the chain created subgaps near the Fermi level, due to the type of coupling between neighboring sites.

In general, the second and third peaks in the STG deviate from the Fermi level, indicating a smaller contribution to the electronic tunneling due to the QD-chain coupling ( $\lambda$ ), since the coupling of the superconductor  $\Delta_\alpha = 0.2h_\alpha$  is highly sensitive to the topology of the chain.

Figure 3 shows the conductance  $G_C(\omega)$  in the more general topological situation. To ensure MBS, the system was tuned to  $\epsilon_d = -3$ ,  $\Gamma = 1$ , and  $\lambda = 8.5\Gamma$ , and we varied the hopping couplings with the dependence  $h = \Delta/0.2$  for three pairing amplitudes of  $\Delta = 0.5$ ,  $\Delta = 1.0$ , and  $\Delta = 1.5$ .

The choice of the pairing amplitudes ( $\Delta$ ) is experimentally based on the technique of Raman-induced dissociation of



**Fig. 3** Conductance of the system in the STG containing five sites with fixed parameters  $\varepsilon_d = -3$ ,  $\Gamma = 1$ , and  $\lambda = 8.5\Gamma$ , while varying the pairing amplitudes and hopping to *a*  $\Delta = 0.5$  and  $h = 2.5$  (black color), *b*  $\Delta = 1.0$  and  $h = 5.0$  (red color), and *c*  $\Delta = 1.5$  and  $h = 7.5$  (blue color) (Color figure online)

Cooper pairs or Feshbach molecules forming an atomic BCS reservoir, where  $\mu$  is the Raman detuning [13].

The best MBS signal was obtained for  $\Delta = 0.5$ ; for  $\Delta = 1.5$ , MBS were preserved and the highest electron mobility in the chain was guaranteed when  $h = 2.5$ , in comparison with the linear Kitaev chain.

The choice of the  $h$  parameter in our model is experimentally determined by the type of geometry of the studied chain, being related to optical grids that can be obtained using the cold atoms technique [5, 6].

This latter technique allows control of the amplitude of the coupling  $h_1 = h_2 = h$  present in the Hamiltonian of the system (Fig. 1a) and thereby the construction of the geometry of the sites in the zigzag chain.

Figure 4 shows the conductance of the model containing five sites for the following parameter values: QD level  $\varepsilon_d$ , level of the leads  $\Gamma$ , and pairing amplitudes of the topological superconductor  $\Delta$ , as previously fixed, while varying the hopping  $h$ .

Furthermore, we investigated the effect of the dot–chain coupling ( $\lambda$ ) with  $\varepsilon_d = -1$ ,  $\Delta = 0.5$ , and  $\Gamma = 1$  for two types of hopping. In Fig. 4a,  $h = \Delta/0.1$ , while in Fig. 4b,  $h = \Delta/0.2$ ; the nature of the intersite coupling is sensitive to this, while at the same time guaranteeing the MBS at the extremity of the wire.

In Fig. 4a with  $h = \Delta/0.1$ , the conductance shows two ET peaks, while in Fig. 4b, with  $h = \Delta/0.2$ , three regular fermion peaks are present. We confirmed the MBS signature, and once again, the hopping value limits the electron mobility in the chain.

In Fig. 4a, b, the fixed values ensure that, when the other parameter values are chosen, only the dot–chain coupling ( $\lambda$ ) will vary, guaranteeing the best MBS signal.

A possible experimental technique to study this phenomenon is the mechanical break junction (MBJ) [24–26] in nanowire structures. Indeed, due to the dependence of MBS on  $\lambda$ , it has been shown that MBS can be mechanically modulated in MBJ experiments [27] by changing the distance between the QD and chain.

Figure 5 shows the conductance of the model with five sites. We fixed the level of the QD  $\varepsilon_d$ , the level of the leads  $\Gamma$ , and the pairing amplitudes  $\Delta$ . Furthermore, we varied the dot–chain coupling  $\lambda$  and hopping  $h$ , respectively.

Figure 5 shows the conductance of the device containing five sites. We tuned  $\varepsilon_d = 0$ ,  $\Gamma = 1$ , and  $\Delta = 2$  and varied the hopping  $h$  and dot–chain couplings according to  $\lambda = 2h$ . For Fig. 5a with  $h = 0.4$ , we guaranteed ET mobility, but without the presence of MBS.

In Fig. 5b, for  $h = 0.6$ , we detected, in addition to common fermions at  $\omega \cong \pm 4.8, 2.9$ , and  $1.5$  eV, MBS at  $\omega = 0$  eV.

