

Programa de Pós-Graduação em Ciência dos
Materiais - Dissertação de Mestrado

Interferência de Fano e uma ligeira flutuação da marca Majorana

Fernando Augusto Dessotti

26/02/2014

Universidade Estadual Paulista
Faculdade de Engenharia de Ilha Solteira - SP
Departamento de Física e Química

UNIVERSIDADE ESTADUAL PAULISTA
Faculdade de Engenharia de Ilha Solteira
Departamento de Física e Química
Pós-Graduação em Ciência dos Materiais

DISSERTAÇÃO DE MESTRADO

INTERFERÊNCIA DE FANO E UMA LIGEIRA FLUTUAÇÃO DA MARCA MAJORANA

FERNANDO AUGUSTO DESSOTTI

Orientador: Prof. Dr. Antonio Carlos Ferreira Seridonio
Co-orientador: Prof. Dr. Ezequiel Costa Siqueira

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

ILHA SOLTEIRA – SP

2014

FICHA CATALOGRÁFICA

Desenvolvido pelo Serviço Técnico de Biblioteca e Documentação

D475i Dessotti, Fernando Augusto.
Interferência de Fano e uma ligeira flutuação da marca Majorana /
Fernando Augusto Dessotti. -- Ilha Solteira: [s.n.], 2014
70 f. : il.

Dissertação (mestrado) - Universidade Estadual Paulista. Faculdade de
Engenharia de Ilha Solteira. Área de conhecimento: Física da Matéria
Condensada, 2014

Orientador: Prof. Dr. Antonio Carlos Ferreira Seridonio
Co-orientador: Prof. Dr. Ezequiel Costa Siqueira
Inclui bibliografia

1. Microscópio de varredura por tunelamento eletrônico. 2. Transporte
quântico. 3. Modelo de Anderson. 4. Férmions de Majorana.

CERTIFICADO DE APROVAÇÃO

TÍTULO: Interferência de Fano e uma ligeira flutuação da marca Majorana

AUTOR: FERNANDO AUGUSTO DESSOTTI

ORIENTADOR: Prof. Dr. ANTONIO CARLOS FERREIRA SERIDONIO

CO-ORIENTADOR: Prof. Dr. EZEQUIEL COSTA SIQUEIRA

Aprovado como parte das exigências para obtenção do Título de Mestre em Ciência dos Materiais ,
Área: FÍSICA DA MATERIA CONDENSADA, pela Comissão Examinadora:

A.C.F. Seridonio

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

K. Yukimitu
Prof. Dr. KEIZO YUKIMITU
Departamento de Física e Química / Faculdade de Engenharia de Ilha Solteira

L. Castilano
Prof. Dr. LEONARDO KLEBER CASTELANO
Departamento de Física / Universidade Federal de São Carlos

Data da realização: 26 de fevereiro de 2014.

Agradecimentos

Inicialmente à Deus, por ter me dado a oportunidade de fazer o que gosto, que é estudar Física.

À minha família, meus pais Laerte Dessotti e Eliamar Ventura Ribeiro Dessotti e meu irmão Cássio Dessotti, pela força e apoio que recebi nos momentos de maior dificuldade e tolerância em meus momentos de ausência. Além de todo o amor e incentivo para que eu sempre me mantenha firme nos estudos.

À minha namorada, Domenica Maria Marini, pelo amor e carinho recebido durante a realização desse projeto, companheirismo em todos os momentos e também pela tolerância em meus momentos de ausência.

Aos meus orientadores, Profs. Drs. Antonio Carlos Ferreira Seridonio e Ezequiel Costa Siqueira, por tudo que me ensinaram, pela paciência, compreensão e dedicação para comigo. Além da amizade construída no decorrer desse projeto.

Aos meus grandes amigos que me ajudaram ao longo desse árduo percurso auxiliando em todos os momentos de real necessidade, Douglas Silva Maioli, Luiz Antonio Valder Filho, Rodolfo Cesar Cestari, Thais Regina Garcia.

Por fim agradeço à CAPES pelo apoio financeiro.

Lista de Figuras

- 1.1 Duas perspectivas do mesmo aparato: no painel (a) temos a visão superior, enquanto em (b) temos a visão lateral. Em ambas, os estados ligados de Majorana (MBSs) aparecem residindo em uma longa cadeia de Kitaev em sua fase topológica [lado direito dos painéis (a) e (b)], que podem ser realizados como proposto experimentalmente na Ref. [24]: supercondutividade do tipo "s" induz supercondutividade do tipo "p" em um fio semicondutor com forte interação spin-órbita (SO) e atravessado por um campo magnético perpendicular \vec{B} . Aqui nós seguimos tal proposta adicionando uma ponta de STM próxima a superfície metálica acoplada a dois átomos adsorvidos, onde um deles está hibridizado com o MBS 1 (meio estado eletrônico). O MBS 1 está conectado ao MBS 2. As pontas de AFM são empregadas para sintonizar os níveis de energia dos átomos adsorvidos e este dispositivo explora a quebra de simetria na interferência Fano, que é detectada via condutância de baixas voltagens. Os parâmetros q_0 e q_b são fatores de Fano devido a interferência entre os diferentes caminhos dos elétrons da ponta até a superfície. Quando $q_b \gg 1$ a hibridização entre a ponta e os átomos adsorvidos é mais forte que a hibridização com a superfície. Nesse caso os elétrons tunelam para a superfície utilizando os átomos adsorvidos. Em contraste, para $q_b = 0$ os elétrons tunelam diretamente para a superfície. O círculo de cor verde representa o sítio do hospedeiro acoplado lateralmente aos átomos adsorvidos. 6
- 2.1 Representação esquemática da fase trivial [1]. Os círculos de cor vermelha representam os férmions de Majorana, as barras de cor roxa representam os acoplamentos entre eles, e as elipses de cor lilás representam os sítios da rede. 10

2.2 Representação esquemática da fase topológica [1]. Os círculos de cor vermelha representam os férmions de Majorana, as barras de cor roxa representam os acoplamentos entre eles, e as elipses de cor lilás representam os sítios da rede. 11

6.1 Parâmetros empregados: $\varepsilon_M = 0$ [cadeia longa de Kitaev], $\lambda = 5\Delta$ e $\Delta = 0.2$ [ver Eqs. (3.2) e (4.44)]. Transmitância $T_{full}(\varepsilon)$ determinada pela Eq. (4.52) no regime Fano $q_b = 0$ [Eq. (4.55)] como função da energia ε de uma única partícula. A curva sólida em verde é para o aparato da Figura 1.1 na ausência do MBS 1. Implementação do procedimento de dois estágios do Capítulo 1: $\varepsilon_1 = -2.5$ e $\varepsilon_2 = +2.5$: a curva pontilhada de cor azul corresponde ao sistema acoplado ao MBS 1. 29

6.2 Parâmetros empregados: $\varepsilon_M = 0$ [cadeia longa de Kitaev], $\lambda = 5\Delta$ e $\Delta = 0.2$ [ver Eqs. (3.2) e (4.44)]. Transmitância $T_{full}(\varepsilon)$ determinada pela Eq. (4.52) no regime Fano $q_b = 0$ [Eq. (4.55)] como função da energia ε de uma única partícula. A curva sólida em verde é para o aparato da Figura 1.1 na ausência do MBS 1. Implementação do procedimento de dois estágios do Capítulo 1: $\varepsilon_1 = +2.5$ e $\varepsilon_2 = -2.5$: a curva pontilhada de cor vermelha corresponde ao sistema acoplado ao MBS 1. Em combinação com a Figura 6.1, temos aqui o principal resultado desse procedimento: a formação de uma anti-ressonância Majorana com uma amplitude que flutua levemente ao redor de $1/2$, mas ela permanece localizada no valor zero da voltagem mesmo realizando a inversão das voltagens. As anti-ressonâncias satélites não compartilham tal característica, elas sofrem um deslocamento lateral devido a permutação dos níveis dos átomos adsorvidos. 30

6.3 Parâmetros empregados: $\varepsilon_M = 0$ [cadeia longa de Kitaev], $\lambda = 5\Delta$ e $\Delta = \Gamma = 0.2$ [ver Eqs. (3.2), (3.8) e (4.44)]. Transmitância como função da energia ε de uma única partícula. Implementação do procedimento de dois estágios do Capítulo 1: a transmitância $T_{full}(\varepsilon)$ da Eq. (4.52) no regime Fano $q_b = 0$ [Eq. (4.55)], onde vemos a formação de uma anti-ressonância Majorana com uma amplitude que flutua levemente em torno de $1/2$ (marca Majorana), mas ela permanece localizada no valor zero da voltagem mesmo com a realização da inversão das voltagens. 31

6.4 Parâmetros empregados: $\varepsilon_M = 0$ [cadeia longa de Kitaev], $\lambda = 5\Delta$ e $\Delta = \Gamma = 0.2$ [ver Eqs. (3.2), (3.8) e (4.44)]. Transmitância como função da energia ε de uma única partícula. Implementação do procedimento de dois estágios do Capítulo 1: a transmitância $T_{probe}(\varepsilon)$ da Eq. (4.16) para $q_0 = 0$ [Eq. (3.9)] não exibe flutuação da marca Majorana. A marca Majorana permanece imutável considerando a ponta de STM como uma sonda. 32

6.5 Parâmetros empregados: $\varepsilon_M = 0$ [cadeia longa de Kitaev], $\lambda = 5\Delta$ e $\Delta = \Gamma = 0.2$ [ver Eqs. (3.2), (3.8) e (4.44)]. Transmitância $T_{full}(0)$ da Eq. (4.52) no regime Fano $q_b = 0$ [Eq. (4.55)] como função da separação simétrica $\Delta\varepsilon = \varepsilon_2 - \varepsilon_1$. Para a ponta de STM no mesmo pé de igualdade do sistema "hospedeiro+átomos adsorvidos", nós notamos uma nova característica no perfil da transmitância: uma curva Fano diferente do esperado emerge e a anti-ressonância de Fano não é observada. 33

6.6 Parâmetros empregados: $\varepsilon_M = 0$ [cadeia longa de Kitaev], $\lambda = 5\Delta$ e $\Delta = \Gamma = 0.2$ [ver Eqs. (3.2), (3.8) e (4.44)]. No caso da ponta de STM como sonda, a transmitância $T_{probe}(0)$ da Eq. (4.16) com $q_0 = 0$ [Eq. (3.9)] leva a uma anti-ressonância de Fano padrão. Nós observamos que apesar da pequena diferença entre as anti-ressonâncias Majorana da Figura 6.3 e Figura 6.4, a transmitância de baixas voltagens em função da separação simétrica, produz duas curvas distintas. Contudo, em ambas as situações, a transmitância não excede uma amplitude de $1/2$ 34

- 6.7 Parâmetros empregados: $\varepsilon_M = 0$ [cadeia longa de Kitaev], $\Delta = 0.2$ [ver Eqs. (3.2) e (4.44)]. Curvas de densidade da transmitância $T_{full}(\varepsilon)$ determinada pela Eq. (4.52) no regime Fano $q_b = 0$ [Eq. (4.55)] como função da energia ε de uma única partícula e do acoplamento λ em unidades de Δ . Implementação do procedimento de dois estágios do Capítulo 1: (a) $\Delta\varepsilon = +5$ (b) $\Delta\varepsilon = -5$. Aqui temos o principal resultado desse procedimento: a formação de uma anti-ressonância Majorana (em preto) cravada no valor zero da voltagem mesmo com a inversão das voltagens. As anti-ressonâncias satélites (também em preto) não compartilham tal característica, sendo significativamente deslocadas sob a permutação dos níveis de energia dos átomos adsorvidos. 35

Sumário

Resumo

Abstract

1	Introdução	1
2	Modelo de Kitaev	7
2.1	Fase trivial	9
2.2	Fase topológica	10
3	Modelo teórico	12
3.1	Hamiltoniano	12
4	Cálculo da Transmitância	15
4.1	A ponta do STM como uma sonda	15
4.2	A ponta do STM no mesmo pé de igualdade do sistema "hospedeiro+átomos adsorvidos"	17
5	Funções de Green dos átomos adsorvidos	25
6	Resultados	28
7	Conclusão	36
	Referências Bibliográficas	37
8	Apêndice	40
8.1	Funções de Green dos átomos adsorvidos	40

Resumo

De acordo com o Phys. Rev. B 84, 201308(R) (2011), um estado de Majorana isolado na borda de uma longa cadeia de Kitaev em sua fase topológica e conectado a um ponto quântico, resulta em uma transmitância robusta de $1/2$ no valor zero da voltagem. Neste trabalho, nós mostramos que a remoção de tal marca pode ser alcançada utilizando uma superfície metálica hospedando dois átomos adsorvidos em um cenário onde ocorre uma quebra de simetria no efeito Fano de tal sistema, que é realizável acoplando-se a cadeia de Kitaev a um desses átomos adsorvidos.

Assim, a fim de detectar essa característica experimentalmente, deve-se aplicar o seguinte procedimento de dois estágios: (i) primeiro, em relação aos átomos adsorvidos, é necessário fixar pontas de AFM em valores opostos de voltagem (separação simétrica dos níveis $\Delta\varepsilon$) e medir, através de uma ponta de STM, a condutância para baixas voltagens; (ii) depois disso, a medida de condutância deve ser repetida com as voltagens invertidas. Para $|\Delta\varepsilon|$ longe do nível de energia de Fermi e para o caso de acoplamento forte entre a ponta de STM e o hospedeiro, esta estrutura revela na transmitância, uma anti-ressonância persistente localizada na voltagem zero e imune sob a permutação citada anteriormente, mas caracterizada por uma amplitude que flutua levemente ao redor de $1/2$. Entretanto, no caso da ponta de STM atuando como uma sonda, o átomo adsorvido desacoplado da cadeia de Kitaev se torna completamente inerte e nenhuma flutuação é observada. Por consequência, a ponta de STM deve ser considerada no mesmo pé de igualdade com o sistema "hospedeiro+átomos adsorvidos". Como resultado, nós verificamos que apesar da pequena diferença entre essas duas anti-ressonâncias de Majorana, a transmitância de baixas voltagens como função da separação simétrica produz dois comportamentos distintos, na qual um deles não é predito segundo a teoria padrão de Fano. Por esse motivo, para se acessar tal padrão não trivial de interferência Fano, a hipótese da ponta de STM atuando como sonda deve ser descartada.

Palavras-chave: Microscópio de Varredura por Tunelamento Eletrônico, Transporte Quântico, Modelo de Anderson, Férmions de Majorana

Abstract

According to the Phys. Rev. B 84, 201308(R) (2011), an isolated Majorana state bound to one edge of a long enough Kitaev chain in the topological phase and connected to a quantum dot, results in a robust transmittance of $1/2$ at zero-bias. In this work, we show that the removal of such a hallmark can be achieved by using a metallic surface hosting two adatoms in a scenario where there is a lack of symmetry in the Fano effect, which is feasible by coupling the Kitaev chain to one of these adatoms. Thus in order to detect this feature experimentally, one should apply the following two-stage procedure: (i) first, attached to the adatoms, one has to lock AFM tips in opposite gate voltages (symmetric detuning of the levels $\Delta\varepsilon$) and measure by an STM tip, the zero-bias conductance; (ii) thereafter, the measurement of the conductance is repeated with the gates swapped. For $|\Delta\varepsilon|$ away from the Fermi energy and in the case of strong coupling tip-host, this approach reveals in the transmittance, a persistent dip placed at zero-bias and immune to the aforementioned permutation, but characterized by an amplitude that fluctuates slightly around $1/2$. However, in the case of a tip acting as a probe, the adatom decoupled from the Kitaev chain becomes completely inert and no fluctuation is observed. Therefore, the STM tip must be considered in the same footing as the “host+adatoms” system. As a result, we have found that despite the small difference between these two Majorana dips, the zero-bias transmittance as a function of the symmetric detuning yields two distinct behaviors, in which one of them is unpredictable by the standard Fano’s theory. Therefore, to access such a non trivial pattern of Fano interference, the hypothesis of the STM tip acting as a probe should be discarded.

