unesp

UNIVERSIDADE ESTADUAL PAULISTA

PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA

Sintonizador termoelétrico assistido por férmions de Majorana

ÁREA DE CONCENTRAÇÃO EM FÍSICA APLICADA

André Ramalho dos Santos

INSTITUTO DE GEOCIÊNCIAS E CIÊNCIAS EXATAS

RIO CLARO

UNIVERSIDADE ESTADUAL PAULISTA "JÚLIO DE MESQUITA FILHO"
INSTITUTO DE GEOCIÊNCIAS E CIÊNCIAS EXATAS
CÂMPUS DE RIO CLARO

André Ramalho dos Santos

Sintonizador Termoelétrico Assistido por Férmions de Majorana

Dissertação de mestrado apresentada ao Instituto de Geociências e Ciências Exatas da Universidade Estadual Paulista Júlio de Mesquita Filho – UNESP, Câmpus de Rio Claro, como parte dos requisitos para obtenção do título de Mestre em Física, sob a orientação do Prof. Dr. Antorino Carlos Ferreira Seridonio.

RIO CLARO – SP

2018

André Ramalho dos Santos

Sintonizador Termoelétrico Assistido por Férmions de Majorana

Dissertação de mestrado apresentada ao Instituto de Geociências e Ciências Exatas da Universidade Estadual Paulista Júlio de Mesquita Filho – UNESP, Câmpus de Rio Claro, como parte dos requisitos para obtenção do título de Mestre em Física, sob a orientação do Prof. Dr. Antorino Carlos Ferreira Seridonio.

Comissão Examinadora

Prof. Dr. Antonio Carlos Ferreira Seridonio – UNESP Rio Claro

Prof. Dr. Claudio Luiz Carvalho – UNESP Ilha Solteira

Prof. Dr. Valdeci Pereira Mariano de Souza – UNESP Rio Claro

RIO CLARO – SP

2018

539.721 Santos, André Ramalho dos
S237s Sintonizador termoelétrico assistido por férmions de Majorana / André Ramalho dos Santos. - Rio Claro, 2018
44 f. : il., figs., gráfs.

Dissertação (mestrado) - Universidade Estadual Paulista, Instituto de Geociências e Ciências Exatas
Orientador: Antônio Carlos Ferreira Seridonio

1. Partículas (Física nuclear). 2. Férmions de Majorana. 3. Quantum dot. 4. Codutância termoelétrica. 5. Funções de Green. 6. Computação quântica. I. Título.

Ficha Catalográfica elaborada pela STATI - Biblioteca da UNESP
Campus de Rio Claro/SP - Ana Paula Santulo C. de Medeiros / CRB 8/7336

UNIVERSIDADE ESTADUAL PAULISTA

Câmpus de Rio Claro

DEFESA DE DISSERTAÇÃO DE MESTRADO DO PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA

DISCENTE: ANDRÉ RAMALHO DOS SANTOS

TÍTULO: Sintonizador Termoelétrico assistido por Férmions de Majorana

Data: 30 de Novembro de 2017 às 14:00

Local: Sala de Videoconferência do Bloco Didático G II

APROVADO (X) REPROVADO ( )

PARECER CIRCUNSTANCIADO:

Rio Claro, 30 de Novembro de 2017

Prof. Dr. Antonio Carlos Ferreira Seridonio

Prof. Dr. Valdeci Pereira Mariano de Souza

Prof. Dr. Claudio Luiz Carvalho

Agradecimentos

É com grande satisfação que foco aqui nos agradecimentos a aqueles que me ajudaram de alguma maneira a enfrentar os desafios do mestrado e da vivência na instituição e na cidade de Rio Claro/SP.

Agradeço à Deus, antes de tudo, por me dar forças nessa etapa muito conturbada de minha vida que por muitos momentos julguei ser um caminho errado que escolhi, mas que pude enxergar depois o quão importante foi essa fase.

Em primeiro lugar, agradeço ao instituto IGCE, pelos desafios do mestrado em Física no quesito das matérias que pude realizar, assim como a sabedoria e disciplina dos professores que pude conhecer. Ainda, incluso como primeiro lugar, agradeço aos esforços de meu orientador de pós-graduação, o Professor Dr. Antonio Carlos Ferreira Seridonio, da Faculdade de Engenharia de Ilha Solteira/UNESP, pelos conselhos, pelos sermões muito bem inseridos, pela confiança e insistência, e por último pelas minhas viagens a Ilha Solteira para conversar sobre o trabalho, muito bem recepcionadas e acolhedoras.

Agradeço a minha família, base de tudo, que me ajudaram muito com custos financeiros, conselhos e amor, me apoiando sempre.

Agradeço pelos amigos que conheci em Rio Claro que certamente serão amizades para a vida.

Aos mais próximos que me ajudaram em momentos ruins, Kimi, Arthur, Geovane e Hans. Aos técnicos do Departamento de Física, Leandro, André e Geraldo por muitos apoios.

Agradeço a uma pessoa muito importante nesse estágio de minha vida, a Mestre em Educação Tammy Ito, que foi a pessoa que mais esteve ao meu lado neste último ano, me aconselhando, apoiando como ombro amigo com amor e carinho, e provendo momentos felizes juntos.

Ao pessoal do grupo de estudos de Ilha Solteira de "Strongly Correlated Systems", pessoas essas que me apoiaram muito em discussões por Skype e via reuniões presenciais de Ilha Solteira.

Por fim, agradeço novamente ao Professor Seridonio por ter confiado em mim desde março de 2015 quando fui a sua sala buscar sua orientação para minha primeira experiência na pesquisa com Física Teórica. Falhei em algumas promessas minhas que fiz em sua sala aquele dia, mas aprendi com os tombos como o trabalho com a Física Teórica é árduo e sério e é o que pretendo continuar estudando para meu futuro.

Resumo

Nós estudamos teoricamente como o calor e a eletricidade são afetados pela sobreposição de dois férmions de Majorana (MFs, de Majorana fermions em Inglês), os quais estão isolados nas bordas de um fio topológico de Kitaev, em particular, na forma de ferradura. É considerado que esse fio está assimetricamente acoplado a um único ponto quântico (QD, de Quantum dot em Inglês) hibridizado com contatos metálicos. Em baixas temperaturas e dependente do nível de energia desse QD, nós mostramos que ao ajustar a assimetria acima, as respostas ressonantes das condutâncias termoelétricas mudam inesperadamene de forma drástica. Assim, propomos como aplicação, um sintonizador termoelétrico em nanoescala assistido por MFs.

Palavras chaves: Férmions de Majorana, quantum dot, codutância termoelétrica, funções de Green, computação quântica.

Abstract

We study theoretically in a topological U-shaped Kitaev wire, with Majorana fermions (MFs) on the edges, how heat and electricity are affected by them when found overlapped. The asymmetric regime of their couplings with a single quantum dot (QD) hybridized with metallic leads is considered. At low temperatures and dependent upon the QD energy level, we show that by tuning this asymmetry, the resonance positions of the thermoelectrical conductances change drastically. Thereby, the tuner of heat and electricity here proposed is constituted.

Keywords: Majorana fermions, quantum dot, thermoeletric conductance, Green´s functions, quantum computing

Lista de Figuras

1.1 Ilustração do dispositivo proposto: Fio de Kitaev em forma de "ferradura" com MFs η_A and η_B conectados por uma amplitude de sobreposição ε_2, os quais são acoplados assimetricamente via $\Delta + t$ e $\Delta - t$ com um QD acoplado simetricamente (V) com os reservatórios quente (H) e frio (C) dados por terminais metálicos. Desviando levemente da condição $t = \Delta$, nomeada de fase de fronteira metálica-supercondutora, o comportamento de sintonizador de calor e eletricidade emerge (sintonizador termoelétrico), dependendo do nível de energia do QD. 2

2.1 Ilustração da fase trivial [1]. As bolinhas avermelhadas simbolizam os férmions de Majorana, enquanto que as barras roxas os acoplamentos entre eles dentro das elipses de cor lilás representando os sítios do fio. Nesse caso não há acoplamentos entre os vizinhos mais próximos t = 0. 6

2.2 Ilustração da fase topológica [1]. As bolinhas avermelhadas simbolizam os férmions de Majorana, enquanto que as barras roxas os acoplamentos entre eles dentro das elipses de cor lilás representando os sítios do fio. 6

3.1 Ilustração do Hamiltoniano de Anderson [35]. O acoplamento é $\mathcal{V}$ entre a impureza e o hospedeiro. 8

6.1 Fio de Kitaev em forma de "ferradura" com apenas o MF η_A acoplado ao QD obtido com $t = \Delta$. (a) Condutância elétrica como função do nível de energia do QD ε_1 para várias amplitudes de sobreposição ε_2. (b) O mesmo para a condutância térmica. Em ambos os casos, calor e eletricidade são filtrados próximo ao nível de energia de Fermi $\varepsilon_1 = 0$, quando os MFs distanciados estão conectados ($\varepsilon_2 \neq 0$). Caso contrário, as condutâncias exibem comportamentos constantes. No quadro inserido, visualizamos o férmion auxiliar constituído pelos MFs η_A e η_B, os quais aparecem retratados como meias-esferas em vermelho. 28

6.2 Para pequenos desvios da fase de fronteira metálica-supercondutora $t = \Delta$, encontramos um sintonizador de (a) eletricidade e (b) calor. Em (a), a resposta ressonante da condutância elétrica exibe um deslocamento para a cor azul no caso em que $t > \Delta$ e deslocamento para o vermelho quando $t < \Delta$ em função do nível de energia do QD ε_1. O painel (b) mostra o mesmo comportamento para a condutância térmica, com quadros inseridos explicitando o comportamento coletivo dos MFs sobrepostos η_A e η_B (meias-esferas em vermelho). 29

6.3 Transmitância nos eixos ε_1 e ε. Painéis (a) e (b) mostram o regime $t = \Delta$, respectivamente para $\varepsilon_2 = 0$, o qual é caracterizado por uma estrutura em forma de "olho de gato" próxima do nível de Fermi enquanto que para ε_2 finito um perfil de "forquilha dupla" surge no lugar. Nos painéis (c) e (d), são observados o deslocamento para o azul e vermelho quando considerado $t \neq \Delta$. Dessa forma, o dispositivo é transformado em um sintonizador simultâneo de calor e eletricidade, sendo o perfil de "forquilha dupla" a marca registrada. Os arcos são pólos da função de Green do QD. 31

6.4 Outras propriedades termoelétricas como (a) o "thermopower" (S), (b) a Lei de Wiedmann-Franz (WF) e (c) a figura de mérito (ZT) são sintonizadas por leves desvios da fase $t = \Delta$. Em (a), emerge um filtro altamente eficiente de buracos ou elétrons. 32

Lista de abreviaturas

1D Uma dimensão

DOS Densidade de estados

EOM Equação de movimento

FGs Funções de Green

MFs Férmions de Majorana

QD Quantum dot

SC Supercondutor

Sumário

1 Introdução **1**

2 Fio topológico de Kitaev **4**

2.1 Fase trivial 6

2.2 Fase topológica 7

3 Hamiltoniano de Anderson e Funções de Green **8**

3.1 Hamiltoniano de Anderson 8

3.2 Funções de Green em Física do Estado Sólido 9

4 Função de Green de Quantum Dots (QDs) na fase $t = \Delta$ **11**

4.1 Sistema de dois QDs 11

4.2 Sistema de um QD 18

5 Hamiltoniano do Sistema **23**

6 Resultados e Discussão **27**

7 Conclusões **33**

Capítulo 1

Introdução

Diante do cenário abundante dos fenômenos da Física da Matéria Condensada, aqui nós focamos em um fascinante segmento, ou seja, o da supercondutividade topológica oriunda de Férmions de Majorana (MFs). Essas partículas sugeridas por volta de um século atrás e que já foram até candidatas a explicação de neutrinos, não são fundamentais na natureza no contexto de física da matéria condensada, pois para a mesma fundamentais são elétrons e íons comuns, de tal modo que existem sob ocasiões especiais e manifestam-se como quasipartículas sendo iguais às suas próprias anti-quasipartículas [1, 2], elas emegem como modos de energia zero, por exemplo, nas bordas de um fio topológico de Kitaev 1D [3-7], sendo esse considerado como o mais comum e simples sistema com supercondutividade do tipo "p" sem spin.

Hoje em dia, os MFs podem emergir em nano fios semicondutores nas proximidades de supercondutores do tipo "s" e atravessados por campos magnéticos perpendiculares, respectivamente da interação spin-órbita presente no primeiro e devido a uma fonte externa. Nesse caso, o grau de liberdade de spin é extinto e uma supercondutividade topológica baseada nesse dispositivo pode ser realizada [8, 9]. Além disso, cadeias magnéticas depositadas sobre supercondutores com forte interação spin-órbita [10, 11], o estado Hall quântico fracionário com fator de preenchimento $\nu = 5/2$ [12], isolantes topológicos tridimensionais [13] e vórtices supercondutores[14-16], também tornam-se ambientes propícios para o aparecimento dos MFs analogamente ao fio de Kitaev 1D.

É importante destacar que, uma vez que um par de MFs está espacialmente separado, eles revelam uma característica intrigante dessas quasipartículas: elas podem formar um *qubit* fermiônico não local e robusto, emergindo desacoplado do ambiente do hospedeiro e livre do fenômeno de decoerência. Naturalmente devido a isso, uma procura por MFs em configurações de Matéria Condensada despertou grande interesse de pesquisadores no campo da informação quântica e também no contexto de transporte quântico [17-19].

Até onde sabemos, essas quasipartículas exóticas são fortíssimas candidatas para a próxima geração de aplicações tecnológicas em nano dispositivos eletrônicos e computação [20, 21]: dentro deste cenário, já propusemos um seletor de corrente em nanoescala empregando um par de pontos quânticos (QDs) e dois fios de Kitaev [20], assim como encontramos estados ligados no contínuo para o armazenamento de *qubit*s

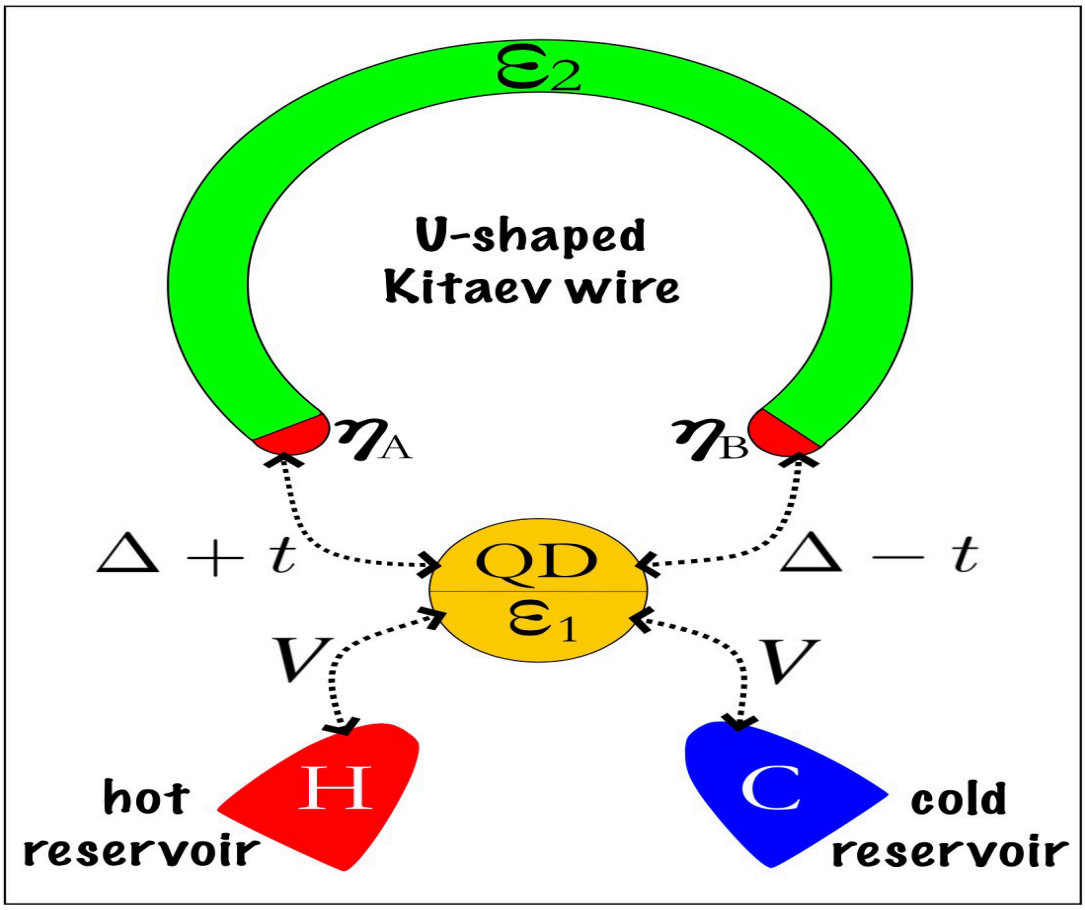

Figura 1.1: Ilustração do dispositivo proposto: Fio de Kitaev em forma de "ferradura" com MFs η_A and η_B conectados por uma amplitude de sobreposição ε_2, os quais são acoplados assimetricamente via $\Delta + t$ e $\Delta - t$ com um QD acoplado simetricamente (V) com os reservatórios quente (H) e frio (C) dados por terminais metálicos. Desviando levemente da condição $t = \Delta$, nomeada de fase de fronteira metálica-supercondutora, o comportamento de sintonizador de calor e eletricidade emerge (sintonizador termoelétrico), dependendo do nível de energia do QD.

de MFs [21]. Nós podemos mencionar que em ambas as situações acima citadas, um QD é encontrado assimetricamente acoplado via amplitudes $\Delta + t$ e $\Delta - t$ com dois MFs separados, de tal forma que propriedades inesperadas emergem apenas modificando ligeiramente tal assimetria dos acoplamentos.