The plot in Fig. 5c, for hopping  $h = 0.8$ , presents an enhanced Majorana signal at  $\omega = 0$  together with the signatures of common fermions at  $\omega \cong \pm 5.8, 4.2$ , and  $1.6$  eV.

The short-range  $h$  interaction affects the detection of MBS, whereas the sufficiently strong long-range interaction induces the appearance of MBS at the extremities of the chain and, therefore, leads to  $G_{\text{Peak}} = e^2/2h$ , as shown in Fig. 5b, c. Such results indicate the potential to monitor the MBS spectrum in a triangular chain by relating it to experimental techniques applicable to the presented model.

## 4 Conclusions

We propose a new class of nanodevice using the recursive Green’s function approach that governs the whole model.

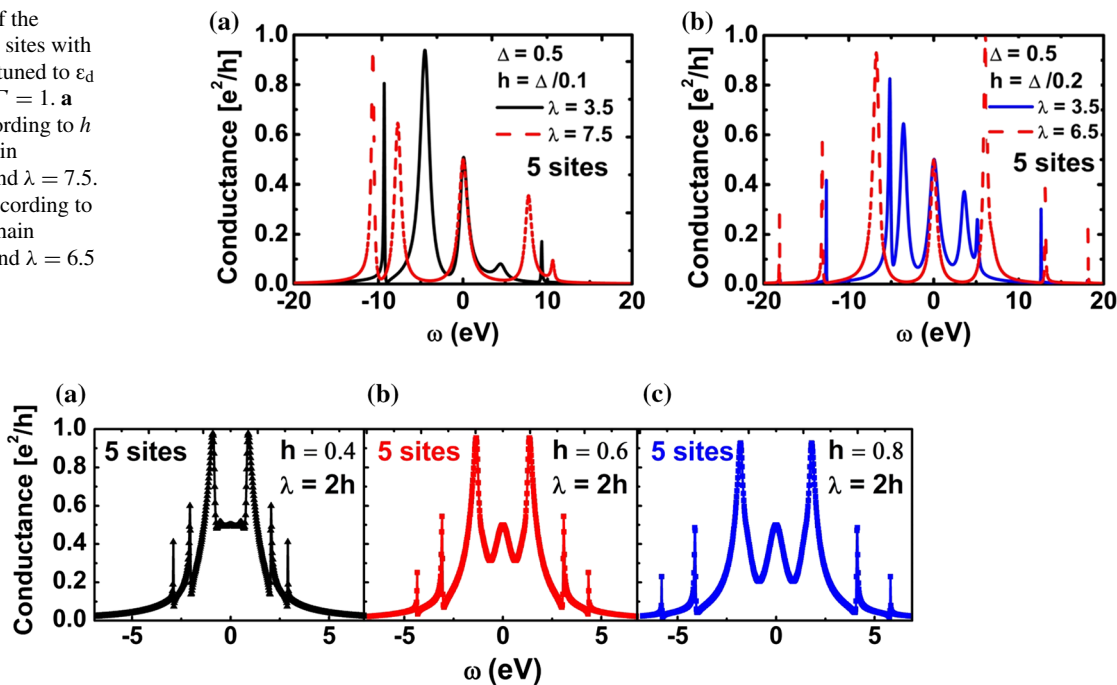
The results for the system were analyzed in the trivial phase, the topological phase, and the more general topological situation, for the following parameter values:  $\mu \neq 0$ ,  $h_\alpha = \Delta_\alpha = 0$ ;  $\mu = 0$ ,  $h_\alpha = \Delta_\alpha = \Delta = h \neq 0$ , and  $\mu \neq 0$  and  $h_\alpha \neq \Delta_\alpha$ , for a finite chain with up to five sites [2, 13].

Was observed a peak in the conductance at  $G = e^2/h$  for regular fermions. Furthermore, the peak for Majorana fermions was verified at  $G = e^2/2h$ .

We confirmed that the zigzag chain topology creates subgaps close to the Fermi level, due to the increased complexity of hopping in the chain for the model with weak disorder, with four and five sites.

These analyses were carried out by choosing values for the free parameters, being experimentally anchored in the type of geometry of the studied chain. This could refer to: (i) an optical grid, which can be produced using the cold atoms technique, or (ii) combination with another technique, such as the mechanical break junction (MBJ) [28] due to the dot–chain interface in the T-shaped geometry [29].