Keywords: Scanning Tunneling Microscope, Quantum Transport, Anderson Model, Majorana Fermions

1 Introdução

Férmions de Majorana são partículas que constituem suas próprias antipartículas. Tal proposta foi feita há quase um século pelo físico italiano Ettore Majorana no contexto da Física de altas energias. Em sistemas de estado sólido, essas partículas exóticas não são fundamentais mas emergem como excitações de quasipartículas [1]. Essa espécie de excitação é considerada como anyons não-Abelianos e obedecem a uma estatística quântica diferente da usual. Sua propriedade mais notável está na possibilidade de se ligar dois férmions de Majorana distantes um do outro, definindo assim, um único férmion de Dirac não local. Uma vez que esse estado delocalizado é ocupado, ele produz um qubit robusto desacoplado do meio, evitando assim decoerência devido a interferências externas. Esse qubit protegido amplia portanto a possibilidade da realização experimental da computação quântica topológica. Assim, nos últimos anos a busca por dispositivos utilizando férmions de Majorana têm recebido muita atenção das comunidades de pesquisadores que trabalham com computação quântica [2-6].

Para um melhor entendimento, o estado supercondutor (SC) é considerado adequado para o surgimento de Majoranas. A supercondutividade reside na condensação de pares de Cooper e quebra espontânea na conservação de carga, conduzindo assim a superposição de elétrons e buracos. Portanto, supercondutividade do tipo "s" surge com elétrons com spins opostos que resultam em operadores distintos para criação e aniquilação de quasipartículas, evitando dessa forma, a realização de estados ligados de Majorana (MBSs, do inglês Majorana bound states). Para obtê-los, um supercondutor com elétrons sem spin é de fato necessário. Tais condições podem ser encontradas na fase topológica da cadeia de Kitaev [7], que oferece o ambiente adequado para o aparecimento dos MBSs. Os Majoranas possuem energia zero e para esse caso em particular, estão localizados nas bordas da cadeia.

A engenharia de uma amostra com supercondutividade do tipo "p" pode ser realizada experimentalmente por meio do efeito de proximidade. Sabe-se que um supercondutor do tipo "s" próximo a um fio semiconductor com forte interação spin-

órbita e atravessado por um campo magnético induz supercondutividade do tipo "p" no fio semiconductor [8-16]. Adicionalmente, a existência dos MBSs são preditos no estado Hall quântico fracionário com fator de preenchimento $\nu = 5/2$ [17], em isolantes topológicos tridimensionais [18], e em núcleos de vórtices supercondutores [19-21]. Nesse cenário, o transporte quântico torna-se uma ferramenta sensível para detectar as quasipartículas de Majorana. Particularmente na Ref. [22], foi previsto para um dispositivo experimental de um único ponto quântico (QD, do inglês quantum dot) acoplado lateralmente a um estado de Majorana, que o pico centrado no zero da voltagem (ZBP, do inglês zero-bias peak) da condutância deve ser dado pela marca Majorana $\mathcal{G} = 0.5\mathcal{G}_0$, onde $\mathcal{G}_0 = e^2/h$ é a condutância de fundo. É importante ressaltar que na Ref. [23], E. Vernek et al. determinaram que tal amplitude surge devido a um vazamento do estado de Majorana para o estado do ponto quântico.

Experimentalmente, um ZBP persistente tem sido observado em medidas de transporte através de um dispositivo composto por um nanofio de antimoneto de índio fundido com ouro e nitrato de titânio com nióbio [24]. Tal robustez do ZBP tem sido encontrada também em sistemas análogos de um supercondutor de alumínio próximo de um nanofio de arseneto de índio [25]. Nesse sistema da Ref. [24], acredita-se que Majoranas existam devido ao ZBP que resiste a campos magnéticos e voltagens de portas. Nesse trabalho, os autores fizeram a engenharia utilizando os ingredientes necessários para o surgimento dos Majoranas no nanofio, utilizando a superfície supercondutora do tipo "s" como terminal, utilizando outro terminal normal, juntamente com voltagens de portas fizeram medidas de condutância diferencial no sistema. Definida como $G = \frac{\partial I}{\partial \varphi}$, essa quantidade é diretamente proporcional a densidade de estados, e na curva de densidade de estados dos Majoranas há um pico de ressonância no valor zero da energia, dessa forma, uma medida de condutância realizada no sistema com os Majoranas deveria surgir um pico de ressonância no valor zero da voltagem, que é justamente o que foi medido pelos autores, concluindo, dessa forma, que os Majoranas realmente existem. Porém, conclusão diferente foi tirada pela comunidade científica, pois sabe-se que existe outro fenômeno físico que pode gerar o mesmo pico, o efeito Kondo [26-33], resultando assim em um resultado inconclusivo a fim de verificar a existência dos Majoranas.

E após nosso conhecimento dos principais trabalhos já realizados na área dos Majoranas, tanto teóricos como experimentais, temos como objetivo propor um sistema, que seja realizável experimentalmente, e através de medidas verificar se essas quasipartículas realmente existem, verificar qual seria de fato a marca Majorana no

sistema. É importante ressaltar também que, quando utilizamos o termo "marca Majorana" estamos nos referindo a conclusão obtida pelo autores da Ref. [22], onde a marca Majorana é o valor de $1/2$ na condutância diferencial localizada no nível de Fermi.

Nesse contexto, um aparato baseado no efeito Fano [34, 35] torna-se uma abordagem alternativa para se detectar um estado de Majorana. Aqui nós nos beneficiamos desse mecanismo, um fenômeno de interferência encontrado em sistemas nos quais canais de tunelamento competem entre si pelo transporte eletrônico. Esse efeito pode ser detectado utilizando-se um microscópio de varredura por tunelamento de elétrons (STM, do inglês Scanning Tunneling Microscope), um dispositivo feito por uma ponta metálica que detecta, para temperaturas suficientemente baixas, a transmitância através do sistema por meio da medida de condutância diferencial [29-33]. Assim, nós estudamos a condutância de baixas voltagens sondada por uma ponta de STM de uma superfície metálica acoplada a dois átomos adsorvidos, onde um deles está acoplado ao estado de Majorana hospedado em uma longa cadeia de Kitaev em sua fase topológica. É importante ressaltar que atualmente tal cadeia é realizável experimentalmente como mostra a Ref. [24], tornando-se, dessa forma, elegível para nossa proposta [ver Figura 1.1]. A observável de grande interesse em nosso trabalho é a transmitância, mas não é ela que é a observável medida em laboratório, mas sim a condutância diferencial, quantidade que é proporcional a transmitância. Fizemos análises da transmitância sob dois pontos de vista em relação a ponta do STM, na qual em uma delas a ponta do STM atua como sonda, ela mede a condutância mas sem interferir no sistema. Em termos de Hamiltoniano, o Hamiltoniano da ponta é um termo perturbativo. E no outro caso analisado, é a ponta no mesmo pé de igualdade do sistema "hospedeiro+átomos adsorvidos", onde nesse caso, a expressão da ponta entra no Hamiltoniano, como o próprio nome já diz, no mesmo pé de igualdade do restante do sistema, estando fortemente hibridizada com o sistema "hospedeiro+átomos adsorvidos".

Adicionalmente, nós consideramos no modelo dois Microscópios de Força Atômica, (AFM, do inglês Atomic Force Microscope) acoplados capacitivamente aos átomos adsorvidos, somente a fim de ajustar seus níveis de energia como proposto na Ref. [36]. Nossa abordagem emprega o Hamiltoniano sem spin da Ref. [22] em combinação com o procedimento da equação de movimento nas funções de Green.

Determinando a transmitância desse dispositivo, nós encontramos perfis Fano devido ao acoplamento entre o dispositivo dos átomos adsorvidos e o MBS isolado.

Para o dispositivo desacoplado do MBS, as funções de Green diretas e mistas são simétricas com respeito aos índices 1 e 2 que designam os parâmetros dos átomos adsorvidos. No limite oposto, essa propriedade de simetria é quebrada e a troca dos índices 1 por 2 e vice-versa conduz a uma quebra de simetria no perfil Fano.

Essa quebra de simetria pode ser acessada experimentalmente realizando-se o seguinte procedimento de dois estágios: (i) primeiro, em relação aos átomos adsorvidos, é necessário fixar pontas de AFM em valores opostos de voltagem (separação simétrica dos níveis $\Delta\epsilon$) e medir, através de uma ponta de STM, a condutância para baixas voltagens; (ii) depois disso, a medida de condutância deve ser repetida com as voltagens invertidas.

Como resultado desse método assim como do regime Fano, a transmitância para $|\Delta\epsilon|$ longe do nível de Fermi exibe uma anti-ressonância localizada no nível zero da energia persistente contra a permutação das voltagens. Para o caso em que o STM atua como sonda da densidade local de estados (LDOS, do inglês Local Density of States) para o sistema "hospedeiro+átomos adsorvidos", o átomo adsorvido desacoplado da cadeia de Kitaev não desempenha nenhum papel no sistema e a típica marca Majorana é verificada: uma transmitância no nível zero da voltagem, robusta e caracterizada por uma amplitude de $1/2$, assim como aquela encontrada na Ref. [22] para um dispositivo com um único ponto quântico. Por outro lado, para o STM no mesmo pé de igualdade do sistema "hospedeiro+átomos adsorvidos", uma leve flutuação ao redor da amplitude de $1/2$ manifesta-se como um resultado direto do procedimento de dois estágios. Entretanto, apesar da pequena diferença entre essas duas anti-ressonâncias de Majorana, cada uma conduz para uma forma particular de perfil Fano para a transmitância de baixas voltagens como função da separação simétrica. Portanto, nós demonstramos neste trabalho que a hipótese da utilização do STM como uma sonda não é suficiente para revelar o padrão inesperado da interferência Fano para o dispositivo proposto na Figura 1.1.

Esta dissertação está organizada da seguinte maneira. No Capítulo 2, apresentamos o modelo de Kitaev, o modelo que sustenta a existência dos férmions de Majorana. Fazemos uma introdução ao Hamiltoniano deste sistema no Capítulo 3. No Capítulo 4 fazemos os cálculos da transmitância do sistema para os dois casos pertinentes, a ponta do STM como sonda e a ponta do STM no mesmo pé de igualdade do sistema "hospedeiro+átomos adsorvidos". As funções de Green que determinam a transmitância são calculadas no Capítulo 5. No Capítulo 6, discutimos os resultados obtidos e a conclusão é apresentada no Capítulo 7. E temos no

apêndice um detalhamento do cálculo das funções de Green dos átomos adsorvidos, juntamente com o artigo resultado dessa dissertação, o qual foi aceito pelo Journal of Applied Physics (JAP).

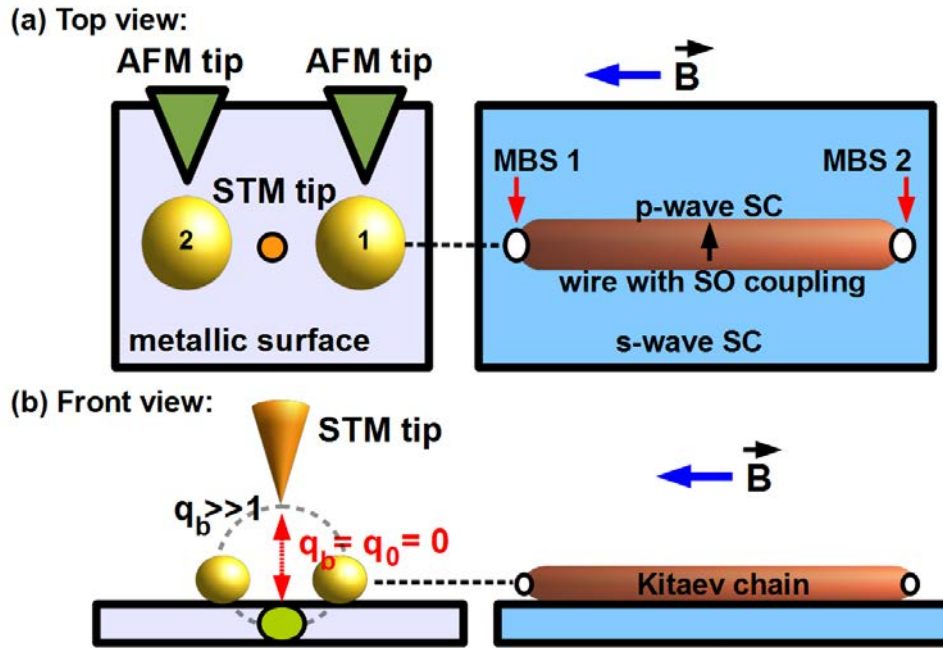


Figura 1.1: Duas perspectivas do mesmo aparato: no painel (a) temos a visão superior, enquanto em (b) temos a visão lateral. Em ambas, os estados ligados de Majorana (MBSs) aparecem residindo em uma longa cadeia de Kitaev em sua fase topológica [lado direito dos painéis (a) e (b)], que podem ser realizados como proposto experimentalmente na Ref. [24]: supercondutividade do tipo "s" induz supercondutividade do tipo "p" em um fio semicondutor com forte interação spin-órbita (SO) e atravessado por um campo magnético perpendicular \vec{B} . Aqui nós seguimos tal proposta adicionando uma ponta de STM próxima a superfície metálica acoplada a dois átomos adsorvidos, onde um deles está hibridizado com o MBS 1 (meio estado eletrônico). O MBS 1 está conectado ao MBS 2. As pontas de AFM são empregadas para sintonizar os níveis de energia dos átomos adsorvidos e este dispositivo explora a quebra de simetria na interferência Fano, que é detectada via condutância de baixas voltagens. Os parâmetros q_0 e q_b são fatores de Fano devido a interferência entre os diferentes caminhos dos elétrons da ponta até a superfície. Quando $q_b \gg 1$ a hibridização entre a ponta e os átomos adsorvidos é mais forte que a hibridização com a superfície. Nesse caso os elétrons tunelam para a superfície utilizando os átomos adsorvidos. Em contraste, para $q_b = 0$ os elétrons tunelam diretamente para a superfície. O círculo de cor verde representa o sítio do hospedeiro acoplado lateralmente aos átomos adsorvidos.

2 Modelo de Kitaev

Nós começamos com a revisão do modelo de Kitaev, para um supercondutor 1D do tipo "p" e com elétrons sem spin [1]. O modelo tem várias virtudes incluindo o fato de que os férmions de Majorana (modo zero) aparecem numa forma extremamente simples. Seguindo Kitaev, introduzimos o seguinte Hamiltoniano

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

onde μ é o potencial químico, t é o acoplamento entre vizinhos mais próximos, Δ é a amplitude de pareamento do tipo "p" e ϕ é a fase supercondutora correspondente. Por simplicidade, nós ajustamos a constante de rede a unidade.