Particularmente, o campo de termoeletricidade tem experiementado um grande desenvolvimento nos últimos anos, devido aos avanços na fabricação de dispositivos nanoscópicos. Novas rotas foram inauguradas explorando propriedades termoelétricas de muitos diferentes sistemas como os de pontos quânticos [22-25], nanofios [26], super-redes [27], dispostivos supercondutor/ferromagnético com ponto quântico [28] e sistemas de Majorana topológicos em uma dimensão [29-32].

Neste trabalho, da mesma maneira que descrita anteriormente e baseado em propostas concretas de detecção termoelétrica dos MFs [29-32], exploramos teoricamente o transporte térmico e elétrico de voltagem zero através de um único QD hibridizado assimetricamente e simetricamente com MFs e contatos metálicos, respectivamente, em que os MFs situam-se nas bordas do fio de Kitaev topológico em forma de "ferradura" como esboçado na Fig.1.1. Encontramos que, os máximos das condutâncias elétrica e térmica deslocam-se apenas variando levemente a assimetria dos acomplamentos entre o QD e o fio de Kitaev. Essa possibilidade de sintonizar o comportamento ressonante, em particular, pode ser percebido unicamente quando essas condutâncias tornam-se sondadas pelo nível de energia do QD. Além disso,

informamos que o “thermopower” junto com a figura de mérito comportam-se de maneira similiar, como esperado devido à violação da Lei de Wiedemann-Franz [33].

Aqui, para explicar nosso efeito de sintonizador termoelétrico, nos beneficiamos da intrigante propriedade anteriormente anunciada sobre a natureza dos MFs: como dois deles distantes um do outro, comportam-se como um único férmion regular, embora delocalizado, demonstramos que a capacidade do comportamento ressonante aqui observado pode ser esclarecido construindo esse férmion não local auxiliar, o qual reflete a característica natural e coletiva entre dois MFs sobrepostos. Isso transforma o sistema em um equivalente onde o par de MFs são emulados por um estado de férmion supercondutor. Neste quadro, os parâmetros Δ e t assumem então respectivamente, o papel da amplitude de pareamento do par de Cooper e o tunelamento entre o QD e tal férmion auxiliar. Desse modo, destacamos que o limite totalmente assimétrico $t \neq \Delta$ é um avanço com respeito as análises anteriores realizadas nas Refs. [30-32], em que apenas a fase de fronteira metálica-supercondutora ($t = \Delta$) foi levada em consideração. Assim, a possibilidade de realizar um sintonizador de calor e eletricidade é realmente viável aqui porque tratamos o regime totalmente assimétrico acima, distinto dos trabalhos anteriores [30-32,34] onde o efeito de sintonizador termoelétrico é totalmente ausente. Desse modo, há a possibilidade de realizar um sintonizador simultâneo de calor e eletricidade, como demonstraremos, operando nas proximidades da fase de fronteira metálica-supercondutora (SC), nomeadamente $\Delta = t$.

Capítulo 2

Fio topológico de Kitaev

Aqui apresentamos uma breve discussão do modelo de Kitaev, o qual descreve um supercondutor 1D do tipo "p" e elétrons sem spin [1]. Como veremos, os férmions de Majorana emergem como quasipartículas nas bordas desse fio e desacoplados do meio. Para tal, o Hamiltoniano é:

$$H = -\mu \sum_x c_x^\dagger c_x - \frac{1}{2} \sum_x \left(t c_x^\dagger c_{x+1} + \triangle e^{i\phi} c_x c_{x+1} + \text{H.c.} \right), \tag{2.1}$$

onde μ é o potencial químico, t é o acoplamento entre vizinhos mais próximos, $\triangle$ é a amplitude de pareamento do par de Cooper e ϕ é a fase.

Os operadores fermiônicos c_x do Hamiltoniano acima podem ser decompostos em termos de dois férmions de Majorana:

$$c_x = \frac{e^{-i\phi/2}}{2} \left(\gamma_{B,x} + i\gamma_{A,x} \right) \tag{2.2}$$

e

$$c_x^\dagger = \frac{e^{i\phi/2}}{2} \left(\gamma_{B,x} - i\gamma_{A,x} \right), \tag{2.3}$$

onde esses férmions de Majorana cumprem

$$\gamma_{\alpha,x} = \gamma_{\alpha,x}^\dagger \tag{2.4}$$

e

$$\{\gamma_{\alpha,x}, \gamma_{\alpha',x'}\} = 2\delta_{\alpha\alpha'}\delta_{xx'}. \tag{2.5}$$

Da Eq. (2.5), temos que

$$\begin{aligned} \gamma_{\alpha,x}\gamma_{\alpha,x} + \gamma_{\alpha,x}\gamma_{\alpha,x} &= 2 \\ 2\gamma_{\alpha,x}\gamma_{\alpha,x} &= 2 \\ \gamma_{\alpha,x}^2 &= 1. \end{aligned} \tag{2.6}$$

Substituindo os operadores c_x e $c_x^\dagger$ na Eq. (2.1):

$$\begin{aligned}
H = &-\mu \sum_x \frac{e^{i\phi/2}}{2} \left(\gamma_{B,x} - i\gamma_{A,x}\right) \frac{e^{-i\phi/2}}{2} \left(\gamma_{B,x} + i\gamma_{A,x}\right) \\
&- \frac{1}{2} \sum_x t \frac{e^{i\phi/2}}{2} \left(\gamma_{B,x} - i\gamma_{A,x}\right) \frac{e^{-i\phi/2}}{2} \left(\gamma_{B,x+1} + i\gamma_{A,x+1}\right) \\
&- \frac{1}{2} \sum_x \Delta e^{i\phi} \frac{e^{-i\phi/2}}{2} \left(\gamma_{B,x} + i\gamma_{A,x}\right) \frac{e^{-i\phi/2}}{2} \left(\gamma_{B,x+1} + i\gamma_{A,x+1}\right) \\
&- \frac{1}{2} \sum_x -t \frac{e^{-i\phi/2}}{2} \left(\gamma_{B,x} + i\gamma_{A,x}\right) \frac{e^{i\phi/2}}{2} \left(\gamma_{B,x+1} - i\gamma_{A,x+1}\right) \\
&+ \frac{1}{2} \sum_x \Delta e^{-i\phi} \frac{e^{i\phi/2}}{2} \left(\gamma_{B,x} - i\gamma_{A,x}\right) \frac{e^{i\phi/2}}{2} \left(\gamma_{B,x+1} - i\gamma_{A,x+1}\right). \qquad (2.7)
\end{aligned}$$

Simplificando,

$$\begin{aligned}
H = &-\frac{\mu}{4} \sum_x \left(\gamma_{B,x}\gamma_{B,x} + i\gamma_{B,x}\gamma_{A,x} - i\gamma_{A,x}\gamma_{B,x} + \gamma_{A,x}\gamma_{A,x}\right) \\
&- \frac{1}{2} \sum_x \frac{t}{4} \left(\gamma_{B,x}\gamma_{B,x+1} + i\gamma_{B,x}\gamma_{A,x+1} - i\gamma_{A,x}\gamma_{B,x+1} + \gamma_{A,x}\gamma_{A,x+1}\right) \\
&- \frac{1}{2} \sum_x \frac{\Delta}{4} \left(\gamma_{B,x}\gamma_{B,x+1} + i\gamma_{B,x}\gamma_{A,x+1} + i\gamma_{A,x}\gamma_{B,x+1} - \gamma_{A,x}\gamma_{A,x+1}\right) \\
&+ \frac{1}{2} \sum_x \frac{t}{4} \left(\gamma_{B,x}\gamma_{B,x+1} - i\gamma_{B,x}\gamma_{A,x+1} + i\gamma_{A,x}\gamma_{B,x+1} + \gamma_{A,x}\gamma_{A,x+1}\right) \\
&+ \frac{1}{2} \sum_x \frac{\Delta}{4} \left(\gamma_{B,x}\gamma_{B,x+1} - i\gamma_{B,x}\gamma_{A,x+1} - i\gamma_{A,x}\gamma_{B,x+1} - \gamma_{A,x}\gamma_{A,x+1}\right), \qquad (2.8)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
H = &-\frac{\mu}{4} \sum_x \left(\gamma_{B,x}\gamma_{B,x} + \gamma_{A,x}\gamma_{A,x} + i\gamma_{B,x}\gamma_{A,x} - i\gamma_{A,x}\gamma_{B,x}\right) \\
&- \frac{1}{2} \sum_x \frac{t}{4} \left(i\gamma_{B,x}\gamma_{A,x+1} - i\gamma_{A,x}\gamma_{B,x+1} + i\gamma_{B,x}\gamma_{A,x+1} - i\gamma_{A,x}\gamma_{B,x+1}\right) \\
&- \frac{1}{2} \sum_x \frac{\Delta}{4} \left(i\gamma_{B,x}\gamma_{A,x+1} + i\gamma_{A,x}\gamma_{B,x+1} + i\gamma_{B,x}\gamma_{A,x+1} + i\gamma_{A,x}\gamma_{B,x+1}\right). \qquad (2.9)
\end{aligned}$$

Utilizando as relações $\{\gamma_{A,x}, \gamma_{B,x}\} = 0$, $\gamma_{\alpha,x}^2 = 1$,

$$\begin{aligned}
H = &-\frac{\mu}{4} \sum_{x=1}^{N} \left(1 + 1 + i\gamma_{B,x}\gamma_{A,x} + i\gamma_{B,x}\gamma_{A,x}\right) \\
&- \frac{1}{2} \sum_{x=1}^{N-1} \left[\frac{t}{4} \left(2i\gamma_{B,x}\gamma_{A,x+1} - 2i\gamma_{A,x}\gamma_{B,x+1}\right)\right] \\
&- \frac{1}{2} \sum_{x=1}^{N-1} \left[\frac{\Delta}{4} \left(2i\gamma_{B,x}\gamma_{A,x+1} + 2i\gamma_{A,x}\gamma_{B,x+1}\right)\right]. \qquad (2.10)
\end{aligned}$$

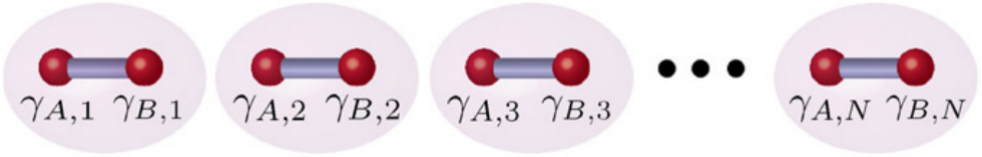

Figura 2.1: Ilustração da fase trivial [1]. As bolinhas avermelhadas simbolizam os férmions de Majorana, enquanto que as barras roxas os acoplamentos entre eles dentro das elipses de cor lilás representando os sítios do fio. Nesse caso não há acoplamentos entre os vizinhos mais próximos t = 0.

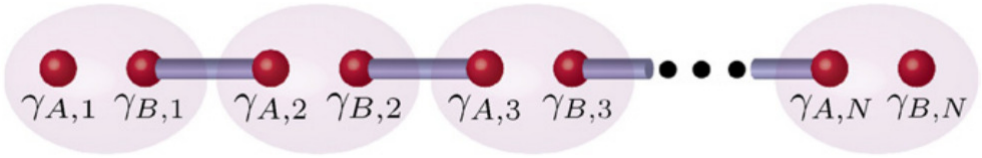

Figura 2.2: Ilustração da fase topológica [1]. As bolinhas avermelhadas simbolizam os férmions de Majorana, enquanto que as barras roxas os acoplamentos entre eles dentro das elipses de cor lilás representando os sítios do fio.

$$\begin{aligned} H = & -\frac{\mu}{4}\sum_{x=1}^{N}(2+2i\gamma_{B,x}\gamma_{A,x}) \\ & -\frac{i}{2}\sum_{x=1}^{N-1}\left[\frac{t}{2}\left(\gamma_{B,x}\gamma_{A,x+1}-\gamma_{A,x}\gamma_{B,x+1}\right)\right] \\ & -\frac{i}{2}\sum_{x=1}^{N-1}\left[\frac{\Delta}{2}\left(\gamma_{B,x}\gamma_{A,x+1}+\gamma_{A,x}\gamma_{B,x+1}\right)\right]. \end{aligned} \tag{2.11}$$

Ao final, o Hamiltoniano de Kitaev na base dos operadores de Majorana, torna-se:

$$H = -\frac{\mu}{2}\sum_{x=1}^{N}(1+i\gamma_{B,x}\gamma_{A,x}) - \frac{i}{4}\sum_{x=1}^{N-1}\left[(\Delta+t)\,\gamma_{B,x}\gamma_{A,x+1}+(\Delta-t)\,\gamma_{A,x}\gamma_{B,x+1}\right]. \tag{2.12}$$

2.1 Fase trivial

Esta fase corresponde ao conjunto de parâmetros $\mu \neq 0$ e $t = \Delta = 0$ e é chamada de trivial. Nela, o segundo termo da Eq. (2.12) se cancela e somente a conexão entre os Majoranas $\gamma_{A,x}$ e $\gamma_{B,x}$ do mesmo sítio continua presente. Desse modo, o Hamiltoniano fica:

$$H = -\frac{\mu}{2}\sum_{x=1}^{N}(1+i\gamma_{B,x}\gamma_{A,x}). \tag{2.13}$$

A figura 2.1 é uma representação esquemática para esta situação descrita.

2.2 Fase topológica

A segunda situação, a mais importante, é obtida tomando-se o limite $\mu = 0$ e $t = \Delta \neq 0$, a qual culmina na fase topológica. Na Eq. (2.12), o primeiro termo se anula, juntamente com parte do segundo:

$$H = -i\frac{t}{2}\sum_{x=1}^{N-1}\gamma_{B,x}\gamma_{A,x+1}, \tag{2.14}$$

onde estão conectados somente os Majoranas de sítios vizinhos, ou seja, $\gamma_{B,x}$ e $\gamma_{A,x+1}$. A característica que merece destaque é o fato de Majoranas isolados existirem nas bordas do fio, ou seja, $\gamma_{A,1}$ e $\gamma_{B,N}$. É por causa desse desacoplamento com a vizinhança, que a Física Experimental vem perseguindo a realização dessas quasipartículas isoladas, pois aposta-se na construção de *qubits* blindados à decoerência, uma vez que os Majoranas topológicos não sentem o meio onde surgem (figura 2.2).

Capítulo 3

Hamiltoniano de Anderson e Funções de Green

3.1 Hamiltoniano de Anderson

Nesta seção, damos uma introdução ao Hamiltoniano de Anderson [35], pois é ele que dá origem ao modelo desta presente dissertação. P.W. Anderson assumiu uma impureza como um estado localizado, onde apenas os orbitais externos se sobrepõem aos elétrons itinerantes do hospedeiro. O modelo também considera que a energia de repulsão de Coulomb é apenas devido à elétrons de spins contrários situados na impureza.

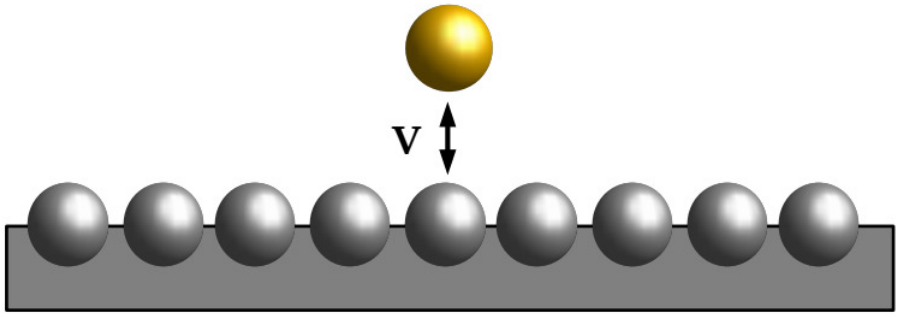

Figura 3.1: Ilustração do Hamiltoniano de Anderson [35]. O acoplamento é $\mathcal{V}$ entre a impureza e o hospedeiro.

A figura (3.1) resume o Hamiltoniano:

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_{hosp} + \mathcal{H}_{imp} + \mathcal{H}_{hib}. \tag{3.1}$$

O primeiro termo é para a banda de condução do hospedeiro e descreve um banho de elétrons livres com

energia $\varepsilon_{\mathbf{k}}$ e número de onda $\mathbf{k}$:

$$\mathcal{H}_{hosp} = \sum_{\mathbf{k}\sigma} \varepsilon_{\mathbf{k}} c^{\dagger}_{\mathbf{k}\sigma} c_{\mathbf{k}\sigma}, \tag{3.2}$$

onde $c^{\dagger}_{\mathbf{k}\sigma}(c_{\mathbf{k}\sigma})$ cria (aniquila) um elétron com spin σ e número de onda $\mathbf{k}$. A impureza é um estado degenerado com energia ε_d, o qual pode ser preenchido por dois elétrons de spins opostos que se repelem pela energia de Coulomb U,

$$\mathcal{H}_{imp} = \sum_{\sigma} \varepsilon_{d\sigma} d^{\dagger}_{\sigma} d_{\sigma} + U d^{\dagger}_{\uparrow} d_{\uparrow} d^{\dagger}_{\downarrow} d_{\downarrow}. \tag{3.3}$$

A última parcela do modelo da equação [3.1] descreve o acoplamento dado pela amplitude $\mathcal{V}$ dos elétrons do hospedeiro com a impureza,

$$\mathcal{H}_{hib} = \sum_{\mathbf{k}\sigma} \mathcal{V} \left(c^{\dagger}_{\mathbf{k}\sigma} d_{\sigma} + d^{\dagger}_{\sigma} c_{\mathbf{k}\sigma} \right) \tag{3.4}$$

3.2 Funções de Green em Física do Estado Sólido

Tradicionalmente, as funções de Green (FGs) são ferramentas para a resolução de equações diferenciais, mas aqui as usaremos para solucionar um problema de Física do Estado Sólido [36] em notação de segunda quantização.