**Fig. 4** Conductance of the model containing five sites with fixed parameters and tuned to  $\varepsilon_d = -1$ ,  $\Delta = 0.5$ , and  $\Gamma = 1$ . **a** Hopping varying according to  $h = \Delta/0.1$ , and dot–chain coupling of  $\lambda = 3.5$  and  $\lambda = 7.5$ . **b** Hopping varying according to  $h = \Delta/0.2$ , and dot–chain coupling of  $\lambda = 3.5$  and  $\lambda = 6.5$



**Fig. 5** Conductance of the device containing five sites with parameters tuned and fixed at  $\varepsilon_d = 0$  and  $\Gamma = 1$  with pairing amplitudes  $\Delta = 2$  and **a** hopping of  $h = 0.4$  and dot–chain coupling of  $\lambda = 2h$ , **b** hopping of

$h = 0.6$  and dot–chain coupling of  $\lambda = 2h$ , and **c** hopping of  $h = 0.8$  and dot–chain coupling of  $\lambda = 2h$

To decrease the number of interactions between the chain sites and thereby the number of peaks adjacent to the MBS in the zigzag chain of atoms containing five sites, we used the more general topological situation to analyze this effect, with  $\mu = 0$  and  $h_\alpha = 2, 5\Delta_\alpha$ .

The results show that, in the more general topological situation, the effect of disorder in the chain remains for sites 4 and 5.

The effect of disorder in the chain causes fluctuations in the spacing of the levels at the sites, but does not affect the qualitative structure; however, at site 5, Fig. 5a–c shows the elimination of a pair of adjacent peaks at the zero mode.

The results for this more realistic model for obtaining MBS in linear chains, networks, and nanowires are in agreement with literature.

This work represents an analytical and numerical study in systems with experimentally accessible parameter values. We have also shown that it can be applied to systems in which the QDs [30] are defined by other processes, for example, formed by InAs, InSb, or a single nanowire.

**Acknowledgements** Antonio Thiago Madeira Beirão and Alexandre de Souza Oliveira are grateful to CAPES/FAPESP and CAPES—PROGRAM PRODOUTORAL/UFGA fellowship, respectively. Shirsley S. da Silva and Jordan Del Nero would like to thank CNPq and INCT/Nanomateriais de Carbono for financial support.

## References

- Majorana, E.: Teoria simmetrica dell'elettrone e del positrone. *Nuovo Cimento*. **14**, 171–184 (1937). <https://doi.org/10.1007/bf02961314>
- Alicea, J.: New directions in the pursuit of Majorana fermions in solid state systems. *Rep. Prog. Phys.* (2012). <https://doi.org/10.1088/0034-4885/75/7/076501>
- Leijnse, M., Flensberg, K.: Quantum information transfer between topological and spin qubit systems. *Phys. Rev. Lett.* (2011). <https://doi.org/10.1103/physrevlett.107.210502>
- Alicea, J.: Exotic matter: Majorana modes materialize. *Nat. Nanotechnol.* **8**, 623–624 (2013). <https://doi.org/10.1038/nnano.2013.178>
- Jiang, L., et al.: Majorana fermions in equilibrium and in driven cold-atom quantum wires. *Phys. Rev. Lett.* (2011). <https://doi.org/10.1103/physrevlett.106.220402>
- Zhang, C., Tewari, S., Lutchyn, R.M., Das Sarma, S.:  $p_x + ip_y$  Superfluid from s-wave interactions of Fermionic cold atoms. *Phys. Rev. Lett.* (2008). <https://doi.org/10.1103/physrevlett.101.160401>
- Mourik, V., Zuo, K., Frolov, S.M., Plissard, S.R., Bakkers, E.P.A.M., Kouwenhoven, L.P.: Signatures of Majorana fermions in hybrid superconductor-semiconductor nanowire devices. *Science* **336**, 1003–1007 (2012). <https://doi.org/10.1126/science.1222360>
- Kitaev, A.Yu.: Unpaired Majorana fermions in quantum wires. *Phys. Usp.* **44**, 131–136 (2001). <https://doi.org/10.1070/1063-7869/44/10S/S29>
- Sato, M., Ando, Y.: Topological superconductors: a review. *Rep. Prog. Phys.* (2017). <https://doi.org/10.1088/1361-6633/aa6ac7>
- Qi, X.-L., Zhang, S.-C.: Topological insulators and superconductors. *Rev. Mod. Phys.* (2011). <https://doi.org/10.1103/revmodphys.83.1057>