Os operadores fermiônicos c_x do Hamiltoniano original da Eq. (2.1) podem ser decompostos em termos de dois férmions de Majorana, utilizando-se a seguinte transformação

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

e

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

onde os operadores do lado direito obedecem as relações canônicas dos férmions de Majorana

$$\gamma_{\alpha,x} = \gamma_{\alpha,x}^\dagger \quad (2.4)$$

e

$$\{\gamma_{\alpha,x}, \gamma_{\alpha',x'}\} = 2\delta_{\alpha\alpha'}\delta_{xx'}. \quad (2.5)$$

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 no Hamiltoniano da Eq. (2.1), temos

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

Simplificando, temos

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

Simplificando mais uma vez, temos

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

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

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

Simplificando, temos

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

Por fim, o Hamiltoniano de Kitaev, escrito utilizando os operadores de Majorana, fica escrito da seguinte forma

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

2.1 Fase trivial

O primeiro caso limite corresponde a $\mu \neq 0$ e $t = \Delta = 0$, onde esta é conhecida como fase trivial. Aqui, o segundo termo da Eq. (2.12) se cancela, deixando somente o acoplamento entre os Majoranas $\gamma_{A,x}$ e $\gamma_{B,x}$ do mesmo sítio da rede. Neste caso, o

Hamiltoniano fica escrito da seguinte forma

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

A Figura 2.1 é uma representação para este caso.

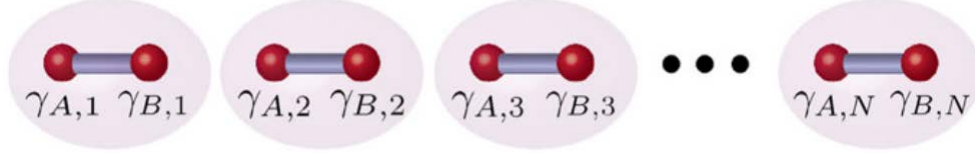


Figura 2.1: Representação esquemática da fase trivial [1]. Os círculos de cor vermelha representam os férmions de Majorana, as barras de cor roxa representam os acoplamentos entre eles, e as elipses de cor lilás representam os sítios da rede.

2.2 Fase topológica

O segundo caso limite corresponde à seguinte situação: $\mu = 0$ e $t = \Delta \neq 0$ quando surge a fase topológica. O primeiro termo do Hamiltoniano da Eq. (2.12) se anula, juntamente com parte do segundo, restando o seguinte termo

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

onde estão acoplados os Majoranas de sítios adjacentes, $\gamma_{B,x}$ e $\gamma_{A,x+1}$. O fato mais marcante desse caso são os dois férmions de Majorana que aparecem isolados nas bordas da cadeia, $\gamma_{A,1}$ e $\gamma_{B,N}$. É devido a esses férmions isolados, desacoplados do meio, que os pesquisadores vem dando considerável atenção, pois acredita-se na possibilidade de criação de qubits utilizando-se esses Majoranas. A Figura 2.2 é uma representação para este caso.

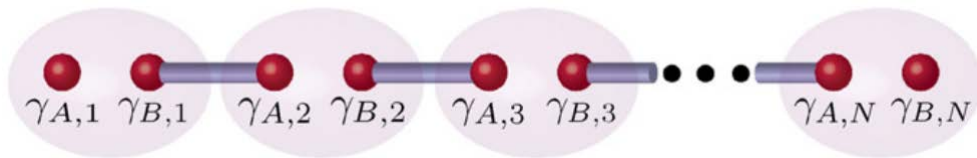


Figura 2.2: Representação esquemática da fase topológica [1]. Os círculos de cor vermelha representam os férmions de Majorana, as barras de cor roxa representam os acoplamentos entre eles, e as elipses de cor lilás representam os sítios da rede.

3 Modelo teórico

3.1 Hamiltoniano

O sistema que investigamos é descrito de acordo com o seguinte Hamiltoniano

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_{host+ads} + \mathcal{H}_{tip} + \mathcal{H}_{tun}. \quad (3.1)$$

A fim de simular o sistema esboçado na Figura 1.1, nós seguimos o Hamiltoniano proposto por Liu et al. [22] levando em conta dois átomos adsorvido

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{host+ads} = & \sum_k (\varepsilon_k - \mu_{host}) c_k^\dagger c_k + \sum_j \varepsilon_j d_j^\dagger d_j + \sum_{jk} V (c_k^\dagger d_j + H.c.) \\ & + i\epsilon_M \eta_1 \eta_2 + \lambda (d_1 - d_1^\dagger) \eta_1, \end{aligned} \quad (3.2)$$

onde os elétrons no hospedeiro são descritos pelos operadores c_k^\dagger para a criação e c_k para a aniquilação de um elétron no estado quântico indexado pelo número de onda k , energia ε_k , e potencial químico μ_{host} . Para os átomos adsorvidos, d_j^\dagger cria e d_j aniquila um elétron no átomo adsorvido j , onde $j = 1, 2$ com energia ε_j . V é a energia de hibridização entre os átomos adsorvidos e o hospedeiro. Em particular para $j = 1$, o átomo adsorvido 1 está acoplado ao MBS 1 descrito pelo operador $\eta_1^\dagger = \eta_1$. A intensidade desse acoplamento é λ . O MBS 2 dado por $\eta_2^\dagger = \eta_2$ é conectado ao MBS 1 por meio do coeficiente $\epsilon_M \sim e^{-L/\xi}$, onde L é a distância entre os MBSs e ξ é o comprimento de coerência. É importante mencionar que o presente modelo sem spin supõe um forte campo magnético atravessando todo o sistema, que leva a um forte desdobramento Zeeman entre os níveis de energia, onde os níveis mais altos não são energeticamente favoráveis a baixas temperaturas. Nessa situação, uma componente de spin não desempenha nenhum papel, e dessa forma o grau de liberdade de spin pode ser ignorado.

A segunda parte da Eq. (3.1) é descrito pelo Hamiltoniano da ponta do STM

$$\mathcal{H}_{tip} = \sum_q (\varepsilon_q - \mu_{tip}) b_q^\dagger b_q, \quad (3.3)$$

que corresponde aos elétrons livres governados pelos operadores fermiônicos b_q^\dagger que cria um elétron e b_q que destrói um elétron na ponta do STM, com energia ε_q e potencial químico μ_{tip} . Para realizar o acoplamento entre as Eqs. (3.2) e (3.3), precisamos definir o Hamiltoniano de tunelamento

$$\mathcal{H}_{tun} = w \left(f_t^\dagger \Psi_0 + H.c. \right), \quad (3.4)$$

onde w é a energia de hibridização entre a ponta do STM e o hospedeiro,

$$f_t = \sum_q b_q \quad (3.5)$$

é o operador de campo para a borda da ponta do STM,

$$\Psi_0 = f_0 + (\pi\Gamma\rho_0)^{1/2} q_0 \sum_j d_j \quad (3.6)$$

é o operador de campo que leva em consideração a interferência de Fano,

$$f_0 = \sum_k c_k \quad (3.7)$$

representa o sítio do hospedeiro acoplado lateralmente aos átomos adsorvidos [ver círculo de cor verde do hospedeiro esboçado na Figura 1.1],

$$\Gamma = \pi V^2 \rho_0 \quad (3.8)$$

é o parâmetro de Anderson, com $\rho_0 = \frac{1}{2D}$ como a densidade de estados da superfície sem os átomos adsorvidos, D é a semi largura de banda e

$$q_0 = (\pi\Gamma\rho_0)^{-1/2} \left(\frac{\tilde{V}}{w} \right) \quad (3.9)$$

é o fator de interferência de Fano [37], onde \tilde{V} é o acoplamento entre a ponta do STM e os átomos adsorvidos. Perceba que devido as Eqs. (3.6) e (3.9), o limite $q_0 \gg 1$ representa a situação na qual a ponta do STM está fortemente hibridizada com

os átomos adsorvidos, enquanto no regime oposto $q_0 = 0$, a ponta está fortemente hibridizada com a superfície [ver Figura 1.1]. Como o primeiro caso ainda obedece a teoria padrão de Fano, neste trabalho nós trataremos apenas o último caso, onde encontramos uma interferência de Fano não trivial. Tal questão será discutida no Capítulo 6.

4 Cálculo da Transmitância

4.1 A ponta do STM como uma sonda

Aplicando a teoria de resposta linear, onde a ponta do STM é considerada uma sonda, é possível mostrar que a condutância de baixas voltagens é dada por

$$\mathcal{G}(0) = \frac{e^2}{h} (2\pi w)^2 \int \rho_{\text{LDOS}}(\varepsilon) \rho_{\text{tip}}(\varepsilon) \left(-\frac{\partial f_F}{\partial \varepsilon} \right) d\varepsilon, \quad (4.1)$$

onde e é carga eletrônica, h a constante de Planck, $\rho_{\text{LDOS}}(\varepsilon)$ é a LDOS do sistema "hospedeiro+átomos adsorvidos", $\rho_{\text{tip}}(\varepsilon)$ é a DOS da ponta do STM e f_F é a distribuição de Fermi-Dirac. A transmitância total é definida como segue

$$\mathcal{T}_{\text{probe}}(\varepsilon) = (2\pi w)^2 \rho_{\text{LDOS}}(\varepsilon) \rho_{\text{tip}}(\varepsilon). \quad (4.2)$$

Para obter a LDOS, seguimos a Ref. [36] introduzindo a função de Green retardada

$$\mathcal{R}_{\psi_0\psi_0} = -\frac{i}{\hbar} \theta(t) \text{Tr} \{ \varrho_{\text{host+ads}} [\psi_0(t), \psi_0^\dagger(0)]_+ \} \quad (4.3)$$

para o operador de campo da Eq. (3.6) no tempo t , onde $\theta(t)$ é a função degrau, $\rho_{\text{host+ads}}$ é a matriz densidade do sistema descrito pelo Hamiltoniano da Eq. (3.2) e $[\dots, \dots]_+$ é o anticomutador da Eq. (3.6) em tempos distintos. Da Eq. (4.3), a LDOS do hospedeiro pode ser obtida como

$$\rho_{\text{LDOS}}(\varepsilon) = -\frac{1}{\pi} \text{Im}(\tilde{\mathcal{R}}_{\psi_0\psi_0}), \quad (4.4)$$

onde $\tilde{\mathcal{R}}_{\psi_0\psi_0}$ é a transformada de Fourier de $\mathcal{R}_{\psi_0\psi_0}$ no domínio de energia ε . Analogamente, tem

$$\rho_{\text{tip}}(\varepsilon) = -\frac{1}{\pi} \text{Im}(\tilde{\mathcal{R}}_{f_t f_t}), \quad (4.5)$$

com

$$\mathcal{R}_{f_t f_t} = -\frac{i}{\hbar} \theta(t) \text{Tr}\{\varrho_{\text{tip}}[f_t(t), f_t^\dagger(0)]_+\}, \quad (4.6)$$

onde ϱ_{tip} é a matriz densidade do sistema descrito pelo Hamiltoniano na Eq. (3.3). Assim, para determinar uma expressão analítica para LDOS, nós aplicamos o procedimento da equação de movimento sobre a Eq. (4.3). Tal procedimento é resumido como segue

$$(\varepsilon + i\eta)\tilde{\mathcal{R}}_{\mathcal{A}\mathcal{B}} = [\mathcal{A}, \mathcal{B}^\dagger]_+ + \tilde{\mathcal{R}}_{[\mathcal{A}, \mathcal{H}_i]\mathcal{B}}, \quad (4.7)$$

com $\eta \rightarrow 0^+$, \mathcal{A} e \mathcal{B} como operadores fermiônicos pertencentes ao Hamiltoniano \mathcal{H}_i (i = hospedeiro+átomos adsorvidos ou ponta).

Tomando a Eq. (4.3), pode-se calcular via Eqs. (3.2), (3.6) e (4.7) com $\mathcal{A} = \mathcal{B} = \psi_0$ e $\mathcal{H}_i = \mathcal{H}_{\text{host+ads}}$, a seguinte relação

$$\tilde{\mathcal{R}}_{\psi_0\psi_0} = \tilde{\mathcal{R}}_{f_0f_0} + (\pi\Gamma\rho_0)q_0^2 \sum_{jl} \tilde{\mathcal{R}}_{d_j d_l} + 2(\pi\Gamma\rho_0)^{1/2} q_0 \sum_j \tilde{\mathcal{R}}_{d_j f_0}, \quad (4.8)$$

que depende das funções de Green $\tilde{\mathcal{R}}_{f_0f_0}$, $\tilde{\mathcal{R}}_{f_0d_j}$ e $\tilde{\mathcal{R}}_{d_j d_l}$. Primeiro, vamos encontrar $\tilde{\mathcal{R}}_{f_0f_0}$,

$$\tilde{\mathcal{R}}_{f_0f_0} = \pi\rho_0(\bar{\gamma} - i) + \pi\rho_0\Gamma(\bar{\gamma} - i)^2 \sum_{jl} \tilde{\mathcal{R}}_{d_j d_l} \quad (4.9)$$

e posteriormente, as funções de Green mistas $\tilde{\mathcal{R}}_{d_j f_0}$,

$$\tilde{\mathcal{R}}_{d_j f_0} = \sqrt{\pi\Gamma\rho_0}(\bar{\gamma} - i) \sum_l \tilde{\mathcal{R}}_{d_j d_l}, \quad (4.10)$$

onde

$$\bar{\gamma} = \frac{1}{\pi\rho_0} \sum_k \frac{1}{\varepsilon - \varepsilon_k}. \quad (4.11)$$

Agora nós escolhemos para Eq. (4.7), $\mathcal{H}_i = \mathcal{H}_{\text{tip}}$ e $\mathcal{A} = \mathcal{B} = f_t$, respectivamente, das Eqs. (3.3) e (4.5), para mostrar que

$$\tilde{\mathcal{R}}_{f_t f_t} = \pi\rho_0(\bar{\gamma} - i). \quad (4.12)$$

4.2 A ponta do STM no mesmo pé de igualdade do sistema "hospedeiro+átomos adsorvidos"

Em particular, no limite de banda larga $D \rightarrow \infty$, $\bar{\gamma} \rightarrow 0$. Assim as partes imaginárias das Eqs.(4.9), (4.10) e (4.12) tornam-se

$$\text{Im}(\tilde{\mathcal{R}}_{f_0 f_0}) = -\pi\rho_0[1 + \Gamma \sum_{jl} \text{Im}(\tilde{\mathcal{R}}_{d_j d_l})], \quad (4.13)$$

$$\text{Im}(\tilde{\mathcal{R}}_{d_j f_0}) = -\sqrt{\pi\Gamma\rho_0} \sum_l \text{Re}(\tilde{\mathcal{R}}_{d_j d_l}) \quad (4.14)$$

e

$$\text{Im}(\tilde{\mathcal{R}}_{f_t f_t}) = -\pi\rho_0. \quad (4.15)$$

Agora nós tomamos as Eqs. (4.13), (4.14) e (4.15) dentro da Eq. (4.2) a fim de obter

$$\begin{aligned} T_{\text{probe}}(\varepsilon) = \frac{\mathcal{T}_{\text{probe}}(\varepsilon)}{\mathcal{T}_b} = 1 + \Gamma \sum_{jl} [(1 - q_0^2) \text{Im}(\tilde{\mathcal{R}}_{d_j d_l}) \\ + 2q_0 \text{Re}(\tilde{\mathcal{R}}_{d_j d_l})] \end{aligned} \quad (4.16)$$

como a transmitância através do sistema, escrita em termos da condutância de fundo

$$\mathcal{T}_b = 4x = 4(\pi w \rho_0)^2 \quad (4.17)$$

e as funções de Green $\tilde{\mathcal{R}}_{d_j d_l}$ dos átomos adsorvidos.