Começamos definindo as funções de Green retardada e avançada para uma partícula:

$$\mathcal{G}^{\mathcal{R}}(\mathbf{r},\tau;\mathbf{r}',\tau') = -\frac{i}{\hbar}\theta(\tau-\tau') \left\langle \left[\Psi(\mathbf{r},\tau), \Psi^{\dagger}(\mathbf{r}',\tau')\right]_{+} \right\rangle, \tag{3.5}$$

$$\mathcal{G}^{\mathcal{A}}(\mathbf{r},\tau;\mathbf{r}',\tau') = \frac{i}{\hbar}\theta(\tau'-\tau) \left\langle \left[\Psi(\mathbf{r},\tau), \Psi^{\dagger}(\mathbf{r}',\tau')\right]_{+} \right\rangle, \tag{3.6}$$

onde $\theta(\tau-\tau')$ é a função degrau, $[...]_+$ é o anticomutador e $\langle ... \rangle$ determina uma média termodinâmica, a qual é:

$$\left\langle \left[\Psi(\mathbf{r}',\tau'), \Psi^{\dagger}(\mathbf{r},\tau)\right]_{+} \right\rangle = \frac{1}{Z} \mathrm{Tr} \left\{ e^{-\beta H} \left[\Psi(\mathbf{r}',\tau'), \Psi^{\dagger}(\mathbf{r},\tau)\right]_{+} \right\}, \tag{3.7}$$

em que a função partição é $Z = \mathrm{Tr}\left\{e^{-\beta H}\right\}$, H é o Hamiltoniano, Tr representa o traço e $\beta = \frac{1}{k_B T}$.

Tomemos um estado $|n>$ que é do Hamiltoniano ($H|n>= E_n|n>$), assim:

$$\mathcal{G}^{\mathcal{R}}(\mathbf{r},\tau;\mathbf{r}',\tau') = -\frac{i}{\hbar}\theta(\tau-\tau') \sum_{n} \frac{1}{Z} e^{-\beta E_n} < n| \left[\Psi(\mathbf{r},\tau), \Psi^{\dagger}(\mathbf{r}',\tau')\right]_{+} |n>, \tag{3.8}$$

$$\mathcal{G}^{\mathcal{A}}(\mathbf{r},\tau;\mathbf{r}',\tau') = \frac{i}{\hbar}\theta(\tau'-\tau)\sum_n \frac{1}{Z}e^{-\beta E_n} < n|\left[\Psi(\mathbf{r},\tau),\Psi^{\dagger}(\mathbf{r}',\tau')\right]_+|n>, \tag{3.9}$$

com

$$\mathcal{G}^{\mathcal{R}}(\mathbf{r},\tau;\mathbf{r}',\tau') = \left[\mathcal{G}^{\mathcal{A}}(\mathbf{r},\tau;\mathbf{r}',\tau')\right]^{\dagger}. \tag{3.10}$$

A FG é dada na variável tempo, mas aplicaremos a transformada de Fourier para obtermos a FG no espaço das energias, pois é nesse espaço que investigaremos as propriedades termoelétricas que serão discutidas no capítulo 5. Para esse fim, usaremos o método da equação do movimento (EOM) [36] descrito logo abaixo. A FG retardada com dois operadores fermiônicos $\hat{A}$ e $\hat{B}$ na notação de Heisenberg é:

$$\mathcal{G}^{\mathcal{R}}_{\mathcal{AB}}(\tau,0) = -\frac{i}{\hbar}\theta(\tau-0)\left\langle\left[\hat{A}(\tau),\hat{B}^{\dagger}(0)\right]_+\right\rangle. \tag{3.11}$$

Fazendo Fourier:

$$\begin{aligned}\tilde{\mathcal{G}}^{\mathcal{R}}_{\mathcal{AB}}(\varepsilon) &= \frac{i\hbar}{(\varepsilon+i\eta)}\int_{-\infty}^{\infty}d\tau\frac{\partial}{\partial\tau}\left\{-\frac{i}{\hbar}\theta(\tau-0)\left\langle\left[\hat{A}(\tau),\hat{B}^{\dagger}(0)\right]_+\right\rangle\right\}e^{\frac{i}{\hbar}(\varepsilon+i\eta)\tau}\\ &= \frac{1}{(\varepsilon+i\eta)}\int_{-\infty}^{\infty}d\tau\frac{\partial}{\partial\tau}\left\{\theta(\tau-0)\left\langle\left[\hat{A}(\tau),\hat{B}^{\dagger}(0)\right]_+\right\rangle\right\}e^{\frac{i}{\hbar}(\varepsilon+i\eta)\tau},\end{aligned} \tag{3.12}$$

onde o infinitesimal é $\eta\to 0^+$. Avaliando a derivada no tempo,

$$\begin{aligned}\tilde{\mathcal{G}}^{\mathcal{R}}_{\mathcal{AB}}(\varepsilon) &= \frac{1}{(\varepsilon+i\eta)}\int_{-\infty}^{\infty}d\tau\frac{\partial}{\partial\tau}\theta(\tau-0)\left\{\left\langle\left[\hat{A}(\tau),\hat{B}^{\dagger}(0)\right]_+\right\rangle\right\}e^{\frac{i}{\hbar}(\varepsilon+i\eta)\tau}\\ &+ \int_{-\infty}^{\infty}d\tau\left\{\theta(\tau-0)\left\langle\left[\frac{\partial}{\partial\tau}\hat{A}(\tau),\hat{B}^{\dagger}(0)\right]_+\right\rangle\right\}e^{\frac{i}{\hbar}(\varepsilon+i\eta)\tau}.\end{aligned} \tag{3.13}$$

Assim sendo,

$$\begin{aligned}\tilde{\mathcal{G}}^{\mathcal{R}}_{\mathcal{AB}}(\varepsilon) &= \frac{1}{(\varepsilon+i\eta)}\int_{-\infty}^{\infty}d\tau\delta(\tau-0)\left\{\left\langle\left[\hat{A}(\tau),\hat{B}^{\dagger}(0)\right]_+\right\rangle\right\}e^{\frac{i}{\hbar}(\varepsilon+i\eta)\tau}\\ &+ \frac{1}{(\varepsilon+i\eta)}\int_{-\infty}^{\infty}d\tau\left\{\theta(\tau-0)\left\langle\left[\frac{i}{\hbar}\left[H,\hat{A}\right],\hat{B}^{\dagger}(0)\right]_+\right\rangle\right\}e^{\frac{i}{\hbar}(\varepsilon+i\eta)\tau},\end{aligned} \tag{3.14}$$

achamos:

$$\begin{aligned}\tilde{\mathcal{G}}^{\mathcal{R}}_{\mathcal{AB}}(\varepsilon) &= \frac{1}{(\varepsilon+i\eta)}\left\langle\left[\hat{A}(0),\hat{B}^{\dagger}(0)\right]_+\right\rangle\\ &+ \frac{1}{(\varepsilon+i\eta)}\int_{-\infty}^{\infty}d\tau\left\{-\frac{i}{\hbar}\theta(\tau-0)\left\langle\left[\frac{i}{\hbar}\left[H,\hat{A}\right],\hat{B}^{\dagger}(0)\right]_+\right\rangle\right\}e^{\frac{i}{\hbar}(\varepsilon+i\eta)\tau}\end{aligned} \tag{3.15}$$

e reconhecendo a FG $\tilde{\mathcal{G}}^{\mathcal{R}}_{[\mathcal{H},\mathcal{A}]\mathcal{B}}(\varepsilon)$, finalmente obtemos:

$$(\varepsilon+i\eta)\tilde{\mathcal{G}}^{\mathcal{R}}_{\mathcal{AB}}(\varepsilon) = \left\langle\left[\hat{A},\hat{B}^{\dagger}\right]_+\right\rangle + \tilde{\mathcal{G}}^{\mathcal{R}}_{[\mathcal{H},\mathcal{A}]\mathcal{B}}(\varepsilon). \tag{3.16}$$

Capítulo 4

Função de Green de Quantum Dots (QDs) na fase $t = \Delta$

4.1 Sistema de dois QDs

Neste capítulo objetivamos a reprodução parcial do resultado da Ref.[34], ou seja, a FG de um QD acoplado a terminais metálicos e um fio de Kitaev na fase topológica (modelo efetivo), que corresponde ao que chamamos aqui de fase de fronteira metálica-supercondutora $t = \Delta$. De início, o ponto de partida por razões técnicas, é o seguinte modelo Hamiltoniano para dois QDs:

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_e &= \sum_k \varepsilon_k c_{ek}^\dagger c_{ek} + \sum_{jk} \sqrt{\frac{2}{\mathcal{N}}} V \left(c_{ek}^\dagger d_j + \text{H.c..} \right) + \sum_j \varepsilon_j d_j^\dagger d_j + \sum_{kq} \frac{V_{BT}}{\mathcal{N}} c_{ek}^\dagger c_{eq} \\ &+ i\epsilon_M \eta_1 \eta_2 + \lambda \left(d_1 - d_1^\dagger \right) \eta_1, \end{aligned} \tag{4.1}$$

Vamos a partir daqui encontrar as FGs $\tilde{\mathcal{G}}_{d_j d_j}(\varepsilon)$ e $\tilde{\mathcal{G}}_{d_j d_{\tilde{j}}}(\varepsilon)$, utilizando para esse fim a representação dos Majoranas:

$$\eta_1 = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(f^\dagger + f \right) \tag{4.2}$$

e

$$\eta_2 = i \frac{1}{\sqrt{2}} \left(f^\dagger - f \right). \tag{4.3}$$

Assim temos:

$$
\begin{aligned}
i\epsilon_M \eta_1 \eta_2 &= -\epsilon_M \frac{1}{2}\left(f^\dagger f^\dagger - f^\dagger f + f f^\dagger - f f\right) \\
&= -\epsilon_M \frac{1}{2}\left(-f^\dagger f + f f^\dagger\right) \\
&= -\epsilon_M \frac{1}{2}\left(-f^\dagger f + 1 - f^\dagger f\right) \\
&= \epsilon_M \left(f^\dagger f - \frac{1}{2}\right), \qquad (4.4)
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
\lambda\left(d_1 - d_1^\dagger\right)\eta_1 &= \frac{\lambda}{\sqrt{2}}\left(d_1 - d_1^\dagger\right)\left(f^\dagger + f\right) \\
&= \frac{\lambda}{\sqrt{2}}\left(d_1 f^\dagger + d_1 f - d_1^\dagger f^\dagger - d_1^\dagger f\right) \qquad (4.5)
\end{aligned}
$$

e

$$
\begin{aligned}
\mathcal{H}_e &= \sum_k \varepsilon_k c_{ek}^\dagger c_{ek} + \sum_{jk} \sqrt{\frac{2}{\mathcal{N}}} V\left(c_{ek}^\dagger d_j + H.c.\right) + \sum_j \varepsilon_j d_j^\dagger d_j + \sum_{kq} \frac{V_{BT}}{\mathcal{N}} c_{ek}^\dagger c_{eq} \\
&+ \epsilon_M \left(f^\dagger f - \frac{1}{2}\right) + \frac{\lambda}{\sqrt{2}}\left(d_1 f^\dagger + d_1 f - d_1^\dagger f^\dagger - d_1^\dagger f\right). \qquad (4.6)
\end{aligned}
$$

Agora nós consideramos a FG

$$
\mathcal{G}_{d_j d_j}(t) = -\frac{i}{\hbar}\theta(t)\,\mathcal{Z}_e^{-1}\sum_n e^{-\beta E_n}\left\langle n\right|\left[d_j(t), d_j^\dagger(0)\right]_+\left|n\right\rangle \qquad (4.7)
$$

e

$$
\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial t}\mathcal{G}_{d_j d_j}(t) &= -\frac{i}{\hbar}\delta(t)\,\mathcal{Z}_e^{-1}\sum_n e^{-\beta E_n}\left\langle n\right|\left[d_j(t), d_j^\dagger(0)\right]_+\left|n\right\rangle \\
&+ \left(-\frac{i}{\hbar}\right)\theta(t)\,\mathcal{Z}_e^{-1}\sum_n e^{-\beta E_n}\left\langle n\right|\left[\frac{\partial}{\partial t} d_j(t), d_j^\dagger(0)\right]_+\left|n\right\rangle. \qquad (4.8)
\end{aligned}
$$

Agora substituimos a relação

$$
\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial t} d_j(t) &= -\frac{i}{\hbar}\left[d_j, \mathcal{H}_e\right] = -\frac{i}{\hbar}\left\{\varepsilon_j d_j(t) + \sqrt{\frac{2}{\mathcal{N}}} V \sum_k c_k(t)\right\} \qquad (4.9) \\
&+ \left(-\frac{i}{\hbar}\right)\left(-\delta_{j1}\right)\lambda\eta_1(t)
\end{aligned}
$$

na Eq. (4.8), onde consideramos

$$\begin{aligned}\left[d_j, \frac{\lambda}{\sqrt{2}}\left(d_1 f^\dagger + d_1 f - d_1^\dagger f^\dagger - d_1^\dagger f\right)\right] &= \frac{\lambda}{\sqrt{2}}\left[d_j, \left(d_1 f^\dagger + d_1 f - d_1^\dagger f^\dagger - d_1^\dagger f\right)\right] \\ &= \frac{\lambda}{\sqrt{2}}\left(d_j d_1 f^\dagger + d_j d_1 f - d_j d_1^\dagger f^\dagger - d_j d_1^\dagger f\right) \\ &- \frac{\lambda}{\sqrt{2}}\left(d_1 f^\dagger d_j + d_1 f d_j - d_1^\dagger f^\dagger d_j - d_1^\dagger f d_j\right)\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}d_j d_1 f^\dagger + d_j d_1 f - d_j d_1^\dagger f^\dagger - d_j d_1^\dagger f - d_1 f^\dagger d_j - d_1 f d_j + d_1^\dagger f^\dagger d_j + d_1^\dagger f d_j \\ = -d_j d_1^\dagger f^\dagger - d_j d_1^\dagger f + d_1^\dagger f^\dagger d_j + d_1^\dagger f d_j \\ = -d_j d_1^\dagger f^\dagger + d_1^\dagger f^\dagger d_j - d_j d_1^\dagger f + d_1^\dagger f d_j \\ = -d_j d_1^\dagger f^\dagger - d_1^\dagger d_j f^\dagger - d_j d_1^\dagger f - d_1^\dagger d_j f \\ = -\left(d_j d_1^\dagger + d_1^\dagger d_j\right) f - \left(d_j d_1^\dagger + d_1^\dagger d_j\right) f^\dagger \\ = -\delta_{j1}\left(f^\dagger + f\right), \end{aligned} \tag{4.10}$$

$$\begin{aligned}\left[d_j, \sum_{\tilde{j}k}\sqrt{\frac{2}{\mathcal{N}}} V c_k^\dagger d_{\tilde{j}}\right] &+ \left[d_{j\sigma}, \sum_{\tilde{j}k}\sqrt{\frac{2}{\mathcal{N}}} V d_{\tilde{j}}^\dagger c_k\right] \\ = \sum_{\tilde{j}k}\sqrt{\frac{2}{\mathcal{N}}} V &\times \left(d_j c_k^\dagger d_{\tilde{j}} - c_k^\dagger d_{\tilde{j}} d_j\right) \\ + \sum_{\tilde{j}k}\sqrt{\frac{2}{\mathcal{N}}} V &\times \left(d_j d_{\tilde{j}}^\dagger c_k - d_{\tilde{j}}^\dagger c_k d_j\right) \\ = \sum_{\tilde{j}k}\sqrt{\frac{2}{\mathcal{N}}} V &\times \left(c_k^\dagger d_{\tilde{j}} d_j - c_k^\dagger d_{\tilde{j}} d_j\right) \\ + \sum_{\tilde{j}k}\sqrt{\frac{2}{\mathcal{N}}} V &\times \left(\delta_{j\tilde{j}} c_k - d_{\tilde{j}}^\dagger d_{j\sigma} c_k - d_{\tilde{j}}^\dagger c_k d_j\right) \\ = \sum_{\tilde{j}k}\sqrt{\frac{2}{\mathcal{N}}} V &\times \left(\delta_{j\tilde{j}} c_k - d_{\tilde{j}}^\dagger d_j c_k + d_{\tilde{j}}^\dagger d_j c_k\right) \\ &= \sum_k \sqrt{\frac{2}{\mathcal{N}}} V c_k \end{aligned} \tag{4.11}$$

e

$$\begin{aligned}
\left[d_j, \sum_{\tilde{j}} \varepsilon_{\tilde{j}} d_{\tilde{j}}^{\dagger} d_{\tilde{j}}\right] &= \sum_{\tilde{j}} \varepsilon_{\tilde{j}} \left[d_j, d_{\tilde{j}}^{\dagger} d_{\tilde{j}}\right] \\
&= \sum_{\tilde{j}} \varepsilon_{\tilde{j}} \left(d_j d_{\tilde{j}}^{\dagger} d_{\tilde{j}} - d_{\tilde{j}}^{\dagger} d_{\tilde{j}} d_j\right) \\
&= \sum_{\tilde{j}} \varepsilon_{\tilde{j}} \left(\delta_{j\tilde{j}} d_{\tilde{j}} - d_{\tilde{j}}^{\dagger} d_j d_{\tilde{j}} - d_{\tilde{j}}^{\dagger} d_{\tilde{j}} d_j\right) \\
&= \sum_{\tilde{j}} \varepsilon_{\tilde{j}} \left(\delta_{j\tilde{j}} d_{\tilde{j}} - d_{\tilde{j}}^{\dagger} d_j d_{\tilde{j}} - d_{\tilde{j}}^{\dagger} d_{\tilde{j}} d_j\right) \\
&= \sum_{\tilde{j}} \varepsilon_{\tilde{j}} \left(\delta_{j\tilde{j}} d_{\tilde{j}} + d_{\tilde{j}}^{\dagger} d_{\tilde{j}} d_j - d_{\tilde{j}}^{\dagger} d_{\tilde{j}} d_j\right) \\
&= \varepsilon_j d_j, \qquad (4.12)
\end{aligned}$$

de modo que,

$$\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial t}\mathcal{G}_{d_j d_j}(t) = &\left(-\frac{i}{\hbar}\right)\delta(t)\,\mathcal{Z}_e^{-1}\sum_n e^{-\beta E_n}\langle n|\left[d_j(t), d_j^{\dagger}(0)\right]_+|n\rangle \\
&+\left(-\frac{i}{\hbar}\right)\varepsilon_j\left\{-\frac{i}{\hbar}\theta(t)\,\mathcal{Z}_e^{-1}\sum_n e^{-\beta E_n}\langle n|\left[d_j(t), d_j^{\dagger}(0)\right]_+|n\rangle\right\} \\
&+\left(-\frac{i}{\hbar}\right)\sqrt{2}V\left\{-\frac{i}{\hbar}\theta(t)\,\mathcal{Z}_e^{-1}\sum_n e^{-\beta E_n}\langle n|\left[\frac{1}{\sqrt{\mathcal{N}}}\sum_k c_k(t), d_j^{\dagger}(0)\right]_+|n\rangle\right\} \\
&+\left(-\frac{i}{\hbar}\right)(-\delta_{j1})\,\lambda\left\{-\frac{i}{\hbar}\theta(t)\,\mathcal{Z}_e^{-1}\sum_n e^{-\beta E_n}\langle n|\left[\eta_1(t), d_j^{\dagger}(0)\right]_+|n\rangle\right\}. \qquad (4.13)
\end{aligned}$$