11. Kraus, Y.E., Auerbach, A., Fertig, H.A., Simon, S.H.: Majorana fermions of a two dimensional  $p_x + ip_y$  superconductor. *Phys. Rev. B*. (2009). <https://doi.org/10.1103/physrevb.79.134515>
12. De Gennes, P.G.: Boundary effects in superconductors. *Rev. Mod. Phys.* (1964). <https://doi.org/10.1103/revmodphys.36.225>
13. Kraus, C.V., Diehl, S., Zoller, P., Baranov, M.A.: Preparing and probing atomic Majorana fermions and topological order in optical lattices. *New J. Phys.* (2012). <https://doi.org/10.1088/1367-2630/14/11/113036>
14. Law, K.T., Lee, P.A., Ng, T.K.: Majorana fermion induced resonant Andreev reflection. *Phys. Rev. Lett.* (2009). <https://doi.org/10.1103/physrevlett.103.237001>
15. Leijnse, M., Flensberg, K.: Scheme to measure Majorana fermion lifetimes using a quantum dot. *Phys. Rev. B* (2011). <https://doi.org/10.1103/physrevb.84.140501>
16. Vernek, E., Penteado, P.H., Seridonio, A.C., Egues, C.: Subtle leakage of a Majorana mode into a quantum dot. *Phys. Rev. B* (2014). <https://doi.org/10.1103/physrevb.89.165314>
17. Liu, D.E., Baranger, H.U.: Detecting a Majorana-fermion zero mode using a quantum dot. *Phys. Rev. B* (2011). <https://doi.org/10.1103/physrevb.84.201308>
18. Benito, M., Platero, G.: Floquet Majorana fermions in superconducting quantum dots. *Physica E: Low Dimens. Syst. Nanostruct.* (2015). <https://doi.org/10.1016/j.physe.2015.08.030>
19. Li, Z.-Z., Lam, C.-H., You, J.Q.: Probing Majorana bound states via counting statistics of a single electron transistor. *Sci. Rep.* (2015). <https://doi.org/10.1038/srep11416>
20. Xue, Y., Datta, S., Ratner, M.A.: First-principles based matrix-Green's function approach to molecular electronic devices: general formalism. *Chem. Phys.* (2002). [https://doi.org/10.1016/s0301-0104\(02\)00446-9](https://doi.org/10.1016/s0301-0104(02)00446-9)
21. Gong, W.-J., Zhang, S.-F., Li, Z.-C., Yi, G., Zheng, Y.-S.: Detection of a Majorana fermion zero mode by a T-shaped quantum-dot structure. *Phys. Rev. B*. (2014). <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.89.245413>
22. Kraus, Y.E., Stern, A.: Majorana fermions on a disordered triangular lattice. *New J. Phys.* (2011). <https://doi.org/10.1088/1367-2630/13/10/105006>
23. Kadanoff, L.P., Baym, G.: *Quantum Statistical Mechanics: Green's Function Methods in Equilibrium and Nonequilibrium Problems*, 1st edn. W.A. Benjamin, Reading (1962)
24. Smit, R.H.M., Noat, Y., Untiedt, C., Lang, N.D., van Hemert, M.C., Ruitenbeek, J.M.: Measurement of the conductance of a hydrogen molecule. *Nature* **419**, 906–909 (2002). <https://doi.org/10.1038/nature01103>
25. Reichert, J., Ochs, R., Beckmann, D., Weber, H.B., Mayor, M., Loehneysen, H.: Driving current through single organic molecules. *Phys. Rev. Lett.* (2002). <https://doi.org/10.1103/physrevlett.88.176804>
26. Wang, L., Ling, W., Zhang, L., Xiang, D.: Advance of mechanically controllable break junction for molecular electronics. *Top. Curr. Chem.* (2017). <https://doi.org/10.1007/s41061-017-0149-0>
27. Perrin, M.L., Verzijl, C.J.O., Martin, C.A., Shaikh, A.J., Eelkema, R., van EschJan, H., van Ruitenbeek, J.M., Thijsen, J.M., van der Zant, H.S.J., Dulic, D.: Large tunable image-charge effects in single-molecule junctions. *Nat. Nanotechnol.* **8**, 282–287 (2013). <https://doi.org/10.1038/nnano.2013.26>
28. Caussanel, M., Schrimpf, R.D., Tsetseris, L., Evans, M.H., Pantelides, S.T.: Engineering model of a biased metal–molecule–metal junction. *J. Comput. Electron.* **6**, 425–430 (2007). <https://doi.org/10.1007/s10825-007-0151-9>
29. Walus, K., Karim, F., Ivanov, A.: Architecture for an external input into a molecular QCA circuit. *J. Comput. Electron.* **8**, 35–42 (2009). <https://doi.org/10.1007/s10825-009-0268-0>
30. Roloff, R., Wenin, M., Pötz, W.: Control strategies for semiconductor-quantum-dot-based single and double qubits. *J. Comput. Electron.* **8**, 29–34 (2009). <https://doi.org/10.1007/s10825-009-0267-1>