4.2 A ponta do STM no mesmo pé de igualdade do sistema "hospedeiro+átomos adsorvidos"

Aqui nós derivamos a expressão de Landauer-Büttiker para a condutância de baixas voltagens $\mathcal{G}(0)$ considerando a ponta do STM no mesmo pé de igualdade do sistema "hospedeiro+átomos adsorvidos", que é realizável com $\tilde{V} = V$ na Eq. (3.9).

A condutância de baixas voltagens é função da transmitância $\mathcal{T}_{\text{full}}(\varepsilon)$ como segue:

$$\mathcal{G}(0) = \frac{\partial}{\partial \varphi} \mathcal{J}_{\text{host}}(\varphi = 0) = \frac{e^2}{h} \int d\varepsilon \left(-\frac{\partial f_F}{\partial \varepsilon} \right) \mathcal{T}_{\text{full}}(\varepsilon), \quad (4.18)$$

com $\mathcal{J}_{\text{host}}$ como a corrente no hospedeiro e $\mu_{\text{host}} - \mu_{\text{tip}} = e\varphi$, com φ como a voltagem aplicada. Começamos com a seguinte transformação

$$\begin{pmatrix} c_k \\ b_k \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \\ -\frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_{ok} \\ c_{ek} \end{pmatrix} \quad (4.19)$$

sobre o Hamiltoniano da Eq. (3.1), que depende dos operadores de condução *even* e *odd* c_{ek} e c_{ok} , respectivamente. Essas definições nos permitem expressar a Eq. (3.1) como

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_e + \mathcal{H}_o + \tilde{\mathcal{H}}_{\text{tun}} = \mathcal{H}_{\varphi=0} + \tilde{\mathcal{H}}_{\text{tun}}, \quad (4.20)$$

onde

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_e &= \sum_k \varepsilon_k c_{ek}^\dagger c_{ek} + \sum_j \varepsilon_j d_j^\dagger d_j \\ &+ \sum_{jk} \sqrt{2}V (c_{ek}^\dagger d_j + \text{H.c.}) + w \sum_{kq} c_{ek}^\dagger c_{eq} \\ &+ i\epsilon_M \eta_1 \eta_2 + \lambda (d_1 - d_1^\dagger) \eta_1 \end{aligned} \quad (4.21)$$

representa a parte do Hamiltoniano acoplada aos átomos adsorvidos via hibridização efetiva $\sqrt{2}V$, enquanto

$$\mathcal{H}_o = \sum_k \varepsilon_k c_{ok}^\dagger c_{ok} - w \sum_{kq} c_{ok}^\dagger c_{oq} \quad (4.22)$$

é a parte desacoplada. Porém, elas estão conectadas pelo Hamiltoniano de tunelamento

$$\tilde{\mathcal{H}}_{\text{tun}} = -\Delta\mu \sum_k (c_{ek}^\dagger c_{ok} + c_{ok}^\dagger c_{ek}), \quad (4.23)$$

com $\mu_{\text{host}} = \Delta\mu$, $\mu_{\text{tip}} = -\Delta\mu$ e $\Delta\mu = e\varphi/2$. Como no regime de baixas voltagens $\Delta\mu \rightarrow 0$, devido a $\varphi \rightarrow 0$, $\tilde{\mathcal{H}}_{\text{tun}}$ é um termo perturbativo.

Aqui nós utilizamos a representação de interação para calcular $\mathcal{T}_{\text{full}}(\varepsilon)$. Isso garante que um estado $|\Phi_n\rangle$ do espectro do Hamiltoniano dado pela Eq. (4.20)

admite a seguinte dependência temporal

$$\begin{aligned} |\Phi_n\rangle &= e^{-\frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^0 \tilde{\mathcal{H}}_{\text{tun}}(\tau) d\tau} |\Psi_n\rangle \\ &\simeq \left(1 - \frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^0 \tilde{\mathcal{H}}_{\text{tun}}(\tau) d\tau\right) |\Psi_n\rangle, \end{aligned} \quad (4.24)$$

onde $\hbar = \frac{h}{2\pi}$ e $|\Psi_n\rangle$ é um autoestado do $\mathcal{H}_e + \mathcal{H}_o = \mathcal{H}_{\varphi=0}$. Assim a corrente $\mathcal{J}_{\text{host}}$ do hospedeiro pode ser obtida tomando o valor médio esperado do operador corrente $\mathcal{I}_{\text{host}} \equiv \mathcal{I}_{\text{host}}(t=0)$,

$$\begin{aligned} \mathcal{J}_{\text{host}} &= \langle \Phi_n | \mathcal{I}_{\text{host}} | \Phi_n \rangle \\ &= -\frac{i}{\hbar} \langle \Psi_n | \int_{-\infty}^0 [\mathcal{I}_{\text{host}}, \tilde{\mathcal{H}}_{\text{tun}}(\tau)] d\tau | \Psi_n \rangle + \mathcal{O}(\tilde{\mathcal{H}}_{\text{tun}}^2), \end{aligned} \quad (4.25)$$

onde nós consideramos $\langle \Psi_n | \mathcal{I}_{\text{host}} | \Psi_n \rangle = 0$. Considerando a média térmica na última equação, obtemos

$$\mathcal{J}_{\text{host}} = -\frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^0 \text{Tr}\{\varrho_{\varphi=0}[\mathcal{I}_{\text{host}}, \tilde{\mathcal{H}}_{\text{tun}}(\tau)]\} d\tau, \quad (4.26)$$

onde $\varrho_{\varphi=0}$ é a matriz densidade do sistema descrito pelo Hamiltoniano $\mathcal{H}_{\varphi=0}$ na Eq. (4.20). Aplicando o procedimento da equação de movimento sobre $\mathcal{I}_{\text{host}}$, mostramos que

$$\begin{aligned} \mathcal{I}_{\text{host}} &= -\frac{i}{\hbar} [e \sum_k c_k^\dagger c_k, \mathcal{H}_{\varphi=0}] \\ &= \left(-\frac{ie}{\sqrt{2\hbar}}\right) V \sum_{kj} \left\{ (c_{ek}^\dagger d_j - d_j^\dagger c_{ek}) \right. \\ &\quad \left. + (c_{ok}^\dagger d_j - d_j^\dagger c_{ok}) \right\} \\ &\quad + \left(-\frac{ie}{\hbar}\right) w \sum_{q\bar{q}} (c_{oq}^\dagger c_{e\bar{q}} - c_{e\bar{q}}^\dagger c_{oq}), \end{aligned} \quad (4.27)$$

que, em combinação com a Eq. (4.26), leva a

$$\begin{aligned} \mathcal{J}_{\text{host}} &= -\frac{e}{\hbar} \Delta\mu \text{Im} \int_{-\infty}^{+\infty} d\tau \left\{ \sqrt{2}V \sum_j \mathcal{F}_j(-\tau) \right. \\ &\quad \left. + 2w\mathcal{M}(-\tau) \right\}, \end{aligned} \quad (4.28)$$

onde

$$\mathcal{F}_j(-\tau) = -\frac{i}{\hbar}\theta(-\tau)\text{Tr}\{\varrho_{\varphi=0}[f_o^\dagger d_j, \sum_q c_{eq}^\dagger(\tau)c_{oq}(\tau)]\} \quad (4.29)$$

e

$$\mathcal{M}(-\tau) = -\frac{i}{\hbar}\theta(-\tau)\text{Tr}\{\varrho_{\varphi=0}[f_o^\dagger f_e, \sum_k c_{ek}^\dagger(\tau)c_{ok}(\tau)]\} \quad (4.30)$$

são funções de Green retardadas, expressas em termos dos operadores

$$f_o = \sum_{\tilde{q}} c_{o\tilde{q}} \quad (4.31)$$

e

$$f_e = \sum_q c_{eq}. \quad (4.32)$$

A fim de encontrar uma expressão para a corrente $\mathcal{J}_{\text{host}}$, nós devemos avaliar as integrais na coordenada temporal τ da Eq. (4.28), que resulta em

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{+\infty} d\tau \mathcal{F}_j(-\tau) &= \mathcal{Z}^{-1} \sum_{mn} \frac{(e^{-\beta E_n} - e^{-\beta E_m})}{E_n - E_m + i\eta} \\ &\times \langle \Psi_n | f_o^\dagger d_j | \Psi_m \rangle \langle \Psi_m | \sum_q c_{eq}^\dagger c_{oq} | \Psi_n \rangle \end{aligned} \quad (4.33)$$

e

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{+\infty} d\tau \mathcal{M}(-\tau) &= \mathcal{Z}^{-1} \sum_{mn} \frac{(e^{-\beta E_n} - e^{-\beta E_m})}{E_n - E_m + i\eta} \\ &\times \langle \Psi_n | f_o^\dagger f_e | \Psi_m \rangle \langle \Psi_m | \sum_q c_{eq}^\dagger c_{oq} | \Psi_n \rangle, \end{aligned} \quad (4.34)$$

onde usamos \mathcal{Z} como a função de partição de $\mathcal{H}_{\varphi=0} |\Psi_m\rangle = E_m |\Psi_m\rangle$, $\mathcal{A}(\tau) = e^{\frac{i}{\hbar}\mathcal{H}_{\varphi=0}\tau} \mathcal{A} e^{-\frac{i}{\hbar}\mathcal{H}_{\varphi=0}\tau}$ para um operador arbitrário dependente do tempo $\mathcal{A}(\tau)$ e $\eta \rightarrow 0^+$. Para eliminar o elemento de matriz $\langle \Psi_m | c_{eq}^\dagger c_{oq} | \Psi_n \rangle$ nas Eqs. (4.33) e (4.34), nós

calculamos $\langle \Psi_m | [\sum_q c_{eq}^\dagger c_{oq}, \mathcal{H}_{\varphi=0}] | \Psi_n \rangle$, o qual gera

$$\begin{aligned} \langle \Psi_m | \sum_q c_{eq}^\dagger c_{oq} | \Psi_n \rangle &= -\frac{\sqrt{2}V}{(E_n - E_m)} \\ &\times \sum_{\tilde{j}} \langle \Psi_m | d_{\tilde{j}}^\dagger f_o | \Psi_n \rangle \\ &- \frac{2w}{(E_n - E_m)} \langle \Psi_m | f_e^\dagger f_o | \Psi_n \rangle. \end{aligned} \quad (4.35)$$

Realizando as substituições das Eqs. (4.33), (4.34) com (4.35) na Eq. (4.28), nós incluímos o resultado na função rotulada por χ_{mn} para mostrar que

$$\begin{aligned} \mathcal{J}_{\text{host}} &= \frac{e}{\hbar} \pi \Delta \mu \mathcal{Z}^{-1} \sum_{mn} \chi_{mn} \frac{(e^{-\beta E_n} - e^{-\beta E_m})}{E_n - E_m} \delta(E_n - E_m) \\ &= -\frac{e}{\hbar} \pi \Delta \mu \beta \sum_{mn} [\mathcal{Z}^{-1} e^{-\beta E_n} \delta(E_n - E_m)] \chi_{nm}, \end{aligned} \quad (4.36)$$

onde definimos

$$\begin{aligned} \chi_{nm} &= (\sqrt{2}V)^2 \sum_{\tilde{j}\tilde{j}} \langle \Psi_n | f_o^\dagger d_{\tilde{j}} | \Psi_m \rangle \langle \Psi_m | d_{\tilde{j}}^\dagger f_o | \Psi_n \rangle \\ &+ 2\sqrt{2}V(2w) \sum_j \langle \Psi_n | f_o^\dagger d_j | \Psi_m \rangle \langle \Psi_m | f_e^\dagger f_o | \Psi_n \rangle \\ &+ (2w)^2 \langle \Psi_n | f_o^\dagger f_e | \Psi_m \rangle \langle \Psi_m | f_e^\dagger f_o | \Psi_n \rangle. \end{aligned} \quad (4.37)$$

Nesse cálculo nos utilizamos

$$\langle \Psi_n | f_o^\dagger d_j | \Psi_m \rangle \langle \Psi_m | f_e^\dagger f_o | \Psi_n \rangle = \langle \Psi_n | f_o^\dagger f_e | \Psi_m \rangle \langle \Psi_m | d_j^\dagger f_o | \Psi_n \rangle,$$

com

$$\frac{(e^{-\beta E_n} - e^{-\beta E_m})}{E_n - E_m} = -\beta e^{-\beta E_n} \quad (4.38)$$

no limite $E_n \rightarrow E_m$. A propriedade $[\mathcal{H}_e, \mathcal{H}_o] = 0$ garante as partições $E_n = E_n^e + E_n^o$ e $\mathcal{Z} = \mathcal{Z}_e \mathcal{Z}_o$ para os Hamiltonianos \mathcal{H}_e e \mathcal{H}_o , respectivamente nos brackets da Eq.

(4.36), assim levando a

$$\begin{aligned} \mathcal{Z}^{-1} e^{-\beta E_n} \delta(E_n - E_m) &= \frac{1}{\beta} \mathcal{Z}_e^{-1} \mathcal{Z}_o^{-1} \int d\varepsilon \left(-\frac{\partial f_F}{\partial \varepsilon} \right) \\ &\times (e^{-\beta E_n^e} + e^{-\beta E_m^e}) (e^{-\beta E_n^o} + e^{-\beta E_m^o}) \delta(\varepsilon + E_n^e - E_m^e) \\ &\times \delta(\varepsilon + E_n^o - E_m^o). \end{aligned} \quad (4.39)$$

Portanto, nós substituímos as Eqs. (4.37) e (4.39) na Eq. (4.36) para calcular $\frac{\partial}{\partial \varphi} \mathcal{J}_{\text{host}}(\varphi = 0)$. A comparação de tal resultado com a Eq. (4.18) nos permite encontrar

$$\mathcal{T}_{\text{full}}(\varepsilon) = (2\pi w)^2 \tilde{\rho}_{\text{LDOS}}(\varepsilon) \tilde{\rho}_{\text{tip}}(\varepsilon), \quad (4.40)$$

onde

$$\tilde{\rho}_{\text{LDOS}}(\varepsilon) = -\frac{1}{\pi} \text{Im}(\tilde{\mathcal{R}}_{\psi_e \psi_e}) \quad (4.41)$$

e

$$\mathcal{R}_{\psi_e \psi_e} = -\frac{i}{\hbar} \theta(t) \text{Tr}\{\varrho_e[\psi_e(t), \psi_e^\dagger(0)]_+\}, \quad (4.42)$$

fornecem a LDOS renormalizada do sistema "hospedeiro+átomos adsorvidos" descrito pelo Hamiltoniano da Eq. (4.21), afetado pela ponta do STM via o seguinte termo de espalhamento $w \sum_{kq} c_{ek}^\dagger c_{eq}$, conduzindo a

$$\psi_e = f_e + (\pi \Delta \rho_0)^{1/2} \gamma \sum_j d_j \quad (4.43)$$

e

$$\tilde{\mathcal{R}}_{\psi_e \psi_e} = \tilde{\mathcal{R}}_{f_e f_e} + (\pi \rho_0 \Delta) \gamma^2 \sum_{jl} \tilde{\mathcal{R}}_{d_j d_l} + 2(\pi \rho_0 \Delta)^{1/2} \gamma \sum_j \tilde{\mathcal{R}}_{d_j f_e}$$

que generaliza as Eqs. (3.6) e (4.8), respectivamente, com um parâmetro de Anderson renormalizado

$$\Delta = 2\pi V^2 \rho_0 \quad (4.44)$$

e fator de Fano

$$\gamma = (\pi\rho_0\Delta)^{-1/2} \left(\frac{\sqrt{2}V}{2w} \right). \quad (4.45)$$