Levando em conta

$$\mathcal{G}_{\eta_1,d_j}(t) = -\frac{i}{\hbar}\theta(t)\,\mathcal{Z}_e^{-1}\sum_n e^{-\beta E_n}\langle n|\left[\eta_1(t), d_j^{\dagger}(0)\right]_+|n\rangle \qquad (4.14)$$

na Eq. (4.13), encontramos

$$\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial t}\mathcal{G}_{d_j d_j}(t) = &\left(-\frac{i}{\hbar}\right)\delta(t)\,\mathcal{Z}_e^{-1}\sum_n e^{-\beta E_n}\langle n|\left[d_j(t), d_j^{\dagger}(0)\right]_+|n\rangle - \frac{i}{\hbar}\varepsilon_j\mathcal{G}_{d_j d_j}(t) \\
&+\left(-\frac{i}{\hbar}\right)\sqrt{2}V\mathcal{G}_{f_e d_j}(t) - \frac{i}{\hbar}(-\delta_{j1})\,\lambda\mathcal{G}_{\eta_1,d_j}(t). \qquad (4.15)
\end{aligned}$$

Em coordenadas de energia, a Eq. (4.15) torna-se

$$(\varepsilon + i\eta)\,\tilde{\mathcal{G}}_{d_j d_j}(\varepsilon) = 1 + \varepsilon_j\tilde{\mathcal{G}}_{d_j d_j}(\varepsilon) + \sqrt{2}V\tilde{\mathcal{G}}_{f_e d_j}(\varepsilon) - \delta_{j1}\lambda\tilde{\mathcal{G}}_{\eta_1,d_j}(\varepsilon). \qquad (4.16)$$

Adicionalmente,

$$(\varepsilon - \varepsilon_j + i\eta)\,\tilde{\mathcal{G}}_{d_j d_j}(\varepsilon) = 1 - \frac{\Gamma}{1 + iV_{BT}\pi\rho_0} i \sum_l \tilde{\mathcal{G}}_{d_j d_l}(\varepsilon) - \delta_{j1}\lambda\tilde{\mathcal{G}}_{\eta_1, d_j}(\varepsilon)\,. \tag{4.17}$$

Usando

$$-\frac{\Gamma}{1 + iV_{BT}\pi\rho_0} i = -i\frac{\Gamma\left[1 - iV_{BT}\pi\rho_0\right]}{1 + \left(V_{BT}\pi\rho_0\right)^2} = -\frac{\Gamma}{1 + \left(V_{BT}\pi\rho_0\right)^2} i - \frac{\Gamma\left(V_{BT}\pi\rho_0\right)}{1 + \left(V_{BT}\pi\rho_0\right)^2} = \tilde{\sum}^R + i\tilde{\sum}^I \tag{4.18}$$

na Eq. (4.17) com

$$\tilde{\sum}^I = -\tilde{\Gamma} = -\frac{\Gamma}{1 + \left(V_{LR}\pi\rho_0\right)^2} \tag{4.19}$$

e

$$\tilde{\sum}^R = -\frac{\Gamma\left(V_{BT}\pi\rho_0\right)}{1 + \left(V_{BT}\pi\rho_0\right)^2} \tag{4.20}$$

mostramos que

$$\left(\varepsilon - \tilde{\varepsilon}_j + i\tilde{\Gamma}\right)\tilde{\mathcal{G}}_{d_j d_j}(\varepsilon) = 1 + \left(\tilde{\sum}^R + i\tilde{\sum}^I\right)\sum_{l \neq j}\tilde{\mathcal{G}}_{d_j d_l}(\varepsilon) - \delta_{j1}\lambda\tilde{\mathcal{G}}_{\eta_1, d_j}(\varepsilon)\,, \tag{4.21}$$

onde

$$\tilde{\varepsilon}_j = \varepsilon_j + \tilde{\sum}^R \tag{4.22}$$

é o nível renormalizado da energia para o QD. Repetimos a EOM para a FG

$$\mathcal{G}_{\eta_1, d_j}(t) = -\frac{i}{\hbar}\theta(t)\,\mathcal{Z}_e^{-1}\sum_n e^{-\beta E_n}\left\langle n\right|\left[\eta_1(t), d_j^\dagger(0)\right]_+\left|n\right\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\mathcal{G}_{f, d_j}(t) + \frac{1}{\sqrt{2}}\mathcal{G}_{f^+, d_j}(t)\,, \tag{4.23}$$

com

$$\mathcal{G}_{f, d_j}(t) = -\frac{i}{\hbar}\theta(t)\,\mathcal{Z}_e^{-1}\sum_n e^{-\beta E_n}\left\langle n\right|\left[f(t), d_j^\dagger(0)\right]_+\left|n\right\rangle \tag{4.24}$$

e

$$\mathcal{G}_{f^+, d_j}(t) = -\frac{i}{\hbar}\theta(t)\,\mathcal{Z}_e^{-1}\sum_n e^{-\beta E_n}\left\langle n\right|\left[f^\dagger(t), d_j^\dagger(0)\right]_+\left|n\right\rangle \tag{4.25}$$

para obter $\tilde{\mathcal{G}}_{\eta_1, d_j}(\varepsilon)$. Em coordenadas de energia, a Eq. (4.23) se reduz a

$$\tilde{\mathcal{G}}_{\eta_1,d_j}(\varepsilon)=\frac{1}{\sqrt{2}}\tilde{\mathcal{G}}_{f,d_j}(\varepsilon)+\frac{1}{\sqrt{2}}\tilde{\mathcal{G}}_{f^+,d_j}(\varepsilon). \tag{4.26}$$

Primeiro nós consideramos

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial t}\mathcal{G}_{f,d_j}(t)=&-\frac{i}{\hbar}\delta(t)\,\mathcal{Z}_e^{-1}\sum_n e^{-\beta E_n}\langle n|\left[f(t),d_j^\dagger(0)\right]_+|n\rangle\\&+\left(-\frac{i}{\hbar}\right)\theta(t)\,\mathcal{Z}_e^{-1}\sum_n e^{-\beta E_n}\langle n|\left[\frac{\partial}{\partial t}f(t),d_j^\dagger(0)\right]_+|n\rangle\end{aligned} \tag{4.27}$$

e

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial t}f(t) &= -\frac{i}{\hbar}[f,\mathcal{H}_e]=-\frac{i}{\hbar}\left[f,\epsilon_M\left(f^\dagger f-\frac{1}{2}\right)\right]-\frac{i}{\hbar}\left[f,\frac{\lambda}{\sqrt{2}}\left(d_1f^\dagger+d_1f-d_1^\dagger f^\dagger-d_1^\dagger f\right)\right]\\
&= -\frac{i}{\hbar}\epsilon_M\left(ff^\dagger f-f^\dagger ff\right)-\frac{i}{\hbar}\frac{\lambda}{\sqrt{2}}\left\{fd_1f^\dagger+fd_1f-fd_1^\dagger f^\dagger-fd_1^\dagger f-d_1f^\dagger f-d_1ff+d_1^\dagger f^\dagger f+d_1^\dagger ff\right\}\\
&= -\frac{i}{\hbar}\epsilon_M\left(f-f^\dagger ff-f^\dagger ff\right)-\frac{i}{\hbar}\frac{\lambda}{\sqrt{2}}\left\{fd_1f^\dagger-fd_1^\dagger f^\dagger-d_1f^\dagger f+d_1^\dagger f^\dagger f\right\}\\
&= -\frac{i}{\hbar}\epsilon_M\left(f+f^\dagger ff-f^\dagger ff\right)-\frac{i}{\hbar}\frac{\lambda}{\sqrt{2}}\left\{fd_1f^\dagger-d_1f^\dagger f+d_1^\dagger f^\dagger f-fd_1^\dagger f^\dagger\right\}\\
&= -\frac{i}{\hbar}\epsilon_M f-\frac{i}{\hbar}\frac{\lambda}{\sqrt{2}}\left\{fd_1f^\dagger-d_1f^\dagger f+d_1^\dagger f^\dagger f+d_1^\dagger ff^\dagger\right\}\\
&= -\frac{i}{\hbar}\epsilon_M f-\frac{i}{\hbar}\frac{\lambda}{\sqrt{2}}\left\{-d_1\left(ff^\dagger+f^\dagger f\right)+d_1^\dagger\left(ff^\dagger+f^\dagger f\right)\right\}\\
&= -\frac{i}{\hbar}\epsilon_M f-\frac{i}{\hbar}\frac{\lambda}{\sqrt{2}}\left\{d_1^\dagger-d_1\right\},\end{aligned} \tag{4.28}$$

que conduz a

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial t}\mathcal{G}_{f,d_j}(t)=&-\frac{i}{\hbar}\delta(t)\,\mathcal{Z}_e^{-1}\sum_n e^{-\beta E_n}\langle n|\left[f(t),d_j^\dagger(0)\right]_+|n\rangle-\frac{i}{\hbar}\epsilon_M\left\{-\frac{i}{\hbar}\theta(t)\,\mathcal{Z}_e^{-1}\sum_n e^{-\beta E_n}\langle n|\left[f(t),d_j^\dagger(0)\right]_+|n\rangle\right\}\\
&-\frac{i}{\hbar}\frac{\lambda}{\sqrt{2}}(-1)\left\{-\frac{i}{\hbar}\theta(t)\,\mathcal{Z}_e^{-1}\sum_n e^{-\beta E_n}\langle n|\left[d_1(t),d_j^\dagger(0)\right]_+|n\rangle\right\}\\
&-\frac{i}{\hbar}\frac{\lambda}{\sqrt{2}}\left\{-\frac{i}{\hbar}\theta(t)\,\mathcal{Z}_e^{-1}\sum_n e^{-\beta E_n}\langle n|\left[d_1^\dagger(t),d_j^\dagger(0)\right]_+|n\rangle\right\}\\
=&-\frac{i}{\hbar}\delta(t)\,\mathcal{Z}_e^{-1}\sum_n e^{-\beta E_n}\langle n|\left[f(t),d_j^\dagger(0)\right]_+|n\rangle-\frac{i}{\hbar}\epsilon_M\mathcal{G}_{f,d_j}(t)-\frac{i}{\hbar}\frac{\lambda}{\sqrt{2}}(-1)\,\mathcal{G}_{d_1,d_j}(t)\\
&-\frac{i}{\hbar}\frac{\lambda}{\sqrt{2}}\mathcal{G}_{d_1^\dagger,d_j}(t).\end{aligned} \tag{4.29}$$

De modo similar para a Eq. (4.25), nós escrevemos

$$\frac{\partial}{\partial t}\mathcal{G}_{f^{\dagger},d_j}(t) = -\frac{i}{\hbar}\delta(t)\,\mathcal{Z}_e^{-1}\sum_n e^{-\beta E_n}\langle n|\left[f^{\dagger}(t),d_j^{\dagger}(0)\right]_+|n\rangle + \left(-\frac{i}{\hbar}\right)\theta(t)\,\mathcal{Z}_e^{-1}\sum_n e^{-\beta E_n}\langle n|\left[\frac{\partial}{\partial t}f^{\dagger}(t),d_j^{\dagger}(0)\right]_+|n\rangle, \tag{4.30}$$

$$\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial t}f^{\dagger}(t) &= -\frac{i}{\hbar}\left[f^{\dagger},\mathcal{H}_e\right] = -\frac{i}{\hbar}\left[f^{\dagger},\epsilon_M\left(f^{\dagger}f-\frac{1}{2}\right)\right] - \frac{i}{\hbar}\left[f^{\dagger},\frac{\lambda}{\sqrt{2}}\left(d_1f^{\dagger}+d_1f-d_1^{\dagger}f^{\dagger}-d_1^{\dagger}f\right)\right]\\
&= -\frac{i}{\hbar}\epsilon_M\left(f^{\dagger}f^{\dagger}f-f^{\dagger}ff^{\dagger}\right)\\
&\quad -\frac{i}{\hbar}\frac{\lambda}{\sqrt{2}}\left\{f^{\dagger}d_1f^{\dagger}+f^{\dagger}d_1f-f^{\dagger}d_1^{\dagger}f^{\dagger}-f^{\dagger}d_1^{\dagger}f-d_1f^{\dagger}f^{\dagger}-d_1ff^{\dagger}+d_1^{\dagger}f^{\dagger}f^{\dagger}+d_1^{\dagger}ff^{\dagger}\right\}\\
&= -\frac{i}{\hbar}\epsilon_M\left(f^{\dagger}f^{\dagger}f-f^{\dagger}+f^{\dagger}f^{\dagger}f\right) - \frac{i}{\hbar}\frac{\lambda}{\sqrt{2}}\left\{f^{\dagger}d_1f-f^{\dagger}d_1^{\dagger}f-d_1ff^{\dagger}+d_1^{\dagger}ff^{\dagger}\right\}\\
&= -\frac{i}{\hbar}\epsilon_M\left(-f^{\dagger}\right) - \frac{i}{\hbar}\frac{\lambda}{\sqrt{2}}\left\{d_1^{\dagger}\left(ff^{\dagger}+f^{\dagger}f\right)-d_1\left(ff^{\dagger}+f^{\dagger}f\right)\right\}\\
&= -\frac{i}{\hbar}\epsilon_M\left(-f^{\dagger}\right) - \frac{i}{\hbar}\frac{\lambda}{\sqrt{2}}\left\{d_1^{\dagger}-d_1\right\}
\end{aligned} \tag{4.31}$$

e

$$\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial t}\mathcal{G}_{f^{\dagger},d_j}(t) &= -\frac{i}{\hbar}\delta(t)\,\mathcal{Z}_e^{-1}\sum_n e^{-\beta E_n}\langle n|\left[f^{\dagger}(t),d_j^{\dagger}(0)\right]_+|n\rangle\\
&\quad -\frac{i}{\hbar}\epsilon_M(-1)\left\{-\frac{i}{\hbar}\theta(t)\,\mathcal{Z}_e^{-1}\sum_n e^{-\beta E_n}\langle n|\left[f^{\dagger}(t),d_j^{\dagger}(0)\right]_+|n\rangle\right\}\\
&\quad -\frac{i}{\hbar}\frac{\lambda}{\sqrt{2}}(-1)\left\{-\frac{i}{\hbar}\theta(t)\,\mathcal{Z}_e^{-1}\sum_n e^{-\beta E_n}\langle n|\left[d_1(t),d_j^{\dagger}(0)\right]_+|n\rangle\right\}\\
&\quad -\frac{i}{\hbar}\frac{\lambda}{\sqrt{2}}\left\{-\frac{i}{\hbar}\theta(t)\,\mathcal{Z}_e^{-1}\sum_n e^{-\beta E_n}\langle n|\left[d_1^{\dagger}(t),d_j^{\dagger}(0)\right]_+|n\rangle\right\}\\
&= -\frac{i}{\hbar}\delta(t)\,\mathcal{Z}_e^{-1}\sum_n e^{-\beta E_n}\langle n|\left[f^{\dagger}(t),d_j^{\dagger}(0)\right]_+|n\rangle - \frac{i}{\hbar}\epsilon_M(-1)\,\mathcal{G}_{f^{\dagger},d_j}(t) - \frac{i}{\hbar}\frac{\lambda}{\sqrt{2}}(-1)\,\mathcal{G}_{d_1,d_j}(t)\\
&\quad -\frac{i}{\hbar}\frac{\lambda}{\sqrt{2}}\mathcal{G}_{d_1^{+},d_j}(t).
\end{aligned} \tag{4.32}$$