Adicionalmente, o termo de espalhamento $-w \sum_{kq} c_{ok}^\dagger c_{oq}$ renormaliza a DOS da ponta do STM, devido ao Hamiltoniano da Eq. (4.22), que fornece

$$\tilde{\rho}_{\text{tip}}(\varepsilon) = -\frac{1}{\pi} \text{Im}(\tilde{\mathcal{R}}_{f_o f_o}). \quad (4.46)$$

Das Eqs. (4.21) e (4.32), nós fazemos as substituições $\mathcal{A} = \mathcal{B} = f_e$ e $\mathcal{H}_i = \mathcal{H}_e$ na Eq. (4.7), a qual gera

$$\begin{aligned} \tilde{\mathcal{R}}_{f_e f_e} &= \frac{\pi\rho_0(\bar{\gamma} - i)}{1 - \sqrt{x}(\bar{\gamma} - i)} + \pi\rho_0\Delta \left[\frac{(\bar{\gamma} - i)}{1 - \sqrt{x}(\bar{\gamma} - i)} \right]^2 \\ &\times \sum_{jl} \tilde{\mathcal{R}}_{d_j d_l}(\varepsilon), \end{aligned} \quad (4.47)$$

onde nós usamos as funções de Green mistas

$$\tilde{\mathcal{R}}_{d_j f_e} = \sqrt{\pi\Delta\rho_0} \frac{(\bar{\gamma} - i)}{1 - \sqrt{x}(\bar{\gamma} - i)} \sum_l \tilde{\mathcal{R}}_{d_j d_l}, \quad (4.48)$$

determinada da Eq. (4.7) considerando $\mathcal{A} = d_j$, $\mathcal{B} = f_e$ e $\mathcal{H}_i = \mathcal{H}_e$, com o parâmetro x sendo o mesmo como encontrado na Eq. (4.17). Nós salientamos que, as Eqs. (4.47) e (4.48), constituem respectivamente, generalizações das Eqs. (4.9) e (4.10) com $x \ll 1$. Assim, as partes imaginárias das Eqs. (4.47) e (4.48) para o limite de banda larga $D \rightarrow \infty$, tornam-se

$$\begin{aligned} \text{Im}(\tilde{\mathcal{R}}_{f_e f_e}) &= -\frac{\pi\rho_0}{1+x} - \frac{(1-x)}{(1+x)^2} \pi\Delta\rho_0 \sum_{jl} \text{Im}(\tilde{\mathcal{R}}_{d_j d_l}) \\ &+ \frac{2\sqrt{x}}{(1+x)^2} \pi\Delta\rho_0 \sum_{jl} \text{Re}(\tilde{\mathcal{R}}_{d_j d_l}) \end{aligned} \quad (4.49)$$

e

$$\begin{aligned} \text{Im}(\tilde{\mathcal{R}}_{d_j f_e}) &= -\frac{\sqrt{x\pi\Delta\rho_0}}{1+x} \sum_l \text{Im}(\tilde{\mathcal{R}}_{d_j d_l}) \\ &- \frac{\sqrt{\pi\Delta\rho_0}}{1+x} \sum_l \text{Re}(\tilde{\mathcal{R}}_{d_j d_l}), \end{aligned} \quad (4.50)$$

onde nós usamos $\bar{\gamma} \rightarrow 0$. Para concluir, nós notamos que $\tilde{\mathcal{R}}_{f_o f_o}$ está desacoplada dos átomos adsorvidos. Assim, das Eqs. (4.22) e (4.31), nós tomamos $\mathcal{A} = \mathcal{B} = f_o$ e $\mathcal{H}_i = \mathcal{H}_o$ na Eq. (4.7) e obtemos

$$\text{Im}(\tilde{\mathcal{R}}_{f_o f_o}) = -\frac{\pi\rho_0}{1+x}, \quad (4.51)$$

que é igual ao primeiro termo da Eq. (4.49).

Assim as substituições das Eqs. (4.49), (4.50) e (4.51) na Eq. (4.40), levam a

$$T_{\text{full}}(\varepsilon) = \frac{\mathcal{T}_{\text{full}}(\varepsilon)}{\bar{\mathcal{T}}_b} = 1 + \bar{\Gamma} \sum_{jl} [(1 - q_b^2) \text{Im}(\tilde{\mathcal{R}}_{d_j d_l}) + 2q_b \text{Re}(\tilde{\mathcal{R}}_{d_j d_l})], \quad (4.52)$$

onde

$$\bar{\mathcal{T}}_b = \frac{4x}{(1+x)^2} \quad (4.53)$$

representa a transmitância na ausência dos átomos adsorvidos e dos MBSs (contribuição de fundo),

$$\bar{\Gamma} = \frac{\Delta}{1+x} \quad (4.54)$$

é o acoplamento efetivo e

$$q_b = \frac{(1-x)}{2\sqrt{x}} \quad (4.55)$$

é o parâmetro de Fano. Perceba que a Eq. (4.52) tem a mesma forma da Eq. (4.16), porém com q_0 substituído por q_b . Neste trabalho, nós focamos no limite $q_0 = q_b = 0$.

5 Funções de Green dos átomos adsorvidos

Neste capítulo, nós calculamos as funções de Green $\tilde{\mathcal{R}}_{d_j d_l}$ no limite de banda larga $D \rightarrow \infty$. Nós salientamos que, as expressões derivadas aqui descrevem a situação descrita na seção 4.1 para a ponta do STM considerada como sonda com Γ no lugar de Δ [ver Eqs. (3.8) and (4.44)] e assumindo $x \ll 1$ [Eq. (4.17)]. Por outro lado, elas pertencem ao caso da seção 4.2. Começamos aplicando o procedimento da equação de movimento sobre

$$\mathcal{R}_{d_j d_l} = -\frac{i}{\hbar} \theta(t) \text{Tr} \{ \rho_s [d_j(t), d_l^\dagger(0)]_+ \}, \quad (5.1)$$

onde $s = \text{host} + \text{ads}$ ou $s = e$, e mudando para o domínio da energia ε , nós obtemos as seguintes relações:

$$(\varepsilon - \tilde{\varepsilon}_j - i\Sigma^I - \delta_{j1} \Sigma_{\text{MBS1}}) \tilde{\mathcal{R}}_{d_j d_l} = \delta_{jl} + \Sigma \sum_{\tilde{i} \neq j} \tilde{\mathcal{R}}_{d_{\tilde{i}} d_l}, \quad (5.2)$$

onde

$$\tilde{\varepsilon}_j = \varepsilon_j + \Sigma^R \quad (5.3)$$

é o nível de energia do átomo adsorvido renormalizado pelo acoplamento w da ponta do STM com o hospedeiro, com $\Sigma = \Sigma^R + i\Sigma^I$,

$$\Sigma^R = -\frac{\sqrt{x}}{1+x} \Delta, \quad (5.4)$$

$$\Sigma^I = -\frac{\Delta}{1+x} \quad (5.5)$$

e

$$\Sigma_{\text{MBS1}} = \lambda^2 K (1 + \lambda^2 \tilde{K}) \quad (5.6)$$

como a auto-energia devido ao MBS 1 acoplado ao átomo adsorvido 1,

$$K = \frac{1}{2} \left(\frac{1}{\varepsilon - \epsilon_M + i\eta} + \frac{1}{\varepsilon + \epsilon_M + i\eta} \right) \quad (5.7)$$

e

$$\tilde{K} = \frac{K}{\varepsilon + \tilde{\varepsilon}_1 - i\Sigma^I - \lambda^2 K}, \quad (5.8)$$

que possuem a mesma forma como encontrado na Ref. [22]. Assim a solução da Eq. (8.38) fornece

$$\tilde{\mathcal{R}}_{d_1 d_1} = \frac{1}{\varepsilon - \tilde{\varepsilon}_1 - i\Sigma^I - \Sigma_{\text{MBS1}} - \mathcal{C}_2} \quad (5.9)$$

como a função de Green do átomo adsorvido 1, onde

$$\mathcal{C}_j = \frac{(\Sigma^R + i\Sigma^I)^2}{\varepsilon - \tilde{\varepsilon}_j - i\Sigma^I}, \quad (5.10)$$

como a auto-energia devido a presença do j -ésimo átomo adsorvido. Para $\mathcal{C}_2 = 0$, nós enfatizamos que a Eq. (5.9) é reduzida à função de Green do sistema de um único QD encontrado na Ref. [22]. No caso do átomo adsorvido 2, nós temos

$$\tilde{\mathcal{R}}_{d_2 d_2} = \frac{1 - \tilde{\mathcal{R}}_{d_1 d_1}^0 \Sigma_{\text{MBS1}}}{\varepsilon - \tilde{\varepsilon}_2 - i\Sigma^I - \frac{\tilde{\mathcal{R}}_{d_1 d_1}^0 \Sigma_{\text{MBS1}}}{\tilde{\mathcal{R}}_{d_2 d_2}^0} - \mathcal{C}_1}, \quad (5.11)$$

onde $\tilde{\mathcal{R}}_{d_1 d_1}^0 = 1/(\varepsilon - \tilde{\varepsilon}_1 - i\Sigma^I)$ e $\tilde{\mathcal{R}}_{d_2 d_2}^0 = 1/(\varepsilon - \tilde{\varepsilon}_2 - i\Sigma^I)$ representam as correspondentes funções de Green para um sistema de um único átomo adsorvido sem Majoranas. Para concluir, as funções de Green mistas são

$$\tilde{\mathcal{R}}_{d_2 d_1} = \frac{\Sigma^R + i\Sigma^I}{\varepsilon - \tilde{\varepsilon}_2 - i\Sigma^I} \tilde{\mathcal{R}}_{d_1 d_1} \quad (5.12)$$

e

$$\tilde{\mathcal{R}}_{d_1 d_2} = \frac{\Sigma^R + i\Sigma^I}{\varepsilon - \tilde{\varepsilon}_1 - i\Sigma^I - \Sigma_{\text{MBS1}}} \tilde{\mathcal{R}}_{d_2 d_2}. \quad (5.13)$$

O principal resultado desta seção é a emergência de uma quebra de simetria nessas funções de Green. Essa propriedade reside no acoplamento do átomo adsorvido 1 com o MBS 1. Para perceber isso, vamos examinar a situação onde o átomo adsorvido 1 está desacoplado do MBS 1, que pode ser obtida com $\Sigma_{\text{MBS1}} = 0$ na Eq. (5.6). Pela inspeção das Eqs. (5.9), (5.11), (5.12) e (5.13), nós verificamos que as funções $\tilde{\mathcal{R}}_{d_1 d_1}$ e $\tilde{\mathcal{R}}_{d_1 d_2}$ podem ser determinadas pela troca dos índices $1 \leftrightarrow 2$ na $\tilde{\mathcal{R}}_{d_2 d_2}$ e $\tilde{\mathcal{R}}_{d_2 d_1}$, respectivamente. Contudo, na situação oposta com $\Sigma_{\text{MBS1}} \neq 0$, esta simetria é quebrada. Assim, no capítulo 6 nós investigaremos essa quebra de simetria por meio da transmitância das Eqs. (4.16) e (4.52). Para esse fim, nós seguiremos o procedimento de dois estágios apresentado no capítulo 1.

6 Resultados

Os resultados foram obtidos considerando a cadeia de Kitaev suficientemente longa, a qual força $\varepsilon_M \sim e^{-L/\xi} \rightarrow 0$ na Eq. (3.2) para $L \gg \xi$. Nós adotamos valores típicos de átomos adsorvidos em metais [32]: $\Delta = \Gamma = 0.2$ para os parâmetros de Anderson das Eq. (3.8) e Eq. (4.44), λ , $\varepsilon_1 = -\frac{\Delta\varepsilon}{2}$, $\varepsilon_2 = \frac{\Delta\varepsilon}{2}$, separação simétrica $\Delta\varepsilon = \varepsilon_2 - \varepsilon_1$ e ε em unidades de eV .

A fim de investigar a transmitância $T_{full}(\varepsilon)$ da Eq. (4.52) como função da energia ε , na Figura 6.1 e na Figura 6.2 nós utilizamos $\lambda = 5\Delta$, com $x = 1$ e o fator de Fano $q_b = 0$ [Eq. (4.55)]. Esse conjunto de parâmetros nos permite emular a situação onde a ponta do STM está fortemente conectada à superfície do hospedeiro e portanto, considerada no mesmo pé de igualdade do sistema "hospedeiro+átomos adsorvidos".

Na Figura 6.1 para o caso do sistema livre, sem os MBSs [curva sólida de cor verde], nós observamos duas anti-ressonâncias, cada uma localizada no nível correspondente de energia de cada átomo adsorvido dado por $\varepsilon_1 = -2.5$ e $\varepsilon_2 = +2.5$, respectivamente. Nós nomeamos essas anti-ressonâncias como satélites. Fora das anti-ressonâncias, a transmitância se aproxima do limite unitário e a condutância alcança $\mathcal{G} = \mathcal{G}_0 = e^2/h$. Perceba, por exemplo, a região central localizada entre os valores $-1.75 \lesssim e\varphi \lesssim 1.75$ [região sombreada], onde temos um platô balístico com a condutância anteriormente mencionada. Nesse sistema livre, as funções de Green do modelo são simétricas sob permutação de índices que designam os parâmetros dos átomos adsorvidos. Essa propriedade é confirmada pela curva correspondente sólida de cor verde da Figura 6.2, obtida com $\varepsilon_1 = +2.5$ e $\varepsilon_2 = -2.5$, que está de acordo com aquela obtida com $\varepsilon_1 = -2.5$ e $\varepsilon_2 = +2.5$ da Figura 6.1. Portanto, o procedimento de dois estágios proposto neste trabalho, em particular para o caso do sistema com dois átomos adsorvidos livres, produz duas curvas idênticas para a transmitância. Porém, para o dispositivo acoplado lateralmente ao MBS 1, uma nova característica emerge na região central.

Fixando $\varepsilon_1 = -2.5$ e $\varepsilon_2 = +2.5$, uma anti-ressonância de amplitude próxima de $1/2$ surge no meio do platô balístico, devido ao MBS 1 conectado ao átomo adsorvido

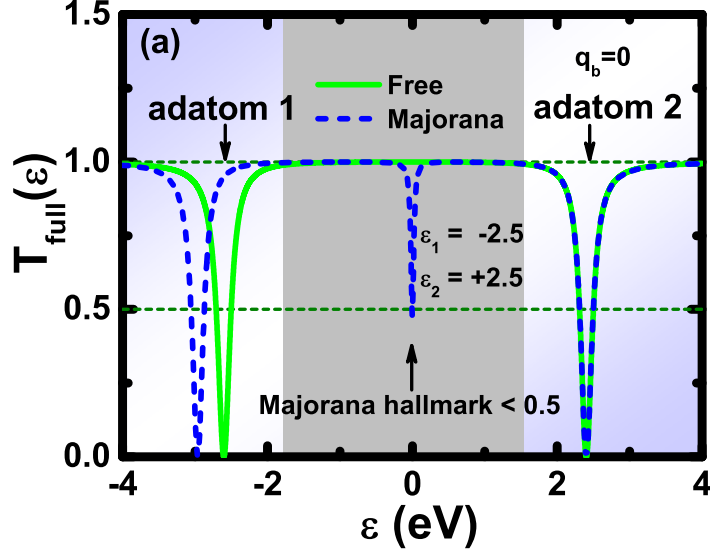


Figura 6.1: Parâmetros empregados: $\varepsilon_M = 0$ [cadeia longa de Kitaev], $\lambda = 5\Delta$ e $\Delta = 0.2$ [ver Eqs. (3.2) e (4.44)]. Transmitância $T_{full}(\varepsilon)$ determinada pela Eq. (4.52) no regime Fano $q_b = 0$ [Eq. (4.55)] como função da energia ε de uma única partícula. A curva sólida em verde é para o aparato da Figura 1.1 na ausência do MBS 1. Implementação do procedimento de dois estágios do Capítulo 1: $\varepsilon_1 = -2.5$ e $\varepsilon_2 = +2.5$: a curva pontilhada de cor azul corresponde ao sistema acoplado ao MBS 1.

1 [ver curva pontilhada de cor azul da Figura 6.1]. Para essa situação, a anti-ressonância ao redor de $\varepsilon_2 = +2.5$ coincide com aquela correspondente encontrado na curva sólida de cor verde do dispositivo livre, que é devido ao átomo adsorvido 2 não estar conectado ao MBS 1. Além disso, a anti-ressonância na proximidade de $\varepsilon_1 = -2.5$ não coincide com aquela na Figura 6.1, da curva sólida de cor verde para o sistema livre. Como pode-se notar, a posição de tal anti-ressonância é deslocada como resultado do acoplamento entre o MBS 1 e o átomo adsorvido 1. Após o procedimento de inversão das voltagens, que leva a $\varepsilon_1 = +2.5$ e $\varepsilon_2 = -2.5$, as anti-ressonâncias satélites da Figura 6.2 [ver curva pontilhada de cor vermelha] se invertem com respeito aquelas encontradas na Figura 6.1.

Nós enfatizamos que a anti-ressonância central permanece localizada no nível zero da voltagem, porém sua amplitude flutua levemente em torno de $1/2$. Esse comportamento da anti-ressonância central aparece na Figura 6.3, que pode ser claramente visualizada nas curvas pontilhadas de cores azul e vermelho, respectivamente. Portanto, uma anti-ressonância fixa e protegida contra o procedimento de dois estágios emerge na transmitância, localizada no nível zero da voltagem e caracterizada por

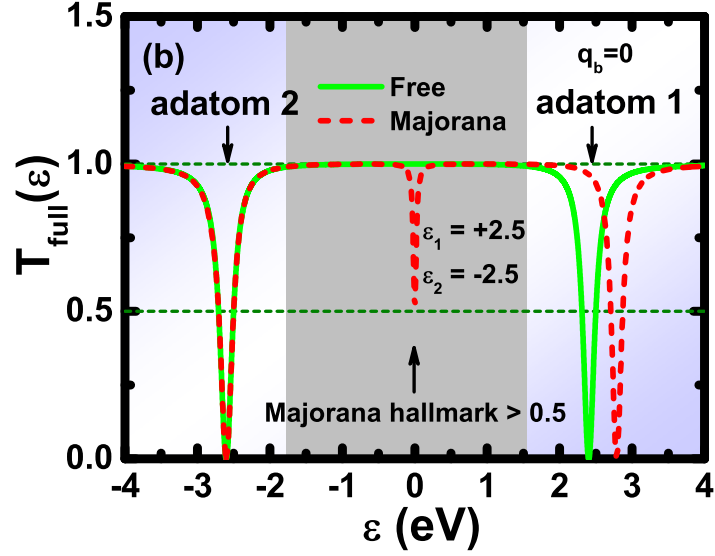


Figura 6.2: Parâmetros empregados: $\varepsilon_M = 0$ [cadeia longa de Kitaev], $\lambda = 5\Delta$ e $\Delta = 0.2$ [ver Eqs. (3.2) e (4.44)]. Transmitância $T_{full}(\varepsilon)$ determinada pela Eq. (4.52) no regime Fano $q_b = 0$ [Eq. (4.55)] como função da energia ε de uma única partícula. A curva sólida em verde é para o aparato da Figura 1.1 na ausência do MBS 1. Implementação do procedimento de dois estágios do Capítulo 1: $\varepsilon_1 = +2.5$ e $\varepsilon_2 = -2.5$: a curva pontilhada de cor vermelha corresponde ao sistema acoplado ao MBS 1. Em combinação com a Figura 6.1, temos aqui o principal resultado desse procedimento: a formação de uma anti-ressonância Majorana com uma amplitude que flutua levemente ao redor de $1/2$, mas ela permanece localizada no valor zero da voltagem mesmo realizando a inversão das voltagens. As anti-ressonâncias satélites não compartilham tal característica, elas sofrem um deslocamento lateral devido a permutação dos níveis dos átomos adsorvidos.

uma amplitude próxima a $1/2$. Em contraste, as anti-ressonâncias satélites não compartilham tal característica, elas se movem significativamente sob permutação dos níveis dos átomos adsorvidos. Portanto, a robustez completa da marca Majorana não existe mais como encontrado nas Refs. [22, 23]: a amplitude não é fixa em $1/2$ como um resultado direto da relação entre o átomo adsorvido 2 e o regime Fano, obtido com $x = 1$ na Eq. (4.55). Nessa situação, as partes real e imaginária da auto-energia Σ , Σ^R e Σ^I , respectivamente dadas pelas Eqs. (5.4) e (5.5), dependem de x . Caso contrário ela corresponderia ao caso em que a ponta é considerada como uma sonda da LDOS do sistema composto "hospedeiro+átomos adsorvidos". Onde não ocorre a flutuação da marca Majorana. Essa característica pode ser observada utilizando-se a transmitância $T_{probe}(\varepsilon)$ da Eq. (4.16) com $q_0 = 0$ [Eq. (3.9)], que

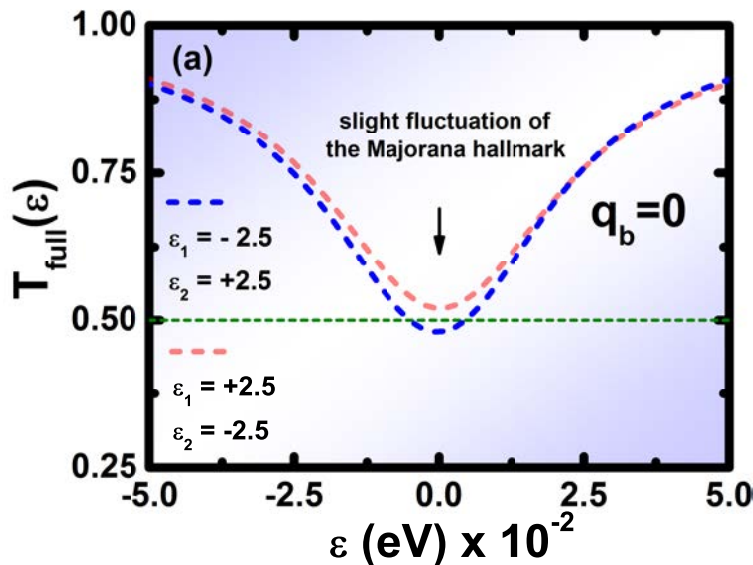


Figura 6.3: Parâmetros empregados: $\varepsilon_M = 0$ [cadeia longa de Kitaev], $\lambda = 5\Delta$ e $\Delta = \Gamma = 0.2$ [ver Eqs. (3.2), (3.8) e (4.44)]. Transmitância como função da energia ε de uma única partícula. Implementação do procedimento de dois estágios do Capítulo 1: a transmitância $T_{full}(\varepsilon)$ da Eq. (4.52) no regime Fano $q_b = 0$ [Eq. (4.55)], onde vemos a formação de uma anti-ressonância Majorana com uma amplitude que flutua levemente em torno de $1/2$ (marca Majorana), mas ela permanece localizada no valor zero da voltagem mesmo com a realização da inversão das voltagens.

é confirmado pelas curvas pontilhadas de cores azul e vermelho da Figura 6.4. De fato, pode ser observado uma anti-ressonância cravada no valor zero da voltagem caracterizada por uma amplitude constante e igual a $1/2$. Nesse caso, Σ^R e Σ^I não dependem de x , desde que $x \ll 1$ para a ponta do STM considerada como sonda [ver Eq. (4.17)]. Como resultado, a marca Majorana é preservada sob a inversão das voltagens.

Assim, a fim de explorar os efeitos devido à flutuação da transmitância de baixas voltagens, nós realizamos uma análise de $T_{full}(0)$ e $T_{probe}(0)$ como função da separação simétrica. Em ambos os casos, os parâmetros Fano são $q_b = 0$ e $q_0 = 0$, que de acordo com a teoria de Fano, conduz a um perfil de interferência destrutiva. Tal comportamento pode ser visto nos gráficos da transmitância versus ε na Figura 6.3 e Figura 6.4. Adicionalmente, nós salientamos que a anti-ressonância Majorana verificada na figura anterior difere levemente com respeito aquela encontrada na última. Notavelmente, a leve flutuação na marca Majorana na Figura 6.3 é capaz de fornecer um perfil diferente do esperado de $T_{full}(0)$ versus $\Delta\varepsilon$, que difere expressivamente da

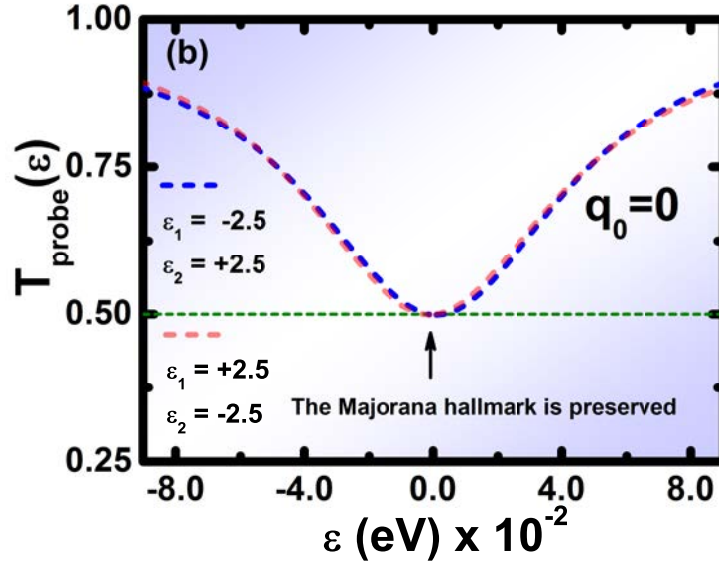


Figura 6.4: Parâmetros empregados: $\varepsilon_M = 0$ [cadeia longa de Kitaev], $\lambda = 5\Delta$ e $\Delta = \Gamma = 0.2$ [ver Eqs. (3.2), (3.8) e (4.44)]. Transmitância como função da energia ε de uma única partícula. Implementação do procedimento de dois estágios do Capítulo 1: a transmitância $T_{probe}(\varepsilon)$ da Eq. (4.16) para $q_0 = 0$ [Eq. (3.9)] não exibe flutuação da marca Majorana. A marca Majorana permanece imutável considerando a ponta de STM como uma sonda.

anti-ressonância de Fano. O resultado dessa análise aparece na curva sólida de cor violeta da Figura 6.5, onde é observado que a transmitância se aproxima de $1/2$ por cima para $\Delta\varepsilon < 0$, e a transmitância se aproxima de $1/2$ por baixo para $\Delta\varepsilon > 0$. No domínio de $\Delta\varepsilon < 0$, ela alcança o valor máximo de $3/4$, enquanto que para $\Delta\varepsilon > 0$, ela cai a $1/4$. Note que a variação da transmitância com $\Delta\varepsilon$ não excede uma amplitude de $1/2$ e particularmente para $\Delta\varepsilon = 0$, a transmitância recupera a marca Majorana de $1/2$. Por outro lado, na Figura 6.6, a transmitância $T_{probe}(0)$ como função da separação simétrica $\Delta\varepsilon$, a curva sólida de cor laranja, exibe um perfil padrão de antiressonância Fano para $q_0 = 0$. Perceba que em ambas as Figura 6.5 e Figura 6.6, a variação da transmitância em função de detuning simétrico $\Delta\varepsilon$ é de $1/2$. Enfatizamos que o perfil Fano diferente do esperado encontrado neste trabalho se torna uma forma de identificar a existência de MBSs isolados, uma vez que a forma da curva da Figura 6.5 é devido a uma longa cadeia de Kitaev na fase topológica.

Em síntese, apesar dos mesmos parâmetros Fano $q_0 = 0$ e $q_b = 0$ em $T_{full}(0)$ e $T_{probe}(0)$, respectivamente nas Eqs. (4.16) e (4.52), que levam a anti-ressonâncias de

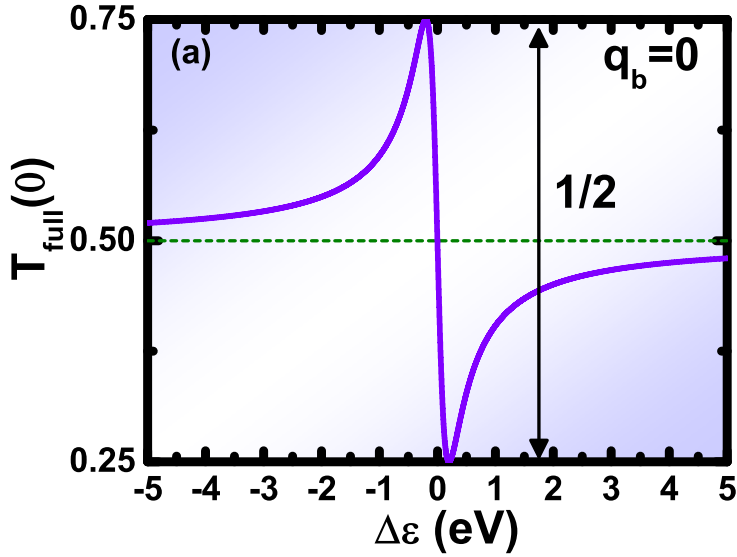


Figura 6.5: Parâmetros empregados: $\varepsilon_M = 0$ [cadeia longa de Kitaev], $\lambda = 5\Delta$ e $\Delta = \Gamma = 0.2$ [ver Eqs. (3.2), (3.8) e (4.44)]. Transmitância $T_{full}(0)$ da Eq. (4.52) no regime Fano $q_b = 0$ [Eq. (4.55)] como função da separação simétrica $\Delta\varepsilon = \varepsilon_2 - \varepsilon_1$. Para a ponta de STM no mesmo pé de igualdade do sistema "hospedeiro+átomos adsorvidos", nós notamos uma nova característica no perfil da transmitância: uma curva Fano diferente do esperado emerge e a anti-ressonância de Fano não é observada.

Fano levemente diferentes em relação aquelas encontradas na Figura 6.3 e Figura 6.4, demonstramos neste trabalho que a hipótese usual da ponta de STM atuando como sonda é insensível para um conhecimento completo da transmitância de baixas voltagens versus a separação simétrica $\Delta\varepsilon$. Para superar este obstáculo, a descrição adequada deve considerar a ponta de STM no mesmo pé de igualdade do sistema "hospedeiro+átomos adsorvidos". É importante mencionar que nós não apresentamos os resultados para o caso $q_b \gg 1$, uma vez que ele obedece a teoria padrão de Fano, o qual gera um perfil de ressonância para $T_{full}(0)$ versus a separação simétrica, como o esperado.