Tomando a transformada de Fourier no tempo nas Eqs. (4.26), (4.29) e (4.32), nós encontramos

$$(\varepsilon+i\eta)\,\tilde{\mathcal{G}}_{\eta_1,d_j}(\varepsilon) = \frac{1}{\sqrt{2}}(\varepsilon+i\eta)\,\tilde{\mathcal{G}}_{f,d_j}(\varepsilon) + \frac{1}{\sqrt{2}}(\varepsilon+i\eta)\,\tilde{\mathcal{G}}_{f^{+},d_j}(\varepsilon), \tag{4.33}$$

$$(\varepsilon+i\eta)\,\tilde{\mathcal{G}}_{f,d_j}(\varepsilon) = \epsilon_M\tilde{\mathcal{G}}_{f,d_j}(\varepsilon) - \frac{\lambda}{\sqrt{2}}\tilde{\mathcal{G}}_{d_1,d_j}(\varepsilon) + \frac{\lambda}{\sqrt{2}}\tilde{\mathcal{G}}_{d_1^{\dagger},d_j}(\varepsilon), \tag{4.34}$$

e

$$(\varepsilon + i\eta)\,\tilde{\mathcal{G}}_{f^\dagger,d_j}(\varepsilon) = -\epsilon_M \tilde{\mathcal{G}}_{f^\dagger,d_j}(\varepsilon) - \frac{\lambda}{\sqrt{2}}\tilde{\mathcal{G}}_{d_1,d_j}(\varepsilon) + \frac{\lambda}{\sqrt{2}}\tilde{\mathcal{G}}_{d_1^\dagger,d_j}(\varepsilon). \tag{4.35}$$

4.2 Sistema de um QD

Para um único QD, as Eqs. (4.21), (4.33), (4.35) tornam-se

$$\left(\varepsilon - \tilde{\varepsilon}_1 + i\tilde{\Gamma}\right)\tilde{\mathcal{G}}_{d_1 d_1}(\varepsilon) = 1 - \lambda\tilde{\mathcal{G}}_{\eta_1,d_1}(\varepsilon), \tag{4.36}$$

$$\tilde{\mathcal{G}}_{\eta_1,d_1}(\varepsilon) = \frac{1}{\sqrt{2}}\tilde{\mathcal{G}}_{f,d_1}(\varepsilon) + \frac{1}{\sqrt{2}}\tilde{\mathcal{G}}_{f^+,d_1}(\varepsilon), \tag{4.37}$$

$$(\varepsilon + i\eta)\,\tilde{\mathcal{G}}_{f,d_1}(\varepsilon) = \epsilon_M \tilde{\mathcal{G}}_{f,d_1}(\varepsilon) - \frac{\lambda}{\sqrt{2}}\tilde{\mathcal{G}}_{d_1,d_1}(\varepsilon) + \frac{\lambda}{\sqrt{2}}\tilde{\mathcal{G}}_{d_1^\dagger,d_1}(\varepsilon), \tag{4.38}$$

e

$$(\varepsilon + i\eta)\,\tilde{\mathcal{G}}_{f^\dagger,d_1}(\varepsilon) = -\epsilon_M \tilde{\mathcal{G}}_{f^\dagger,d_1}(\varepsilon) - \frac{\lambda}{\sqrt{2}}\tilde{\mathcal{G}}_{d_1,d_1}(\varepsilon) + \frac{\lambda}{\sqrt{2}}\tilde{\mathcal{G}}_{d_1^\dagger,d_1}(\varepsilon). \tag{4.39}$$

Resolvendo as Eqs. (4.38) e (4.39) para $\tilde{\mathcal{G}}_{f,d_1}(\varepsilon)$ e $\tilde{\mathcal{G}}_{f^\dagger,d_1}(\varepsilon)$, encontramos

$$\tilde{\mathcal{G}}_{f,d_1}(\varepsilon) = -\frac{\frac{\lambda}{\sqrt{2}}\tilde{\mathcal{G}}_{d_1,d_1}(\varepsilon)}{(\varepsilon - \epsilon_M + i\eta)} + \frac{\frac{\lambda}{\sqrt{2}}\tilde{\mathcal{G}}_{d_1^\dagger,d_1}(\varepsilon)}{(\varepsilon - \epsilon_M + i\eta)} \tag{4.40}$$

e

$$\tilde{\mathcal{G}}_{f^\dagger,d_1}(\varepsilon) = -\frac{\frac{\lambda}{\sqrt{2}}\tilde{\mathcal{G}}_{d_1,d_1}(\varepsilon)}{(\varepsilon + \epsilon_M + i\eta)} + \frac{\frac{\lambda}{\sqrt{2}}\tilde{\mathcal{G}}_{d_1^\dagger,d_1}(\varepsilon)}{(\varepsilon + \epsilon_M + i\eta)}. \tag{4.41}$$

Nós precisamos encontrar $\tilde{\mathcal{G}}_{d_1^\dagger,d_1}(\varepsilon)$:

$$\mathcal{G}_{d_1^\dagger,d_1}(t) = -\frac{i}{\hbar}\theta(t)\,\mathcal{Z}_e^{-1}\sum_n e^{-\beta E_n}\langle n|\left[d_1^\dagger(t), d_1^\dagger(0)\right]_+|n\rangle, \tag{4.42}$$

onde

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial t}\mathcal{G}_{d_1^\dagger,d_1}(t) = &-\frac{i}{\hbar}\delta(t)\,\mathcal{Z}_e^{-1}\sum_n e^{-\beta E_n}\langle n|\left[d_1^\dagger(t), d_1^\dagger(0)\right]_+|n\rangle \\ &+\left(-\frac{i}{\hbar}\right)\theta(t)\,\mathcal{Z}_e^{-1}\sum_n e^{-\beta E_n}\langle n|\left[\frac{\partial}{\partial t}d_1^\dagger(t), d_1^\dagger(0)\right]_+|n\rangle.\end{aligned} \tag{4.43}$$

Nós substituímos

$$\frac{\partial}{\partial t}d_1^\dagger(t) = -\frac{i}{\hbar}\left[d_1^\dagger, \mathcal{H}_e\right] = -\frac{i}{\hbar}\left\{-\varepsilon_1 d_1^\dagger(t) - \sqrt{\frac{2}{\mathcal{N}}}V\sum_k c_k^\dagger(t) + \lambda\eta_1(t)\right\} \tag{4.44}$$

na Eq. (4.43) e obtemos

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial t}\mathcal{G}_{d_1^\dagger,d_1}(t) = &-\frac{i}{\hbar}\delta(t)\,\mathcal{Z}_e^{-1}\sum_n e^{-\beta E_n}\langle n|\left[d_1^\dagger(t), d_1^\dagger(0)\right]_+|n\rangle \\ &+\left(-\frac{i}{\hbar}\right)(-\varepsilon_1)\left\{-\frac{i}{\hbar}\theta(t)\,\mathcal{Z}_e^{-1}\sum_n e^{-\beta E_n}\langle n|\left[d_1^\dagger(t), d_1^\dagger(0)\right]_+|n\rangle\right\} \\ &+\left(-\frac{i}{\hbar}\right)\left(-\sqrt{\frac{2}{\mathcal{N}}}V\right)\left\{-\frac{i}{\hbar}\theta(t)\,\mathcal{Z}_e^{-1}\sum_n e^{-\beta E_n}\langle n|\left[\sum_k c_k^\dagger(t), d_1^\dagger(0)\right]_+|n\rangle\right\} \\ &+\left(-\frac{i}{\hbar}\right)\lambda\left\{-\frac{i}{\hbar}\theta(t)\,\mathcal{Z}_e^{-1}\sum_n e^{-\beta E_n}\langle n|\left[\eta_1(t), d_1^\dagger(0)\right]_+|n\rangle\right\},\end{aligned} \tag{4.45}$$

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial t}\mathcal{G}_{d_1^\dagger,d_1}(t) = &-\frac{i}{\hbar}\delta(t)\,\mathcal{Z}_e^{-1}\sum_n e^{-\beta E_n}\langle n|\left[d_1^\dagger(t), d_1^\dagger(0)\right]_+|n\rangle \\ &+\left(-\frac{i}{\hbar}\right)(-\varepsilon_1)\,\mathcal{G}_{d_1^\dagger,d_1}(t) - \left(\frac{i}{\hbar}\right)\left(-\sqrt{\frac{2}{\mathcal{N}}}V\right)\sum_k \mathcal{G}_{c_k^\dagger,d_1}(t) \\ &+\left(-\frac{i}{\hbar}\right)\lambda\tilde{\mathcal{G}}_{\eta_1,d_1}(t),\end{aligned} \tag{4.46}$$

que em coordenadas de energia torna-se

$$(\varepsilon+\varepsilon_1+i\eta)\,\tilde{\mathcal{G}}_{d_1^\dagger,d_1}(\varepsilon) = \left(-\sqrt{\frac{2}{\mathcal{N}}}V\right)\sum_k \mathcal{G}_{c_{ek}^\dagger,d_1}(\varepsilon) + \lambda\tilde{\mathcal{G}}_{\eta_1,d_1}(\varepsilon). \tag{4.47}$$

Percebemos que precisamos da quantidade $\sum_k \mathcal{G}_{c_{ek}^\dagger,d_1}$. Para tal, usemos

$$\mathcal{G}_{c_{ek}^\dagger c_{eq}}(t) = -\frac{i}{\hbar}\theta(t)\,\mathcal{Z}_e^{-1}\sum_r e^{-\beta E_r}\langle r|\left[c_{ek}^\dagger(t), d_1^\dagger(0)\right]_+|r\rangle, \tag{4.48}$$

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial t}\mathcal{G}_{c_{ek}^\dagger,d_1}(t) = &-\frac{i}{\hbar}\delta(t)\,\mathcal{Z}_e^{-1}\sum_n e^{-\beta E_n}\langle n|\left[c_{ek}^\dagger(t), d_1^\dagger(0)\right]_+|n\rangle \\ &+\left(-\frac{i}{\hbar}\right)\theta(t)\,\mathcal{Z}_e^{-1}\sum_n e^{-\beta E_n}\langle n|\left[\frac{\partial}{\partial t}c_{ek}^\dagger(t), d_1^\dagger(0)\right]_+|n\rangle,\end{aligned} \tag{4.49}$$

$$\frac{\partial}{\partial t}c_{ek}^\dagger(t) = -\frac{i}{\hbar}\left[c_{ek}^\dagger, \mathcal{H}_e\right] = \left(-\frac{i}{\hbar}\right)\left(-\varepsilon_k c_{ek}^\dagger(t) - \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{\mathcal{N}}}V d_1^\dagger(t) - \frac{V_{BT}}{\mathcal{N}}\sum_p c_{ep}^\dagger(t)\right), \tag{4.50}$$

$$\frac{\partial}{\partial t}\mathcal{G}_{c_{ek}^{\dagger},d_1}(t) = -\frac{i}{\hbar}\delta(t)\,\mathcal{Z}_e^{-1}\sum_n e^{-\beta E_n}\langle n|\left[c_{ek}^{\dagger}(t),d_1^{\dagger}(0)\right]_+|n\rangle$$
$$+\left(-\frac{i}{\hbar}\right)(-\varepsilon_k)\left\{-\frac{i}{\hbar}\theta(t)\,\mathcal{Z}_e^{-1}\sum_n e^{-\beta E_n}\langle n|\left[c_{ek}^{\dagger}(t),d_1^{\dagger}(0)\right]_+|n\rangle\right\}$$
$$+\left(-\frac{i}{\hbar}\right)\left(-\frac{\sqrt{2}}{\sqrt{\mathcal{N}}}V\right)\left\{-\frac{i}{\hbar}\theta(t)\,\mathcal{Z}_e^{-1}\sum_n e^{-\beta E_n}\langle n|\left[d_1^{\dagger}(t),d_1^{\dagger}(0)\right]_+|n\rangle\right\}$$
$$+\left(-\frac{i}{\hbar}\right)\left(-\frac{V_{BT}}{\mathcal{N}}\right)\sum_p\left\{-\frac{i}{\hbar}\theta(t)\,\mathcal{Z}_e^{-1}\sum_n e^{-\beta E_n}\langle n|\left[c_{ep}^{\dagger}(t),d_1^{\dagger}(0)\right]_+|n\rangle\right\}, \tag{4.51}$$

e

$$\frac{\partial}{\partial t}\mathcal{G}_{c_{ek}^{\dagger},d_1}(t) = -\frac{i}{\hbar}\delta(t)\,\mathcal{Z}_e^{-1}\sum_n e^{-\beta E_n}\langle n|\left[c_{ek}^{\dagger}(t),d_1^{\dagger}(0)\right]_+|n\rangle$$
$$+\left(-\frac{i}{\hbar}\right)(-\varepsilon_k)\,\mathcal{G}_{c_{ek}^{\dagger},d_1}(t)+\left(-\frac{i}{\hbar}\right)\left(-\frac{\sqrt{2}}{\sqrt{\mathcal{N}}}V\right)\tilde{\mathcal{G}}_{d_1^{\dagger},d_1}(t)$$
$$+\left(-\frac{i}{\hbar}\right)\left(-\frac{V_{BT}}{\mathcal{N}}\right)\sum_p\tilde{\mathcal{G}}_{c_{ep}^{\dagger},d_1}(t). \tag{4.52}$$

Fazendo-se a transformada de Fourier na Eq. (4.52):

$$(\varepsilon+i\eta)\,\tilde{\mathcal{G}}_{c_{ek}^{\dagger},d_1}(\varepsilon) = -\varepsilon_k\mathcal{G}_{c_{ek}^{\dagger},d_1}(t)-\frac{\sqrt{2}}{\sqrt{\mathcal{N}}}V\tilde{\mathcal{G}}_{d_1^{\dagger},d_1}(\varepsilon)-\frac{V_{BT}}{\mathcal{N}}\sum_p\tilde{\mathcal{G}}_{c_{ep}^{\dagger},d_1}(\varepsilon), \tag{4.53}$$

$$(\varepsilon+\varepsilon_k+i\eta)\,\tilde{\mathcal{G}}_{c_{ek}^{\dagger},d_1}(\varepsilon) = -\frac{\sqrt{2}}{\sqrt{\mathcal{N}}}V\tilde{\mathcal{G}}_{d_1^{\dagger},d_1}(\varepsilon)-\frac{V_{BT}}{\mathcal{N}}\sum_p\tilde{\mathcal{G}}_{c_{ep}^{\dagger},d_1}(\varepsilon), \tag{4.54}$$

$$\tilde{\mathcal{G}}_{c_{ek}^{\dagger},d_1}(\varepsilon) = -\frac{\frac{\sqrt{2}}{\sqrt{\mathcal{N}}}V\tilde{\mathcal{G}}_{d_1^{\dagger},d_1}(\varepsilon)}{(\varepsilon+\varepsilon_k+i\eta)}-\frac{\frac{V_{BT}}{\mathcal{N}}\sum_p\tilde{\mathcal{G}}_{c_{ep}^{\dagger},d_1}(\varepsilon)}{(\varepsilon+\varepsilon_k+i\eta)}, \tag{4.55}$$

$$\sum_k\tilde{\mathcal{G}}_{c_{ek}^{\dagger},d_1}(\varepsilon) = -\sum_k\frac{\frac{\sqrt{2}}{\sqrt{\mathcal{N}}}V\tilde{\mathcal{G}}_{d_1^{\dagger},d_1}(\varepsilon)}{(\varepsilon+\varepsilon_k+i\eta)}-\sum_k\frac{\frac{V_{BT}}{\mathcal{N}}\sum_p\tilde{\mathcal{G}}_{c_{ep}^{\dagger},d_1}(\varepsilon)}{(\varepsilon+\varepsilon_k+i\eta)}, \tag{4.56}$$

e

$$\sum_k\tilde{\mathcal{G}}_{c_{ek}^{\dagger},d_1}(\varepsilon) = -\frac{\frac{\sqrt{2}}{\sqrt{\mathcal{N}}}V\sum_k\frac{1}{(\varepsilon+\varepsilon_k+i\eta)}}{1+\frac{V_{BT}}{\mathcal{N}}\sum_k\frac{1}{(\varepsilon+\varepsilon_k+i\eta)}}\tilde{\mathcal{G}}_{d_1^{\dagger},d_1}(\varepsilon). \tag{4.57}$$

Substituindo as Eq. (4.57) e (4.37) na Eq. (4.47), achamos

$$
\begin{aligned}
\left(\varepsilon+\varepsilon_1+i\eta\right)\tilde{\mathcal{G}}_{d_1^\dagger,d_1}\left(\varepsilon\right) &= \left(\sqrt{2}V\right)^2 \frac{\frac{1}{\mathcal{N}}\sum_k \frac{1}{(\varepsilon+\varepsilon_k+i\eta)}}{1+\frac{V_{BT}}{\mathcal{N}}\sum_k \frac{1}{(\varepsilon+\varepsilon_k+i\eta)}}\tilde{\mathcal{G}}_{d_1^\dagger,d_1}\left(\varepsilon\right)+\lambda\tilde{\mathcal{G}}_{\eta_1,d_1}\left(\varepsilon\right) \\
&= \left(\sqrt{2}V\right)^2 \frac{\frac{1}{\mathcal{N}}\sum_k \frac{1}{(\varepsilon+\varepsilon_k+i\eta)}}{1+\frac{V_{BT}}{\mathcal{N}}\sum_k \frac{1}{(\varepsilon+\varepsilon_k+i\eta)}}\tilde{\mathcal{G}}_{d_1^\dagger,d_1}\left(\varepsilon\right) \\
&+ \lambda\frac{1}{\sqrt{2}}\tilde{\mathcal{G}}_{f,d_1}+\lambda\frac{1}{\sqrt{2}}\tilde{\mathcal{G}}_{f^+,d_1}\left(\varepsilon\right), \qquad (4.58)
\end{aligned}
$$

$$
\left(\varepsilon+\tilde{\varepsilon}_1+i\tilde{\Gamma}\right)\tilde{\mathcal{G}}_{d_1^\dagger,d_1}\left(\varepsilon\right)=\lambda\frac{1}{\sqrt{2}}\tilde{\mathcal{G}}_{f,d_1}+\lambda\frac{1}{\sqrt{2}}\tilde{\mathcal{G}}_{f^+,d_1}\left(\varepsilon\right), \qquad (4.59)
$$

onde utilizamos

$$
\begin{aligned}
\frac{\left(\sqrt{2}V\right)^2\frac{1}{\mathcal{N}}\sum_k \frac{1}{(\varepsilon+\varepsilon_k+i\eta)}}{1+\frac{V_{BT}}{\mathcal{N}}\sum_k \frac{1}{(\varepsilon+\varepsilon_k+i\eta)}} &= -\frac{i\Gamma}{1-iV_{BT}\pi\rho_0}=-\frac{\left(1+iV_{BT}\pi\rho_0\right)}{1+\left(V_{BT}\pi\rho_0\right)^2}i\Gamma \\
&= -i\frac{\Gamma}{1+\left(V_{BT}\pi\rho_0\right)^2}+\frac{V_{BT}\pi\rho_0\Gamma}{1+\left(V_{BT}\pi\rho_0\right)^2} \\
&= -i\tilde{\Gamma}-\tilde{\sum}^R \qquad (4.60)
\end{aligned}
$$

com a Eq. (4.22). Substituindo as Eqs. (4.40) e (4.41) na Eq. (4.59),

$$
\begin{aligned}
\left(\varepsilon+\tilde{\varepsilon}_1+i\tilde{\Gamma}\right)\tilde{\mathcal{G}}_{d_1^\dagger,d_1}\left(\varepsilon\right) &= -\frac{\lambda^2}{2}\frac{1}{(\varepsilon-\epsilon_M+i\eta)}\tilde{\mathcal{G}}_{d_1,d_1}\left(\varepsilon\right) \\
&+ \frac{\lambda^2}{2}\frac{1}{(\varepsilon-\epsilon_M+i\eta)}\tilde{\mathcal{G}}_{d_1^\dagger,d_1}\left(\varepsilon\right) \\
&- \frac{\lambda^2}{2}\frac{1}{(\varepsilon+\epsilon_M+i\eta)}\tilde{\mathcal{G}}_{d_1,d_1}\left(\varepsilon\right) \\
&+ \frac{\lambda^2}{2}\frac{1}{(\varepsilon+\epsilon_M+i\eta)}\tilde{\mathcal{G}}_{d_1^\dagger,d_1}\left(\varepsilon\right) \\
&= \lambda^2K\left(\varepsilon\right)\tilde{\mathcal{G}}_{d_1^\dagger,d_1}\left(\varepsilon\right)-\lambda^2K\left(\varepsilon\right)\tilde{\mathcal{G}}_{d_1,d_1}\left(\varepsilon\right) \\
\left(\varepsilon+\tilde{\varepsilon}_1+i\tilde{\Gamma}-\lambda^2K\left(\varepsilon\right)\right)\tilde{\mathcal{G}}_{d_1^\dagger,d_1}\left(\varepsilon\right) &= -\lambda^2K\left(\varepsilon\right)\tilde{\mathcal{G}}_{d_1,d_1}\left(\varepsilon\right), \qquad (4.61)
\end{aligned}
$$

$$
\tilde{\mathcal{G}}_{d_1^\dagger,d_1}\left(\varepsilon\right)=-\frac{\lambda^2K\left(\varepsilon\right)}{\left(\varepsilon+\tilde{\varepsilon}_1+i\tilde{\Gamma}-\lambda^2K\left(\varepsilon\right)\right)}\tilde{\mathcal{G}}_{d_1,d_1}\left(\varepsilon\right) \qquad (4.62)
$$

com

$$
\begin{aligned}
\frac{\lambda^2}{2}\left\{\frac{1}{(\varepsilon+\epsilon_M+i\eta)}+\frac{1}{(\varepsilon-\epsilon_M+i\eta)}\right\} &= \frac{\lambda^2}{2}\frac{2\varepsilon}{(\varepsilon+\epsilon_M+i\eta)(\varepsilon-\epsilon_M+i\eta)} \\
&= \frac{\lambda^2}{2}\frac{2\varepsilon}{(\varepsilon+\epsilon_M)(\varepsilon-\epsilon_M)} \\
&= \frac{\lambda^2}{2}\frac{2\varepsilon}{(\varepsilon^2-\epsilon_M^2)}=\lambda^2\frac{\varepsilon}{(\varepsilon^2-\epsilon_M^2)} \\
&= \lambda^2\frac{1}{\varepsilon-\frac{\epsilon_M^2}{\varepsilon}}=\lambda^2K\left(\varepsilon\right). \qquad (4.63)
\end{aligned}
$$

Das Eqs. (4.36), (4.37), (4.40), (4.41), (4.62) e (4.63) nós podemos escrever

$$
\begin{aligned}
\left(\varepsilon-\tilde{\varepsilon}_1+i\tilde{\Gamma}\right)\tilde{\mathcal{G}}_{d_1d_1}(\varepsilon) &= 1-\lambda\tilde{\mathcal{G}}_{\eta_1,d_1}(\varepsilon),\\
&= 1-\frac{\lambda}{\sqrt{2}}\tilde{\mathcal{G}}_{f,d_1}(\varepsilon)-\frac{\lambda}{\sqrt{2}}\tilde{\mathcal{G}}_{f^+,d_1}(\varepsilon)\\
&= 1+\frac{\lambda^2}{2}\frac{\tilde{\mathcal{G}}_{d_1,d_1}(\varepsilon)}{(\varepsilon-\epsilon_M+i\eta)}-\frac{\lambda^2}{2}\frac{\tilde{\mathcal{G}}_{d_1^\dagger,d_1}(\varepsilon)}{(\varepsilon-\epsilon_M+i\eta)}\\
&+\frac{\lambda^2}{2}\frac{\tilde{\mathcal{G}}_{d_1,d_1}(\varepsilon)}{(\varepsilon+\epsilon_M+i\eta)}-\frac{\lambda^2}{2}\frac{\tilde{\mathcal{G}}_{d_1^\dagger,d_1}(\varepsilon)}{(\varepsilon+\epsilon_M+i\eta)}\\
&= 1+\lambda^2K(\varepsilon)\tilde{\mathcal{G}}_{d_1,d_1}(\varepsilon)-\lambda^2K(\varepsilon)\tilde{\mathcal{G}}_{d_1^\dagger,d_1}(\varepsilon)\\
&= 1+\lambda^2K(\varepsilon)\tilde{\mathcal{G}}_{d_1,d_1}(\varepsilon)\\
&-\lambda^2K(\varepsilon)\left\{-\frac{\lambda^2K(\varepsilon)}{\left(\varepsilon+\tilde{\varepsilon}_1+i\tilde{\Gamma}-\lambda^2K(\varepsilon)\right)}\tilde{\mathcal{G}}_{d_1,d_1}(\varepsilon)\right\}\\
&= 1+\lambda^2K(\varepsilon)\tilde{\mathcal{G}}_{d_1,d_1}(\varepsilon)+\lambda^2K(\varepsilon)\lambda^2\tilde{K}(\varepsilon)\tilde{\mathcal{G}}_{d_1,d_1}(\varepsilon)\\
&= 1+\lambda^2K(\varepsilon)\left(1+\lambda^2\tilde{K}(\varepsilon)\right)\tilde{\mathcal{G}}_{d_1,d_1}(\varepsilon),
\end{aligned}
\tag{4.64}
$$

com

$$
\tilde{K}(\varepsilon)=\frac{K(\varepsilon)}{\left(\varepsilon+\tilde{\varepsilon}_1+i\tilde{\Gamma}-\lambda^2K(\varepsilon)\right)}. \tag{4.65}
$$

Para concluir, a FG do QD é

$$
\tilde{\mathcal{G}}_{d_1,d_1}(\varepsilon)=\frac{1}{\varepsilon-\tilde{\varepsilon}_1+i\tilde{\Gamma}-\lambda^2K(\varepsilon)\left[1+\lambda^2\tilde{K}(\varepsilon)\right]}. \tag{4.66}
$$

Capítulo 5

Hamiltoniano do Sistema

Para dar o tratamento teórico da configuração retratada na Fig. 1.1 descrevendo um fio de Kitaev em forma de "ferradura" dentro da fase topológica e acoplado ao QD hibridizado com os contatos metálicos, adotamos um Hamiltoniano baseado na proposta original de Liu e Baranger [34]:

$$\begin{aligned}\mathcal{H} &= \sum_{\alpha k}\tilde{\varepsilon}_{\alpha k}c^{\dagger}_{\alpha k}c_{\alpha k}+\varepsilon_1 d^{\dagger}_1 d_1 + V\sum_{\alpha k}(c^{\dagger}_{\alpha k}d_1+\text{H.c.}) \\ &+ \frac{(t+\Delta)}{\sqrt{2}}(d_1-d^{\dagger}_1)\eta_A + i\frac{(\Delta-t)}{\sqrt{2}}(d_1+d^{\dagger}_1)\eta_B \\ &+ i\varepsilon_2\eta_A\eta_B,\end{aligned} \tag{5.1}$$

onde os elétrons no contato metálico (lead)$\alpha = H, C$ (para reservatórios quente e frio, respectivamente), são descritos pelos operadores $c^{\dagger}_{\alpha k}$ ($c_{\alpha k}$) para criação (aniquilação) de um elétron no estado quântico descrito pelo número de onda k e energia $\tilde{\varepsilon}_{\alpha k} = \varepsilon_k - \mu_\alpha$, com μ_α como o potencial químico. Para o QD acoplado aos leads, $d^{\dagger}_1$ (d_1) cria (aniquila) um elétron no estado ε_1. V representa as hibridizações entre o QD e os leads. O QD acoplado assimetricamente com o fio de Kitaev em forma de "ferradura" com amplitudes de tunelamento proporcionais à $t+\Delta$ e $t-\Delta$, respectivamente para os MFs esquerdo e direito $\eta_A = \eta^{\dagger}_A$ e $\eta_B = \eta^{\dagger}_B$, os quais estão conectados através da amplitude de sobreposição ε_2. Chamamos à atenção para as amplitudes $1/\sqrt{2}$ e $i/\sqrt{2}$, respectivamente para $t+\Delta$ e $t-\Delta$, pois constituem um "calibre" que transforma as segunda e terceira linhas da Eq. (5.1) em $td_1d^{\dagger}_2 + \Delta d^{\dagger}_2 d^{\dagger}_1 + \text{H.c.} + \varepsilon_2 d^{\dagger}_2 d_2 - \frac{\varepsilon_2}{2}$, quando a representação $d_2 = \frac{1}{\sqrt{2}}(\eta_A + i\eta_B)$ é usada para um férmion não-local. Como resultado, podemos notar que os estados eletrônicos dentro de d_2 e d_1 além do tunelamento normal t entre eles, tornam-se ligados como um par de Cooper com energia de ligação Δ. Esse mapeamento como veremos mais tarde, será extremamente útil para descobrir como um sintonizador simultâneo de calor e eletricidade, auxiliado por MFs, pode surgir na configuração proposta na Fig. 1.1.

No que segue, usamos a expressão de Landauer-Büttiker para as quantidades termoelétricas em zero de voltagem [30, 29], devido a um gradiente de temperatura também tendendo à zero. Essas quantidades são dadas por:

$$\mathcal{L}_n = \frac{1}{h}\int d\varepsilon \left(\frac{\partial f_F}{\partial \varepsilon}\right)\varepsilon^n \text{Im}(\tilde{\mathcal{G}}_{d_1 d_1}), \tag{5.2}$$

onde h é a constante de Planck, $\Gamma = 2\pi V^2 \sum_k \delta(\varepsilon - \varepsilon_k)$ é o alargamento de Anderson [35], f_F representa a distribuição de Fermi-Dirac, $\tilde{\mathcal{G}}_{d_1 d_1}$ é a função de Green retardada para o QD no domínio das energias ε, obtida da transformada Fourier no tempo de $\tilde{\mathcal{G}}_{\mathcal{AB}} = \int d\tau \mathcal{G}_{\mathcal{AB}} e^{\frac{i}{\hbar}(\varepsilon + i0^+)\tau}$, onde

$$\mathcal{G}_{\mathcal{A}B} = -\frac{i}{\hbar}\theta(\tau)\mathtt{Tr}\{\varrho[\mathcal{A}(\tau), \mathcal{B}^\dagger(0)]_+\} \tag{5.3}$$

que corresponde à função de Green no domínio dos tempos τ, aqui expressa em termos da matriz densidade ϱ para Eq. (5.1) dependente da temperatura T e da função degrau $\theta(\tau)$. Além disso, apresentamos

$$\mathcal{T} = -\Gamma \mathrm{Im}(\tilde{\mathcal{G}}_{d_1 d_1}) \tag{5.4}$$

como a transmitância através do QD,

$$G = e^2 \mathcal{L}_0, \tag{5.5}$$

$$K = \frac{1}{T}(\mathcal{L}_2 - \frac{\mathcal{L}_1^2}{\mathcal{L}_0}) \tag{5.6}$$

e

$$S = -(\frac{1}{eT})\frac{\mathcal{L}_1}{\mathcal{L}_0} \tag{5.7}$$

como as expressões da condutância elétrica, térmica e "thermopower", respectivamente. Aqui, exploramos a violação de Lei de Wiedemann-Franz, lei esta que estabalece uma relação entre as condutividades térmica e elétrica para metais, dada por

$$WF = \frac{1}{T}(\frac{K}{G}), \tag{5.8}$$

em unidades do número de Lorenz $L_0 = (\pi^2/3)(k_B/e)^2$ e que desta forma para metais deve ter valor igual a 1. Em razão disso também exploramos o aumento da figura de mérito

$$ZT = \frac{S^2 G T}{K} \tag{5.9}$$

como consequência [30, 29].

Particularmente para Eq. (5.2), usamos o método da equação de movimento (EOM) [36] resumido como segue:

$$(\varepsilon + i0^+)\tilde{\mathcal{G}}_{\mathcal{A}B} = [\mathcal{A}, \mathcal{B}^\dagger]_+ + \tilde{\mathcal{G}}_{[\mathcal{A},\mathcal{H}]\mathcal{B}^\dagger}, \tag{5.10}$$

com $\mathcal{A} = \mathcal{B} = d_1$ e calculamos $\tilde{\mathcal{G}}_{d_1 d_1}$ junto com as outras funções de Green.

Além do mais, como a Eq.(5.1) é quadrática, o Hamiltoniano é exatamente solúvel pela abordagem da EOM. Particularmente, quando por exemplo, o termo de Coulomb existe, a EOM requer algum critério de desacoplamento entre as funções de Green de alta ordem [37]. Como nossa configuração está dentro do regime sem spin para um único QD, a interação Coulombiana é inexistente como esperado. Assim,

por uma questão de simplicidade, encontramos:

$$(\varepsilon - \varepsilon_1 - \Sigma)\tilde{\mathcal{G}}_{d_1 d_1} = 1 - t\tilde{\mathcal{G}}_{d_2 d_1} - \Delta\tilde{\mathcal{G}}_{d_2^\dagger d_1}, \tag{5.11}$$

expresso em termos da auto-energia $\Sigma = -i\Gamma$ e funções de Green $\tilde{\mathcal{G}}_{d_2 d_1}$ e $\tilde{\mathcal{G}}_{d_2^\dagger d_1}$. De acordo com o procedimento de EOM, nós determinamos:

$$\tilde{\mathcal{G}}_{d_2 d_1} = +\frac{\Delta\tilde{\mathcal{G}}_{d_1^\dagger d_1}}{(\varepsilon - \varepsilon_2 + i0^+)} - \frac{t\tilde{\mathcal{G}}_{d_1 d_1}}{(\varepsilon - \varepsilon_2 + i0^+)}, \tag{5.12}$$

$$\tilde{\mathcal{G}}_{d_2^\dagger d_1} = -\frac{\Delta\tilde{\mathcal{G}}_{d_1 d_1}}{(\varepsilon + \varepsilon_2 + i0^+)} + \frac{t\tilde{\mathcal{G}}_{d_1^\dagger d_1}}{(\varepsilon + \varepsilon_2 + i0^+)} \tag{5.13}$$

e

$$\tilde{\mathcal{G}}_{d_1^\dagger d_1} = -2t\Delta\tilde{K}\tilde{\mathcal{G}}_{d_1 d_1}, \tag{5.14}$$

no qual

$$\tilde{K} = \frac{K_{\mathrm{MFs}}}{\varepsilon + \varepsilon_1 + \bar{\Sigma} - K_-}, \tag{5.15}$$

com

$$K_{\mathrm{MFs}} = \frac{(\varepsilon + i0^+)}{[\varepsilon^2 - \varepsilon_2^2 + 2i\varepsilon 0^+ - (0^+)^2]}, \tag{5.16}$$

$\bar{\Sigma}$ como o complexo conjugado de Σ e

$$K_\pm = \frac{(\varepsilon + i0^+)(t^2 + \Delta^2) \pm \varepsilon_2(t^2 - \Delta^2)}{[\varepsilon^2 - \varepsilon_2^2 + 2i\varepsilon 0^+ - (0^+)^2]}. \tag{5.17}$$

Assim, substituindo as Eqs. (5.12), (5.13) e as definições acima em Eq.(5.11), a função de Green do QD é avaliada como

$$\tilde{\mathcal{G}}_{d_1 d_1} = \frac{1}{\varepsilon - \varepsilon_1 - \Sigma - \Sigma_{\mathrm{MFs}}}, \tag{5.18}$$

onde

$$\Sigma_{\mathrm{MFs}} = K_+ + (2t\Delta)^2\tilde{K}K_{\mathrm{MFs}} \tag{5.19}$$

é a auto-energia decorrentes dos MFs hibridizados com o QD.