Na Figura 6.7, temos as curvas de densidade para $T_{full}(\varepsilon)$ da Eq. (4.52) com $q_b = 0$ em função de ε e do acoplamento λ . Nesses gráficos, anti-ressonâncias aparecem (regiões de cor preta) sendo possível observar que a anti-ressonância MBS 1 no valor zero da voltagem é a única estrutura que não se modifica com a implementação do procedimento de dois estágios assim como também com o aumento de λ . Por outro lado, as posições das anti-ressonâncias satélites são deslocados com a mudança de λ . Essa característica pode ser visualizada nas anti-ressonâncias que se afastam das

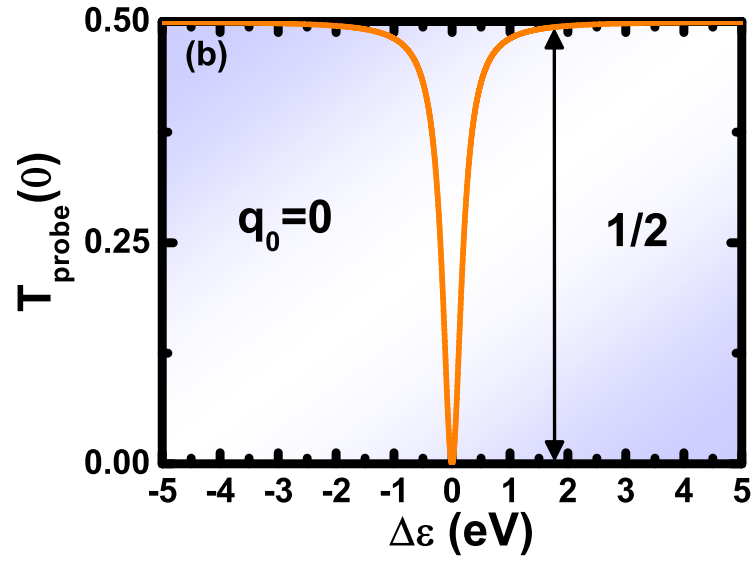


Figura 6.6: Parâmetros empregados: $\varepsilon_M = 0$ [cadeia longa de Kitaev], $\lambda = 5\Delta$ e $\Delta = \Gamma = 0.2$ [ver Eqs. (3.2), (3.8) e (4.44)]. No caso da ponta de STM como sonda, a transmitância $T_{probe}(0)$ da Eq. (4.16) com $q_0 = 0$ [Eq. (3.9)] leva a uma anti-ressonância de Fano padrão. Nós observamos que apesar da pequena diferença entre as anti-ressonâncias Majorana da Figura 6.3 e Figura 6.4, a transmitância de baixas voltagens em função da separação simétrica, produz duas curvas distintas. Contudo, em ambas as situações, a transmitância não excede uma amplitude de $1/2$.

linhas tracejadas de cor amarela na Figura 6.7, respectivamente para $\Delta\varepsilon = +5$ e $\Delta\varepsilon = -5$.

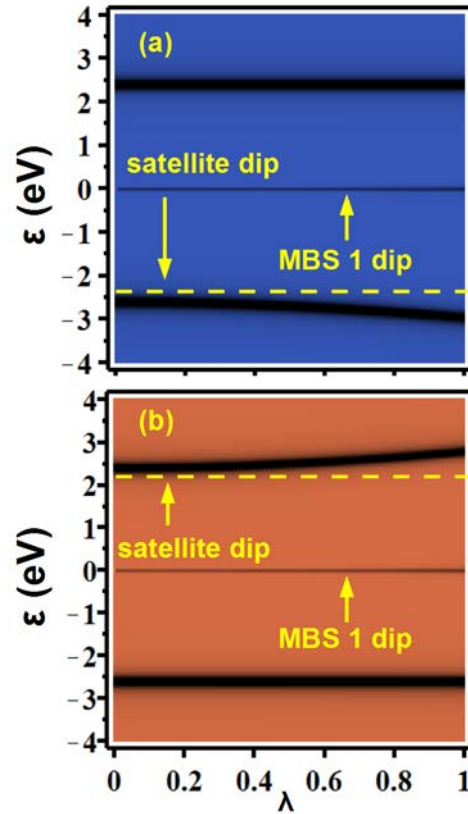


Figura 6.7: Parâmetros empregados: $\varepsilon_M = 0$ [cadeia longa de Kitaev], $\Delta = 0.2$ [ver Eqs. (3.2) e (4.44)]. Curvas de densidade da transmitância $T_{full}(\varepsilon)$ determinada pela Eq. (4.52) no regime Fano $q_b = 0$ [Eq. (4.55)] como função da energia ε de uma única partícula e do acoplamento λ em unidades de Δ . Implementação do procedimento de dois estágios do Capítulo 1: (a) $\Delta\varepsilon = +5$ (b) $\Delta\varepsilon = -5$. Aqui temos o principal resultado desse procedimento: a formação de uma anti-ressonância Majorana (em preto) cravada no valor zero da voltagem mesmo com a inversão das voltagens. As anti-ressonâncias satélites (também em preto) não compartilham tal característica, sendo significativamente deslocadas sob a permutação dos níveis de energia dos átomos adsorvidos.

7 Conclusão

Nós exploramos teoricamente no contexto do transporte quântico um Hamiltoniano efetivo sustentando quasipartículas de Majorana em uma longa cadeia de Kitaev em sua fase topológica. Esse sistema está acoplado a um dispositivo feito por uma ponta de STM e um hospedeiro metálico com dois átomos adsorvidos. Nossa análise revelou que as funções de Green dos átomos adsorvidos tornam-se simétricas quando negligenciada a energia de hibridização entre um átomo adsorvido e o MBS acoplado lateralmente. Contudo, ao considerarmos esse parâmetro relevante, surge uma quebra de simetria nessas funções de Green.

Para verificar essa característica experimentalmente, foi proposto um procedimento de dois estágios de inversão de voltagens utilizando pontas de AFM. Como resultado, uma anti-ressonância persistente na voltagem zero com amplitude próxima a $1/2$ emerge na transmitância devido ao MBS isolado e sob o procedimento anteriormente mencionado. Também verificamos que a flutuação da marca Majorana ocorre somente quando a ponta de STM é tratada no mesmo pé de igualdade do sistema "hospedeiro+átomos adsorvidos". No caso da ponta de STM como sonda, a robustez da marca Majorana é mantida. Contudo, essa pequena diferença entre essas duas anti-ressonâncias de Majorana resulta em perfis de Fano diferentes para a transmitância de baixas voltagens versus a separação simétrica. No caso da ponta de STM atuando como sonda, a teoria de Fano é confirmada, porém com a ponta no mesmo pé de igualdade do sistema "hospedeiro+átomos adsorvidos", uma forma inesperada do perfil de Fano aparece. Concluímos portanto que para acessar esse perfil de Fano não trivial, a hipótese da ponta de STM ser utilizada como sonda não deve ser utilizada. Ao final, encontra-se o artigo referente a esta dissertação, aceito no Journal of Applied Physics (JAP).

Referências Bibliográficas

- [1] J. Alicea, Rep. Prog. Phys. **75**, 076501, (2012).
- [2] M. Leijnse and K. Flensberg, Phys. Rev. B **84**, 140501(R) (2011).
- [3] H.- F. Lü, H.- Z. Lu, and S.- Q. Shen, Phys. Rev. B **86**, 075318 (2012).
- [4] M. Leijnse and K. Flensberg, Phys. Rev. B **86**, 134528 (2011).
- [5] K. Flensberg, Phys. Rev. Lett. **106**, 090503 (2011).
- [6] M. Leijnse and K. Flensberg, Phys. Rev. Lett. **107**, 210502 (2012).
- [7] A. Y. Kitaev, Phys. Usp. **44**, 131 (2001).
- [8] Y. Cao, P. Wang, G. Xiong, M. Gong, and X.- Q. Li, Phys. Rev. B **86**, 115311 (2012).
- [9] M. Gibertini, F. Taddei, M. Polini, and R. Fazio, Phys. Rev. B **85**, 144525 (2012).
- [10] L.- J. Lang and S. Chen, Phys. Rev. B **86**, 205135 (2012).
- [11] C.- H. Lin, J. D. Sau, and S. Das Sarma, Phys. Rev. B **86**, 224511 (2012).
- [12] X.- J. Liu and A. M. Lobos, Phys. Rev. B **87**, 060504(R) (2013).
- [13] D. Sticlet, C. Bena, and P. Simon, Phys. Rev. B **87**, 104509 (2013).
- [14] J. Liu, A. C. Potter, K. T. Law, and P. A. Lee, Phys. Rev. Lett. **109**, 267002 (2012).
- [15] S. Nakosai, J. C. Budich, Y. Tanaka, B. Trauzettel, and N. Nagaosa, Phys. Rev. Lett. **110**, 117002 (2013).

-
- [16] D. Roy, C. J. Bolech, and N. Shah, *Phys. Rev. B* **86**, 094503 (2012).
- [17] G. Moore, and N. Read, *Nucl. Phys.* **B360**, 362 (1991).
- [18] L. Fu, C. L. Kane, and E. J. Mele, *Phys. Rev. Lett.* **98**, 106803 (2007).
- [19] L. Fu and C. L. Kane, *Phys. Rev. Lett.* **100**, 096407 (2008).
- [20] J. D. Sau, R. M. Lutchyn, S. Tewari, and S. Das Sarma, *Phys. Rev. Lett.* **104**, 040502 (2010).
- [21] C. J. Bolech and E. Demler, *Phys. Rev. Lett.* **98**, 237002 (2007).
- [22] D. E. Liu and H. U. Baranger, *Phys. Rev. B* **84**, 201308(R) (2011).
- [23] E. Vernek, P. H. Penteado, A. C. Seridonio and J. C. Egues, **arXiv: 1308.0092v2** [cond-mat.mes-hall] (2013).
- [24] V. Mourik, K. Zuo, S. M. Frolov, S. R. Plissard, E. P. A. M. Bakkers, and L. P. Kouwenhoven, *Science* **336**, 1003 (2012).
- [25] A. Das, Y. Ronen, Y. Most, Y. Oreg, M. Heiblum, and H. Shtrikman, *Nature Phys.* **8**, 887 (2012).
- [26] A. C. Hewson, *The Kondo Problem to Heavy Fermions*, (Cambridge University Press, Cambridge, England 1993).
- [27] D. Goldhaber-Gordon, H. Shtrikman, D. Mahalu, D. Abusch-Magder, U. Meirav, and M. A. Kastner, *Nature* **391**, 156 (1998).
- [28] S. M. Cronenwett, T. H. Oosterkamp, and L. P. Kouwenhoven, *Science* **281**, 540 (1998).
- [29] A. F. Otte, M. Ternes, K. V. Bergmann, S. Loth, H. Brune, C. P. Lutz, C. F. Hirjibehedin, and A. J. Heinrich, *Nature Physics* **4**, 847 (2008).
- [30] V. Madhavan, W. Chen, T. Jamneala, and F. Crommie, *Phys. Rev. B* **64**, 165412 (2001).
- [31] N. Knorr, M. A. Schneider, L. Diekhöner, P. Wahl and K. Kern, *Phys. Rev. Lett.* **88**, 096804 (2002).

- [32] C.Y.Lin, A. H. C. Neto and B. A. Jones, Phys. Rev. Lett. **97**, 156102 (2007).
- [33] M. Ternes, A. J. Heinrich and W. D. Schneider, J. Phys.: Condens. Matter **21**, 053001 (2009).
- [34] U. Fano, Phys. Rev. **124**, 1866 (1961).
- [35] A. E. Miroschnichenko, S. Flach, and Y. S. Kivshar, Rev. Mod. Phys. **82**,2257 (2010).
- [36] A. C. Seridonio, E. C. Siqueira, F. M. Souza, R. S. Machado, S. S. Lyra, and I. A. Shelykh, Phys. Rev. B **88**, 195122 (2013).
- [37] A. C. Seridonio, F. S. Orahcio, F. M. Souza, and M. S. Figueira, Phys. Rev. B **85**, 165109 (2012).

8 Apêndice

8.1 Funções de Green dos átomos adsorvidos

Aqui nós determinaremos as funções de Green $\tilde{\mathcal{R}}_{d_j d_j}(\varepsilon)$ e $\tilde{\mathcal{R}}_{d_j d_{\bar{j}}}(\varepsilon)$. Vamos começar introduzindo a representação dos Majoranas

$$\eta_1 = \frac{1}{\sqrt{2}} (f^\dagger + f) \quad (8.1)$$

e

$$\eta_2 = i \frac{1}{\sqrt{2}} (f^\dagger - f). \quad (8.2)$$

Assim nós temos

$$\begin{aligned} i\epsilon_M \eta_1 \eta_2 &= -\epsilon_M \frac{1}{2} (f^\dagger f^\dagger - f^\dagger f + f f^\dagger - f f) \\ &= -\epsilon_M \frac{1}{2} (-f^\dagger f + f f^\dagger) \\ &= -\epsilon_M \frac{1}{2} (-f^\dagger f + 1 - f^\dagger f) \\ &= \epsilon_M \left(f^\dagger f - \frac{1}{2} \right), \end{aligned} \quad (8.3)$$

$$\begin{aligned} \lambda (d_1 - d_1^\dagger) \eta_1 &= \frac{\lambda}{\sqrt{2}} (d_1 - d_1^\dagger) (f^\dagger + f) \\ &= \frac{\lambda}{\sqrt{2}} (d_1 f^\dagger + d_1 f - d_1^\dagger f^\dagger - d_1^\dagger f) \end{aligned} \quad (8.4)$$

Assim, o Hamiltoniano efetivo do sistema pode ser escrito da seguinte maneira

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_e &= \sum_k \varepsilon_k c_k^\dagger c_k + \sum_j \varepsilon_j d_j^\dagger d_j + V \sum_{jk} (c_k^\dagger d_j + H.c.) \\ &+ \epsilon_M \left(f^\dagger f - \frac{1}{2} \right) + \frac{\lambda}{\sqrt{2}} (d_1 f^\dagger + d_1 f - d_1^\dagger f^\dagger - d_1^\dagger f) \end{aligned} \quad (8.5)$$

Agora nós consideramos a função de Green

$$\mathcal{R}_{d_j d_j}(t) = -\frac{i}{\hbar} \theta(t) \mathcal{Z}_e^{-1} \sum_n e^{-\beta E_n} \langle n | [d_j(t), d_j^\dagger(0)]_+ | n \rangle \quad (8.6)$$

e

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \mathcal{R}_{d_j d_j}(t) &= -\frac{i}{\hbar} \delta(t) \mathcal{Z}_e^{-1} \sum_n e^{-\beta E_n} \langle n | [d_j(t), d_j^\dagger(0)]_+ | n \rangle \\ &+ \left(-\frac{i}{\hbar} \right) \theta(t) \mathcal{Z}_e^{-1} \sum_n e^{-\beta E_n} \langle n | \left[\frac{\partial}{\partial t} d_j(t), d_j^\dagger(0) \right]_+ | n \rangle. \end{aligned} \quad (8.7)$$