Vale ressaltar que um resultado analítico da inserção de Eq. (5.18) em Eq. (5.2) é permitido fazendo-se uma expansão [30, 33], a qual fornece dentro do regime de baixas temperaturas as expressões abaixo:

$$\frac{G}{G_0} = \frac{K}{G_0 L_0 T} \approx \mathcal{T}|_{\varepsilon=0} \tag{5.20}$$

e

$$S \approx eL_0 T \left.\frac{1}{\mathcal{T}}\frac{d\mathcal{T}}{d\varepsilon}\right|_{\varepsilon=0}, \tag{5.21}$$

onde depois de substituir a Eq. (5.18) na Eq. (5.4) produz

$$\mathcal{T} = \frac{\tilde{\Gamma}^2}{[\varepsilon - \varepsilon_1 - K_+ - \frac{(2t\Delta K_{\mathrm{MFs}})^2(\varepsilon+\varepsilon_1-K_-)}{(\varepsilon+\varepsilon_1-K_-)^2+\Gamma^2}]^2 + \tilde{\Gamma}^2}, \tag{5.22}$$

com

$$\tilde{\Gamma} = [1 + \frac{(2t\Delta K_{\mathrm{MFs}})^2}{(\varepsilon + \varepsilon_1 - K_-)^2 + \Gamma^2}]\Gamma \tag{5.23}$$

atuando como um alargamento de Anderson efetivo. Embora tenhamos gerado numericamente os perfis termoelétricos por meio da Eq. (5.2) como veremos mais adiante, destacamos que, avaliando $S = 0$ via $d\mathcal{T}/d\varepsilon|_{\varepsilon=0} = 0$ na Eq. (5.21) para dois MFs sobrepostos, a posição em que essa restrição é cumprida é dada por:

$$\varepsilon_1 = \frac{(t^2 - \Delta^2)}{\varepsilon_2}, \tag{5.24}$$

que dá os pontos da simetria elétron-buraco do sistema como veremos. Essa expressão também define as posiçlões de ressonância nas condutâncias termoelétricas como asseguradas pela Eq. (5.20), já que calculamos $d\mathcal{T}/d\varepsilon|_{\varepsilon=0} = 0$. Como consequência, também mostraremos que pequenas diferenças entre t e Δ serão suficientes para mudar drasticamente tais posições, em particular ao considerar MFs fracamente hibridizados, uma vez que a sobreposição ε_2 entra inversamente. Essas características serão abordadas em detalhes na próxima seção.

Capítulo 6

Resultados e Discussão

Neste trabalho investigamos o comportamento termoelétrico do fio de Kitaev em forma de "ferradura" na fase topológica retratado na Fig. 1.1 assumindo $k_B = 1$ (constante de Boltzmann) e energia escalada pelo alargamento de Anderson $\Gamma = 2\pi V^2 \sum_k \delta(\varepsilon - \varepsilon_k)$ [35], com $k_B T = 10^{-4}\Gamma$ como a temperatura do sistema. O alargamento de Anderson Γ define o acoplamento entre o QD e os contatos metálicos, o qual é assumido simétrico por uma questão de simplicidade.

Iniciamos analizando a situação em que unicamente o MF η_A existe na Fig. 6.1(a) para várias amplitudes de sobreposição ε_2, caracterizando assim a fase de fronteira metálica-supercondutora $t = \Delta = 4\Gamma$. Em tal condição, os termos $d_1 d_2^\dagger + \text{H.c.}$ e $d_2^\dagger d_1^\dagger + \text{H.c.}$ para o férmion auxiliar d_2 competem no mesmo pé de igualdade. A Fig. 6.1(a) apresenta a condutância elétrica $G = e^2\mathcal{L}_0$ em unidades da quantidade $G_0 = e^2/h$ como uma função do nível de energia do QD ε_1. Particularmente para MFs isolados devido à condição $\varepsilon_2 = 0$, verificamos que G/G_0 atinge um platô dado por $0,5$ (estado de meio-férmion) para qualquer que seja o valor de ε_1 (veja a linha preta nesse painel). Essa característica surge do efeito de vazamento do estado de férmion de Majorana no QD, o qual aparece discutido na Ref.[38].

O efeito de vazamento revela que o modo zero de MF está cravado no nível de Fermi dos contatos metálicos: quando um QD está acoplado a uma borda de um fio de Kitaev na fase topológica, onde um MF está caracterizado por um pico de voltagem zero de energia, sua amplitude vaza para o QD a medida em que aumentamos o acoplamento do fio com esse último. Isso significa que na densidade de estados (DOS), surge um pico na energia de Fermi, enquanto nas bordas do fio a DOS fica gradualmente suprimida até desaparecer completamente. Em palavras equivalentes, o QD é transformado na nova borda do fio de Kitaev e um novo pico em zero de energia é encontrado ali, onde pode ser detectado por medidas de transporte eletrônico. Esse fenômeno foi primeiramente previsto teoricamente [38] e foi relatado recentemente no experimento da Ref.[9]. Acreditamos que tal experimento possa ser considerado a configuração mais promissora para a realização de nossa proposta.

A mudança de tal comportamento é suave considerando uma fraca sobreposição $\varepsilon_2 = 0.001\Gamma$ como verificamos olhando a linha verde do mesmo painel. Então, o caso $\varepsilon_2 = 0$ garante que a eletricidade através do QD não é sensível à energia de sondagem ε_1 e que o nanodispositivo não está filtrando corrente elétrica dentro de uma determinada faixa de energia. Devido à fixação do modo zero do MF na energia de Fermi,

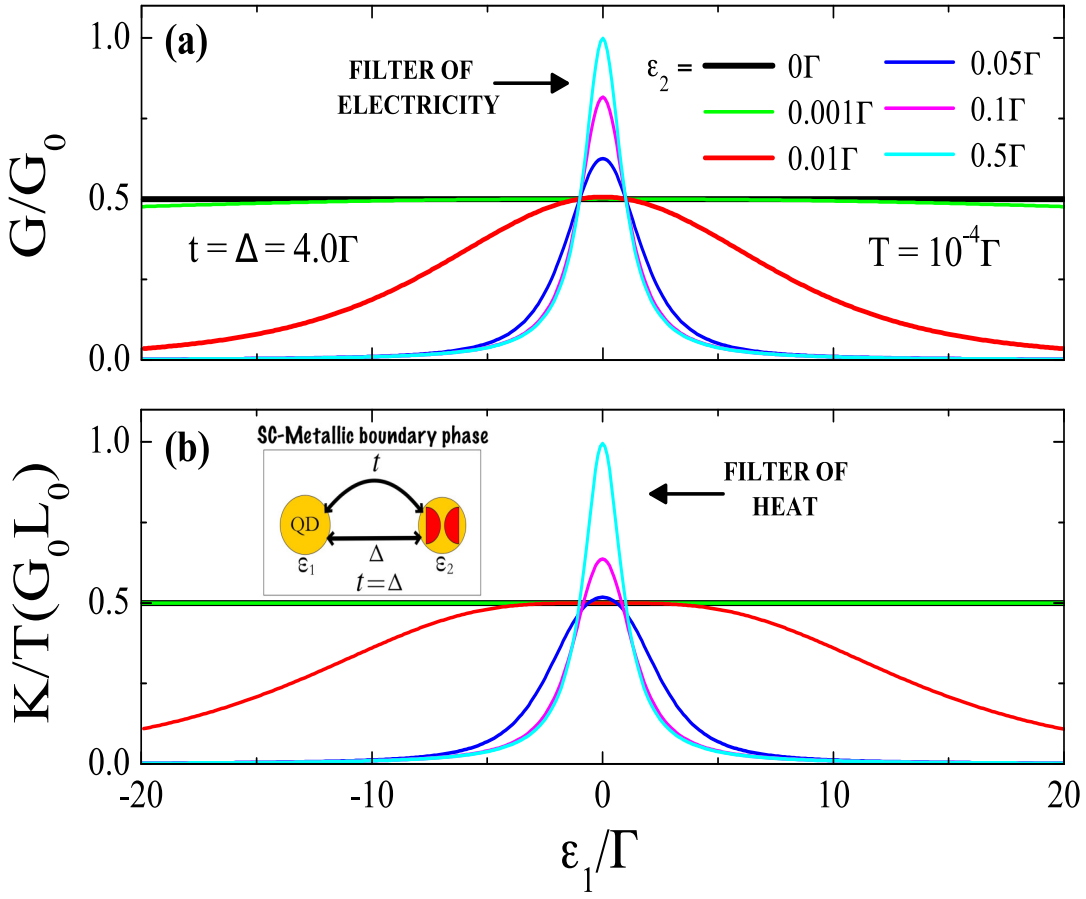

Figura 6.1: Fio de Kitaev em forma de "ferradura" com apenas o MF η_A acoplado ao QD obtido com $t = \Delta$. (a) Condutância elétrica como função do nível de energia do QD ε_1 para várias amplitudes de sobreposição ε_2. (b) O mesmo para a condutância térmica. Em ambos os casos, calor e eletricidade são filtrados próximo ao nível de energia de Fermi $\varepsilon_1 = 0$, quando os MFs distanciados estão conectados ($\varepsilon_2 \neq 0$). Caso contrário, as condutâncias exibem comportamentos constantes. No quadro inserido, visualizamos o férmion auxiliar constituído pelos MFs η_A e η_B, os quais aparecem retratados como meias-esferas em vermelho.

esse estado de meio-férmion constrói uma ponte sobre os contatos quente e frio, sustentando assim a corrente elétrica. Como resultado, a condutância térmica $K/T(G_0L_0)$ comporta-se igualmente para os termos de sobreposição como aparecem na Fig. 6.1(b). Adicionalmente, descobrimos que aumentando a amplitude de sobreposição ε_2, é permitido uma resposta ressonante de calor e eletricidade. Para esse fim, o comprimento do fio de Kitaev em forma de U deve ser reduzido.

Ao realizar isso, a resposta ressonante de ambas as condutâncias, térmica $K/T(G_0L_0)$ e elétrica G/G_0 exibem uma amplitude de excitação acima do platô 0.5 de um MF isolado, em particular, na vizinhança do nível de Fermi $\varepsilon_1 = 0$. Para entender melhor tal característica, devemos usar a interpretação fornecida pelo férmion auxiliar d_2, na qual a amplitude de sobreposição ε_2 desempenha o papel de seu nível de energia descrito pelo termo $\varepsilon_2 d_2^\dagger d_2$. Para observar isso, veja também o quadro da Fig. 6.1(b), em que as meias-esferas descritas em vermelho indicam os MFs η_A e η_B como blocos que constroem o férmion auxiliar.

Portanto, o aumento de ε_2 o afasta da energia de Fermi dos terminais e as condutâncias $K/T(G_0L_0)$ e G/G_0 evoluem para valores máximos apenas para a energia de sondagem ε_1 em ressonância com a energia de Fermi. Por outro lado, essa condutância decai e torna-se suprimida fora desse ponto. Chamamos a

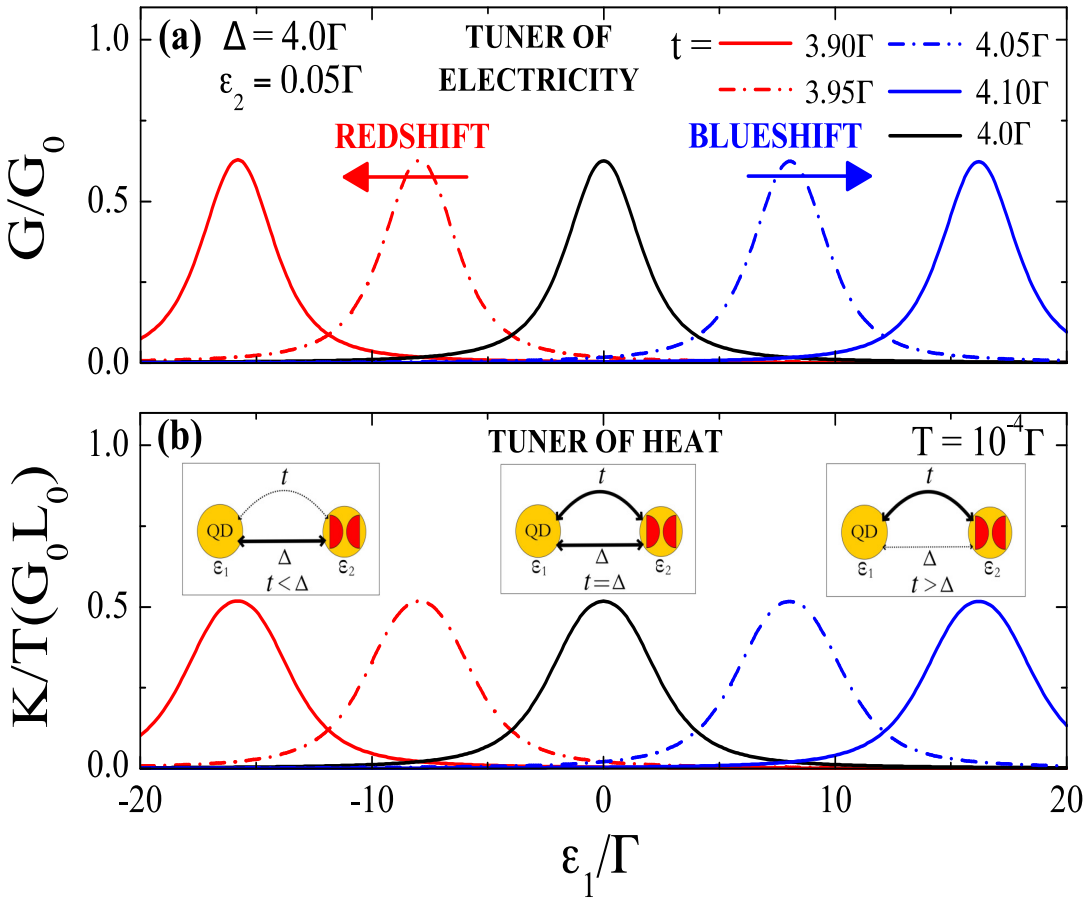

Figura 6.2: Para pequenos desvios da fase de fronteira metálica-supercondutora $t = \Delta$, encontramos um sintonizador de (a) eletricidade e (b) calor. Em (a), a resposta ressonante da condutância elétrica exibe um deslocamento para a cor azul no caso em que $t > \Delta$ e deslocamento para o vermelho quando $t < \Delta$ em função do nível de energia do QD ε_1. O painel (b) mostra o mesmo comportamento para a condutância térmica, com quadros inseridos explicitando o comportamento coletivo dos MFs sobrepostos η_A e η_B (meias-esferas em vermelho).

atenção de que os valores aumentados do parâmetro ε_2 também significam que os MFs η_A e η_B se transformam em estados altamente sobrepostos. Consequentemente, o MF de modo zero de energia para $\varepsilon_2 = 0$ é destruído de acordo com a Ref.[34] e portanto o platô 0.5 não é preservado ao mudar-se ε_1, uma vez que esse último parâmetro atua como uma sonda da resposta de tunelamento ressonante do dispositivo, cujo máximo está no nível de Fermi. Dessa forma, aparecem filtros de calor e eletricidade. No ponto $\varepsilon_1 = 0$, o nano dispositivo é transparente para calor e eletricidade, respectivamente com $K/T(G_0L_0) = 1$ e $G/G_0 = 1$ para MFs fortemente hibridizados, como por exemplo o caso $\varepsilon_2 = 0.5\Gamma$. Determinamos numericamente o valor crítico que faz a condutância termoelétrica alcançar o limite unitário em $\varepsilon_1 = 0$ com $\varepsilon_2 \approx 0.35\Gamma$, que depende dos parâmetros do modelo e da temperatura como esperado. A partir desse valor, o filtro funciona bem, sendo independente da magnitude de ε_2 de tal maneira que $K/T(G_0L_0)$ e G/G_0 são encontrados saturados.

Uma vez que são permitidos filtros de condutâncias termoelétricas dependente do nível de energia do QD, a maneira que achamamos para sintonizar a resposta ressonante é desviando-se da fase de fronteira metálica-supercondutora $t = \Delta = 4\Gamma$. Assim, pequenas mudanças em t mantendo constante Δ, que representam o aumento na assimetria dos acoplamentos $t + \Delta$ e $t - \Delta$ dos MFs com o QD na Fig. 1.1, fazem com que os filtros acima mencionados sejam finalmente transformados em sintonizadores de calor e eletricidade, como vemos respectivamente nas Figs. 6.2(a) e (b). Observe que, nesses últimos painéis, o deslocamento para azul (deslocamento para o nível acima do nível de Fermi) da resposta ressonante nas condutâncias termoelétricas $K/T(G_0L_0)$ e G/G_0 aparecem quando $t > \Delta$, enquanto o deslocamento para o vermelho é observado no domínio oposto quando $t <\triangle$. Deixamos claro que o mecanismo físico subjacente de tal fenômeno está dentro da auto-energia K_+, onde podemos perceber que apenas quando $\varepsilon_2 \neq 0$ junto com $t \neq \Delta$, o termo $(t^2 - \Delta^2)/\varepsilon_2$ em K_+ é relevante e as mudanças rígidas das condutâncias termoelétricas são permitidas.

Aqui, nossa observação principal é que a Fig. 6.2(b) contém a descoberta mais representativa de nosso trabalho: olhando nos quadros da Fig. 6.2, o deslocamento para o azul é observado quando os elétrons se dividem nos orbitais d_1 e d_2, preferindo conduzir via tunelamento t (à direita no quadro inserido, dado pela linha contínua) do que permanecerem ligados como um par de Cooper delocalizado (distribuído) com energia de ligação Δ (linha tracejada). Nessa situação, o dispositivo favorece a filtragem de calor e eletricidade através do QD em altas energias. O desvio para o vermelho é válido para o caso Δ (à esquerda no quadro inserido, dado pela linha contínua) superando a condição t (linha tracejada), em que o fenômeno da filtragem é invertido para as energias inferiores, uma vez que os elétrons divididos nos orbitais acima citados, preferem ficar trancados neles.

Assim sendo, nossa análise revela que, é suficiente apenas um leve desequilíbrio entre os canais t e Δ para definir em qual domínio energético o sistema sintoniza-se em ε_1 para a condução, uma vez que esse último via Eq. (5.24) depende do anterior da forma inversa. Como a transmitância ditada pela Eq. (5.4) regula as quantidades termoelétricas por meio da Eq. (5.2), resumimos o fenômeno de sintonizador de calor e eletricidade aqui abordado, mostrando gráficos de "density plots" da transmitância $\mathcal{T} = -\Gamma\mathrm{Im}(\tilde{\mathcal{G}}_{d_1d_1})$ nos eixos ε_1 e ε. A Fig. 6.3 expõe nos painéis (a) e (b) o regime $t = \Delta$. No primeiro painel, podemos

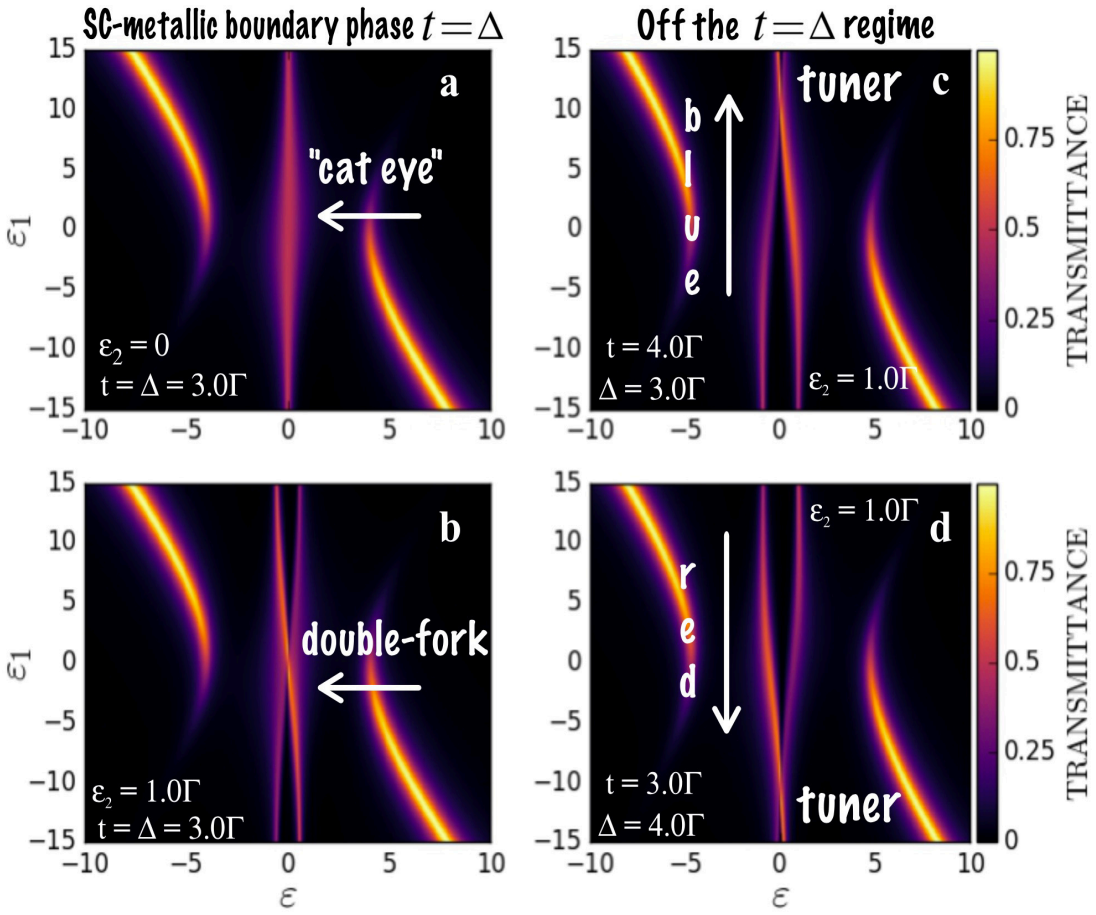

Figura 6.3: Transmitância nos eixos ε_1 e ε. Painéis (a) e (b) mostram o regime $t = \Delta$, respectivamente para $\varepsilon_2 = 0$, o qual é caracterizado por uma estrutura em forma de "olho de gato" próxima do nível de Fermi enquanto que para ε_2 finito um perfil de "forquilha dupla" surge no lugar. Nos painéis (c) e (d), são observados o deslocamento para o azul e vermelho quando considerado $t \neq \Delta$. Dessa forma, o dispositivo é transformado em um sintonizador simultâneo de calor e eletricidade, sendo o perfil de "forquilha dupla" a marca registrada. Os arcos são pólos da função de Green do QD.

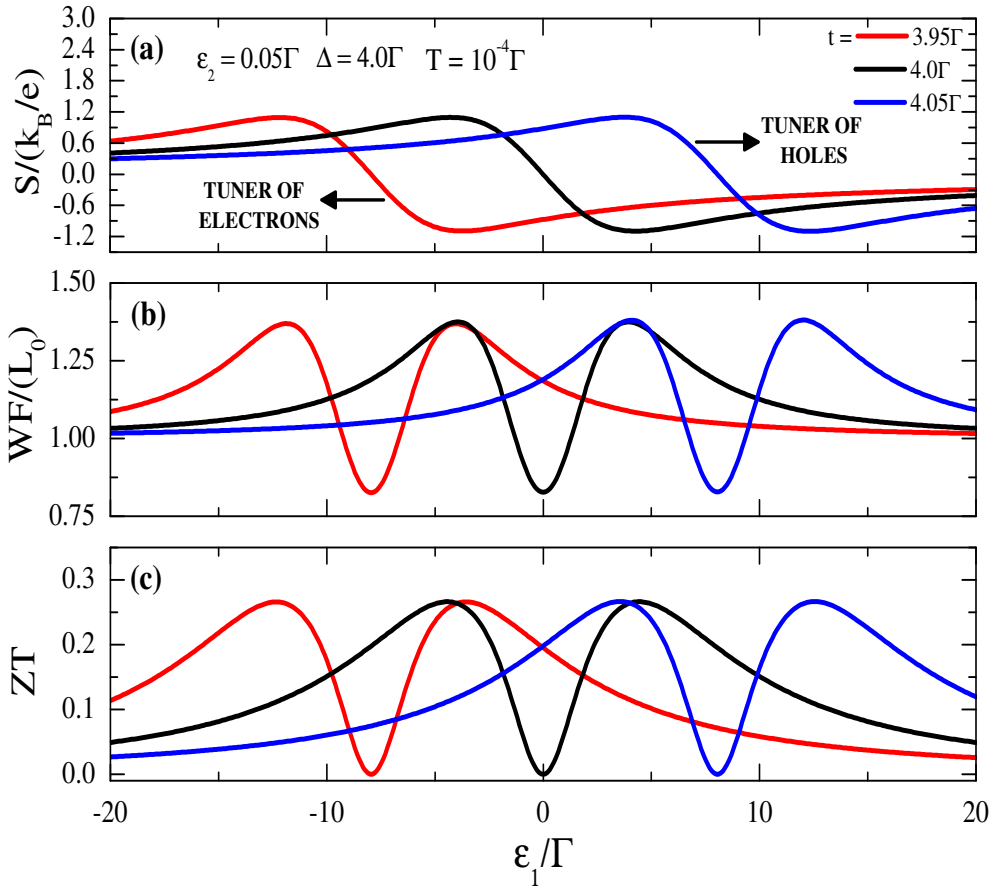

Figura 6.4: Outras propriedades termoelétricas como (a) o "thermopower" (S), (b) a Lei de Wiedmann-Franz (WF) e (c) a figura de mérito (ZT) são sintonizadas por leves desvios da fase $t = \Delta$. Em (a), emerge um filtro altamente eficiente de buracos ou elétrons.

reconhecer uma estrutura central na forma de "olho de gato" em $\varepsilon = 0$ distribuído ao longo do eixo de ε_1 considerando $\varepsilon_2 = 0$ com $\mathcal{T}$ não excedendo metade (0.5), como resultado do estado de meio-férmion, devido ao MF η_A. Contudo, levando em conta ε_2 finito como no painel (b), a estrutura central de (a) se transforma em um perfil de "forquilha dupla", em que as partes superiores e inferiores da forma original de "olho de gato" dividem-se, sendo apenas o ponto $\varepsilon = \varepsilon_1 = 0$ preservado, mas com $\mathcal{T}$ superando metade refletindo o filtro de elétrons na energia de Fermi. Fora do regime $t = \Delta$ como nos painpéis (c) e (d) da mesma figura, o perfil de "forquilha dupla" é deslocado dependendo se $t > \Delta$ (painel (c) com deslocamento para o azul apontado pela seta acima) ou $t < \Delta$ (painel (d) com o deslocamento para vermelho indicado pela seta abaixo). Os arcos são pólos da função de Green do QD.

Como consequência, a resposta ressonante de outras quantidades termoelétricas como o "thermopower" (S), a Lei de Wiedmann-Franz (WF) e a figura de mérito (ZT) encontram-se na Fig.6.4, as quais podem também ser sintonizadas por delicados desvios da fase de fronteira $t = \Delta$. Além disso, como nós podemos ver na Fig.6.4(b), a violação da Lei WF leva ao aumento do ZT (Fig.6.4(c)). Destacamos que, de acordo com o valor do "thermopower" S, no domínio do deslocamento para o azul na Fig.6.4(a), a contribuição majoritária para o fluxo de calor decorre de buracos, como podemos ver no caso $t = 4.05\Gamma$ se considerar que a área sob a curva é predominantemente positiva. Para $t = 3.95\Gamma$ (deslocamento para o vermelho), uma área negativa dominante revela que os elétrons são os principais portadores nesse caso.

Capítulo 7

Conclusões

Em resumo, exploramos teoricamente no regime de voltagem zero, a proposta de um sintonizador termoelétrico assistido por MFs no dispositivo da Fig.1.1. Discutimos que tal sintonizador é viável fixando o coeficiente Δ e variando t com um único QD acoplado aos contatos metálicos, o que corresponde à pequenos desvios da fase que chamamos de fronteira metálica-supercondutora $\Delta = t$ do férmion auxiliar, composto por dois MFs. Essa característica pode ser obtida considerando uma sobreposição finita entre os MFs e avaliando as condutâncias elétrica e térmica como funções do nível de energia do QD. Além do mais, o "thermopower", a lei de Wiedmann-Franz, assim como a figura de mérito, comportam-se similarmente. Para futuras aplicações práticas e tecnológicas, esperamos que nossos resultados atuais possam estimular a construção de novos nanodispositivos topológicos baseados em MFs.

Referências Bibliográficas

[1] J. Alicea, Rep. Prog. Phys. **75**, 076501 (2012).

[2] S. R. Elliott and M. Franz, Rev. Mod. Phys. **87**, 137 (2015).

[3] A. Y. Kitaev, Phys. Usp. **44**, 131 (2001).

[4] A. A. Zyuzin, D. Rainis, J. Klinovaja, and D. Loss, Phys. Rev. Lett. **111**, 056802 (2013).

[5] D. Rainis, J. Klinovaja, L. Trifunovic, and D. Loss, Phys. Rev. B **87**, 024515 (2013).

[6] A. Zazunov, P. Sodano, and R. Egger, New J. Phys **15**, 035033 (2013).

[7] D. Roy, C. J. Bolech, and N. Shah, Phys. Rev. B **86**, 094503 (2012).

[8] V. Mourik, K. Zuo, S. M. Frolov, S. R. Plissard, E. P. A. M. Bakkers, and L. P. Kouwenhoven, Science **336**, 1003 (2012).

[9] M. T. Deng, S. Vaitiekenas, E. B. Hansen, J. Danon, M. Leijnse, K. Flensberg, J. Nygard, P. Krogstrup, and C. M. Marcus, Science **354**, 6319 (2016).

[10] S. N.- Perge, I. K. Drozdov, J. Li, H. Chen, S. Jeon, J. Seo, A. H. MacDonald, B. A. Bernevig, and A. Yazdani, Science **346**, 602 (2014).

[11] R. Pawlak, M. Kisiel, J. Klinovaja, T. Meier, S. Kawai, T. Glatzel, D. Loss, and E. Meyer, Nature Partner Journals Quantum Information **2**, 16035 (2016).

[12] G. Moore and N. Read, Nucl. Phys. B **360**, 362 (1991).

[13] L. Fu, C. L. Kane, and E. J. Mele, Phys. Rev. Lett. **98**, 106803 (2007).

[14] L. Fu and C.L. Kane, Phys. Rev. Lett. **100**, 096407 (2008).

[15] J. D. Sau, R. M. Lutchyn, S. Tewari, and S. Das Sarma, Phys. Rev. Lett. **104**, 040502 (2010).

[16] T. Kawakami and X. Hu, Phys. Rev. Lett. **115**, 177001 (2015).

[17] K. Flensberg, Phys. Rev. Lett. **106**, 090503 (2011).

[18] M. Leijnse and K. Flensberg, Phys. Rev. Lett. **107**, 210502 (2011).

[19] M. Leijnse and K. Flensberg, Phys. Rev. B **86**, 134528 (2012).

[20] F. A. Dessotti, L. S. Ricco, Y. Marques, L. H. Guessi, M. Yoshida, M. S. Figueira, M. de Souza, Pasquale Sodano, and A. C. Seridonio, Phys. Rev. B **94**, 125426 (2016).

[21] L. S. Ricco, Y. Marques, F. A. Dessotti, R. S. Machado, M. de Souza, and A. C. Seridonio, Phys. Rev. B **93**, 165116 (2016).

[22] R. Scheibner, H. Buhmann, D. Reuter, M. N. Kiselev. L. W. Molemkamnp, Phys. Rev. Lett. **95**, 176602 (2005).

[23] R. Scheibner, E. G. Novik, T. Borzenko, M. König, D. Reuter, A. D. Wieck, H. Buhmann, L. W. Molenkamp, Phys. Rev. B. **75**, 041301 (2007).

[24] S. F. Svensson, A. I. Persson, E. A. Hoffmann, N. Nakpathomkun, H. Q. Xu, H. A. Nilsson, H. Q. Xu, L. Samuelson, and H Linke, New Journal of Physics, **14**, 033041 (2012).

[25] S. Donsa, S. Andergassen, and K. Held, Phys. Rev. B **89**, 125103 (2014).

[26] E. A. Hoffmann, H. A. Nilsson, J. E. Matthews, N. Nakpathomkun, A. I. Persson, L. Samuelson, and H. Linke, Nano Letters **9**, 779 (2009).

[27] M. S. Dresselhaus, G. Chen, M. Y. Tang, R. Yang, H. Lee, D. Wang, Z. Ren, J.-P. Fleurial, and P. Gogna, Adv. Materials **19**, 1043 (2007).

[28] S.-Y. Hwang, R. López, and D. Sánchez, Phys. Rev. B **94**, 054506 (2016).

[29] J. P. R. -Andrade, O. Á.- Ovando, P. A. Orellana, S. E. Ulloa, Phys. Rev. B **94**, 155436 (2016).

[30] R. López, M. Lee, L. Serra, and J. S. Lim, Phys. Rev. B **89**, 205418 (2014).

[31] M. Leijnse, New J. Phys. **16**, 015029 (2014).

[32] S. Valentini, R. Fazio, V. Giovannetti, and F. Taddei, Phys. Rev. B **91**, 045430 (2015).

[33] Y. Dubi and M. Di Ventra, Rev. Mod. Phys. **83**, 131 (2011).

[34] D. E. Liu and H. U. Baranger, Phys. Rev. B **84**, 201308(R) (2011). In this work, an effective model for describing the nontrivial phase of the original Kitaev wire is presented. Here, we are not rigorously dealing with the Kitaev Hamiltonian, but we have used this simple version that captures the key features of the topological phase, as for instance the leaking effect found in Ref. [Vernek]. Thus, for a sake of designation, we just call the effective model as topological Kitaev wire.

[35] P. W. Anderson, Phys. Rev. **124**, 41 (1961).

[36] H. Haug and A. P. Jauho, Quantum Kinetics in Transport and Optics of Semiconductors, Springer Series in Solid-State Sciences 123 (Springer, New York, 1996).

[37] L. S. Ricco, Y. Marques, F. A. Dessotti, M. de Souza, and A. C. Seridonio, Phys. E **78**, 25 (2016).

[38] E. Vernek, P. H. Penteado, A. C. Seridonio, and J.C. Egues, Phys. Rev. B **89**, 165314 (2014).