Substituímos a relação

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} d_j(t) &= -\frac{i}{\hbar} [d_j, \mathcal{H}] = -\frac{i}{\hbar} \left\{ \varepsilon_j d_j(t) + V \sum_k c_k(t) \right\} \\ &+ \left(-\frac{i}{\hbar} \right) (-\delta_{j1}) \lambda \eta_1(t) \end{aligned} \quad (8.8)$$

na Eq. (8.7), com

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

$$\begin{aligned} d_j d_1 f^\dagger + d_j d_1 f - d_j d_1^\dagger f^\dagger - d_j d_1^\dagger f - d_1 f^\dagger d_j - d_1 f d_j + d_1^\dagger f^\dagger d_j + d_1^\dagger f d_j \\ = -\delta_{j1} (f^\dagger + f), \end{aligned} \quad (8.9)$$

$$\begin{aligned}
\left[d_j, \sum_{\tilde{j}k} V c_k^\dagger d_{\tilde{j}} \right] &+ \left[d_j, \sum_{\tilde{j}k} V d_{\tilde{j}}^\dagger c_k \right] \\
&= V \sum_k c_k
\end{aligned} \tag{8.10}$$

e

$$\begin{aligned}
\left[d_j, \sum_{\tilde{j}} \varepsilon_{\tilde{j}} d_{\tilde{j}}^\dagger d_{\tilde{j}} \right] &= \sum_{\tilde{j}} \varepsilon_{\tilde{j}} \left[d_j, d_{\tilde{j}}^\dagger d_{\tilde{j}} \right] \\
&= \sum_{\tilde{j}} \varepsilon_{\tilde{j}} \left(d_j d_{\tilde{j}}^\dagger d_{\tilde{j}} - d_{\tilde{j}}^\dagger d_{\tilde{j}} d_j \right) \\
&= \sum_{\tilde{j}} \varepsilon_{\tilde{j}} \left(\delta_{j\tilde{j}} d_{\tilde{j}} - d_{\tilde{j}}^\dagger d_j d_{\tilde{j}} - d_{\tilde{j}}^\dagger d_{\tilde{j}} d_j \right) \\
&= \sum_{\tilde{j}} \varepsilon_{\tilde{j}} \left(\delta_{j\tilde{j}} d_{\tilde{j}} - d_{\tilde{j}}^\dagger d_j d_{\tilde{j}} - d_{\tilde{j}}^\dagger d_{\tilde{j}} d_j \right) \\
&= \sum_{\tilde{j}} \varepsilon_{\tilde{j}} \left(\delta_{j\tilde{j}} d_{\tilde{j}} + d_{\tilde{j}}^\dagger d_{\tilde{j}} d_j - d_{\tilde{j}}^\dagger d_{\tilde{j}} d_j \right) \\
&= \varepsilon_j d_j.
\end{aligned} \tag{8.11}$$

Assim obtemos

$$\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial t} \mathcal{R}_{d_j d_j}(t) &= \left(-\frac{i}{\hbar} \right) \delta(t) \mathcal{Z}_e^{-1} \sum_n e^{-\beta E_n} \langle n | \left[d_j(t), d_j^\dagger(0) \right]_+ | n \rangle \\
&+ \left(-\frac{i}{\hbar} \right) \varepsilon_j \left\{ -\frac{i}{\hbar} \theta(t) \mathcal{Z}_e^{-1} \sum_n e^{-\beta E_n} \langle n | \left[d_j(t), d_j^\dagger(0) \right]_+ | n \rangle \right\} \\
&+ \left(-\frac{i}{\hbar} \right) V \left\{ -\frac{i}{\hbar} \theta(t) \mathcal{Z}_e^{-1} \sum_n e^{-\beta E_n} \langle n | \left[\sum_k c_k(t), d_j^\dagger(0) \right]_+ | n \rangle \right\} \\
&+ \left(-\frac{i}{\hbar} \right) (-\delta_{j1}) \lambda \left\{ -\frac{i}{\hbar} \theta(t) \mathcal{Z}_e^{-1} \sum_n e^{-\beta E_n} \langle n | \left[\eta_1(t), d_j^\dagger(0) \right]_+ | n \rangle \right\}.
\end{aligned} \tag{8.12}$$

Levando em conta

$$\mathcal{R}_{\eta_1, d_j}(t) = -\frac{i}{\hbar} \theta(t) \mathcal{Z}_e^{-1} \sum_n e^{-\beta E_n} \langle n | \left[\eta_1(t), d_j^\dagger(0) \right]_+ | n \rangle \tag{8.13}$$

na Eq. (8.12), nós encontramos

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \mathcal{R}_{d_j d_j}(t) &= \left(-\frac{i}{\hbar}\right) \delta(t) \mathcal{Z}_e^{-1} \sum_n e^{-\beta E_n} \langle n | [d_j(t), d_j^\dagger(0)]_+ | n \rangle - \frac{i}{\hbar} \varepsilon_j \mathcal{R}_{d_j d_j}(t) \\ &+ \left(-\frac{i}{\hbar}\right) V \mathcal{R}_{c_k d_j}(t) - \frac{i}{\hbar} (-\delta_{j1}) \lambda \mathcal{R}_{\eta_1, d_j}(t). \end{aligned} \quad (8.14)$$

Em coordenadas de energia, a Eq. (8.14) torna-se

$$(\varepsilon + i\eta) \tilde{\mathcal{R}}_{d_j d_j}(\varepsilon) = 1 + \varepsilon_j \tilde{\mathcal{R}}_{d_j d_j}(\varepsilon) + V \tilde{\mathcal{R}}_{c_k d_j}(\varepsilon) - \delta_{j1} \lambda \tilde{\mathcal{R}}_{\eta_1, d_j}(\varepsilon). \quad (8.15)$$

Podemos escrever a Eq. (8.15) da seguinte forma

$$(\varepsilon - \varepsilon_j + i\eta) \tilde{\mathcal{R}}_{d_j d_j}(\varepsilon) = 1 + V \tilde{\mathcal{R}}_{c_k d_j}(\varepsilon) - \delta_{j1} \lambda \tilde{\mathcal{R}}_{\eta_1, d_j}(\varepsilon). \quad (8.16)$$

Usando na Eq. (8.16)

$$\tilde{\Sigma}^I = -\frac{\Delta}{1 + (w\pi\rho_0)^2} = -\frac{\Delta}{1 + x} \quad (8.17)$$

e

$$\tilde{\Sigma}^R = -\frac{\Delta(w\pi\rho_0)}{1 + (w\pi\rho_0)^2} = -\frac{\sqrt{x}}{1 + x} \Delta \quad (8.18)$$

para mostrar que

$$\left(\varepsilon - \tilde{\varepsilon}_j - i\tilde{\Sigma}^I\right) \tilde{\mathcal{R}}_{d_j d_j}(\varepsilon) = 1 + \left(\tilde{\Sigma}^R + i\tilde{\Sigma}^I\right) \sum_{l \neq j} \tilde{\mathcal{R}}_{d_j d_l}(\varepsilon) - \delta_{j1} \lambda \tilde{\mathcal{R}}_{\eta_1, d_j}(\varepsilon), \quad (8.19)$$

onde

$$\tilde{\varepsilon}_j = \varepsilon_j + \tilde{\Sigma}^R \quad (8.20)$$

é o nível de energia para o átomo adsorvido j renormalizado. Nós repetimos a EOM para a função de Green

$$\begin{aligned} \mathcal{R}_{\eta_1, d_j}(t) &= -\frac{i}{\hbar} \theta(t) \mathcal{Z}_e^{-1} \sum_n e^{-\beta E_n} \langle n | [\eta_1(t), d_j^\dagger(0)]_+ | n \rangle \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} \mathcal{R}_{f, d_j}(t) + \frac{1}{\sqrt{2}} \mathcal{R}_{f^+, d_j}(t), \end{aligned} \quad (8.21)$$

com

$$\mathcal{R}_{f,d_j}(t) = -\frac{i}{\hbar}\theta(t)\mathcal{Z}_e^{-1}\sum_n e^{-\beta E_n}\langle n|[f(t),d_j^\dagger(0)]_+|n\rangle \quad (8.22)$$

e

$$\mathcal{R}_{f^+,d_j}(t) = -\frac{i}{\hbar}\theta(t)\mathcal{Z}_e^{-1}\sum_n e^{-\beta E_n}\langle n|[f^\dagger(t),d_j^\dagger(0)]_+|n\rangle \quad (8.23)$$

para obter $\tilde{\mathcal{R}}_{\eta_1,d_j}(\varepsilon)$. Em coordenadas de energia, a Eq. (8.21) se reduz a

$$\tilde{\mathcal{R}}_{\eta_1,d_j}(\varepsilon) = \frac{1}{\sqrt{2}}\tilde{\mathcal{R}}_{f,d_j}(\varepsilon) + \frac{1}{\sqrt{2}}\tilde{\mathcal{R}}_{f^+,d_j}(\varepsilon). \quad (8.24)$$

Primeiro, nós consideramos

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}\mathcal{R}_{f,d_j}(t) &= -\frac{i}{\hbar}\delta(t)\mathcal{Z}_e^{-1}\sum_n e^{-\beta E_n}\langle n|[f(t),d_j^\dagger(0)]_+|n\rangle \\ &\quad + \left(-\frac{i}{\hbar}\right)\theta(t)\mathcal{Z}_e^{-1}\sum_n e^{-\beta E_n}\langle n|\left[\frac{\partial}{\partial t}f(t),d_j^\dagger(0)\right]_+|n\rangle \end{aligned} \quad (8.25)$$

e

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}f(t) &= -\frac{i}{\hbar}[f,\mathcal{H}_e] = -\frac{i}{\hbar}\left[f,\epsilon_M\left(f^\dagger f - \frac{1}{2}\right)\right] - \frac{i}{\hbar}\left[f,\frac{\lambda}{\sqrt{2}}(d_1 f^\dagger + d_1 f - d_1^\dagger f^\dagger - d_1^\dagger f)\right] \\ &= -\frac{i}{\hbar}\epsilon_M(ff^\dagger f - f^\dagger ff) \\ &\quad - \frac{i}{\hbar}\frac{\lambda}{\sqrt{2}}\{fd_1 f^\dagger + fd_1 f - fd_1^\dagger f^\dagger - fd_1^\dagger f - d_1 f^\dagger f - d_1 ff + d_1^\dagger f^\dagger f + d_1^\dagger ff\} \\ &= -\frac{i}{\hbar}\epsilon_M(f - f^\dagger ff - f^\dagger ff) - \frac{i}{\hbar}\frac{\lambda}{\sqrt{2}}\{fd_1 f^\dagger - fd_1^\dagger f^\dagger - d_1 f^\dagger f + d_1^\dagger f^\dagger f\} \\ &= -\frac{i}{\hbar}\epsilon_M(f + f^\dagger ff - f^\dagger ff) - \frac{i}{\hbar}\frac{\lambda}{\sqrt{2}}\{fd_1 f^\dagger - d_1 f^\dagger f + d_1^\dagger f^\dagger f - fd_1^\dagger f^\dagger\} \\ &= -\frac{i}{\hbar}\epsilon_M f - \frac{i}{\hbar}\frac{\lambda}{\sqrt{2}}\{fd_1 f^\dagger - d_1 f^\dagger f + d_1^\dagger f^\dagger f + d_1^\dagger ff\} \\ &= -\frac{i}{\hbar}\epsilon_M f - \frac{i}{\hbar}\frac{\lambda}{\sqrt{2}}\{-d_1(ff^\dagger + f^\dagger f) + d_1^\dagger(ff^\dagger + f^\dagger f)\} \\ &= -\frac{i}{\hbar}\epsilon_M f - \frac{i}{\hbar}\frac{\lambda}{\sqrt{2}}\{d_1^\dagger - d_1\}, \end{aligned} \quad (8.26)$$

que conduz a

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial}{\partial t} \mathcal{R}_{f,d_j}(t) &= -\frac{i}{\hbar} \delta(t) \mathcal{Z}_e^{-1} \sum_n e^{-\beta E_n} \langle n | [f(t), d_j^\dagger(0)]_+ | n \rangle \\
 &\quad - \frac{i}{\hbar} \epsilon_M \left\{ -\frac{i}{\hbar} \theta(t) \mathcal{Z}_e^{-1} \sum_n e^{-\beta E_n} \langle n | [f(t), d_j^\dagger(0)]_+ | n \rangle \right\} \\
 &\quad - \frac{i}{\hbar} \frac{\lambda}{\sqrt{2}} (-1) \left\{ -\frac{i}{\hbar} \theta(t) \mathcal{Z}_e^{-1} \sum_n e^{-\beta E_n} \langle n | [d_1(t), d_j^\dagger(0)]_+ | n \rangle \right\} \\
 &\quad - \frac{i}{\hbar} \frac{\lambda}{\sqrt{2}} (-1) \left\{ -\frac{i}{\hbar} \theta(t) \mathcal{Z}_e^{-1} \sum_n e^{-\beta E_n} \langle n | [d_1^\dagger(t), d_j^\dagger(0)]_+ | n \rangle \right\} \\
 &= -\frac{i}{\hbar} \delta(t) \mathcal{Z}_e^{-1} \sum_n e^{-\beta E_n} \langle n | [f(t), d_j^\dagger(0)]_+ | n \rangle - \frac{i}{\hbar} \epsilon_M \mathcal{R}_{f,d_j}(t) \\
 &\quad - \frac{i}{\hbar} \frac{\lambda}{\sqrt{2}} (-1) \mathcal{R}_{d_1,d_j}(t) - \frac{i}{\hbar} \frac{\lambda}{\sqrt{2}} \mathcal{R}_{d_1^\dagger,d_j}(t). \tag{8.27}
 \end{aligned}$$

De modo similar para a Eq. (8.23), nós escrevemos

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial}{\partial t} \mathcal{R}_{f^\dagger,d_j}(t) &= -\frac{i}{\hbar} \delta(t) \mathcal{Z}_e^{-1} \sum_n e^{-\beta E_n} \langle n | [f^\dagger(t), d_j^\dagger(0)]_+ | n \rangle \\
 &\quad + \left(-\frac{i}{\hbar} \right) \theta(t) \mathcal{Z}_e^{-1} \sum_n e^{-\beta E_n} \langle n | \left[\frac{\partial}{\partial t} f^\dagger(t), d_j^\dagger(0) \right]_+ | n \rangle, \tag{8.28}
 \end{aligned}$$

Calculando $\frac{\partial}{\partial t} f^\dagger(t)$, temos

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial}{\partial t} f^\dagger(t) &= -\frac{i}{\hbar} [f^\dagger, \mathcal{H}_e] = -\frac{i}{\hbar} \left[f^\dagger, \epsilon_M \left(f^\dagger f - \frac{1}{2} \right) \right] - \frac{i}{\hbar} \left[f^\dagger, \frac{\lambda}{\sqrt{2}} (d_1 f^\dagger + d_1 f - d_1^\dagger f^\dagger - d_1^\dagger f) \right] \\
 &= -\frac{i}{\hbar} \epsilon_M (f^\dagger f^\dagger f - f^\dagger f f^\dagger) \\
 &\quad - \frac{i}{\hbar} \frac{\lambda}{\sqrt{2}} \{ f^\dagger d_1 f^\dagger + f^\dagger d_1 f - f^\dagger d_1^\dagger f^\dagger - f^\dagger d_1^\dagger f - d_1 f^\dagger f^\dagger - d_1 f f^\dagger + d_1^\dagger f^\dagger f^\dagger + d_1^\dagger f f^\dagger \} \\
 &= -\frac{i}{\hbar} \epsilon_M (f^\dagger f^\dagger f - f^\dagger + f^\dagger f^\dagger f) - \frac{i}{\hbar} \frac{\lambda}{\sqrt{2}} \{ f^\dagger d_1 f - f^\dagger d_1^\dagger f - d_1 f f^\dagger + d_1^\dagger f f^\dagger \} \\
 &= -\frac{i}{\hbar} \epsilon_M (-f^\dagger) - \frac{i}{\hbar} \frac{\lambda}{\sqrt{2}} \{ d_1^\dagger (f f^\dagger + f^\dagger f) - d_1 (f f^\dagger + f^\dagger f) \} \\
 &= -\frac{i}{\hbar} \epsilon_M (-f^\dagger) - \frac{i}{\hbar} \frac{\lambda}{\sqrt{2}} \{ d_1^\dagger - d_1 \} \tag{8.29}
 \end{aligned}$$

e

$$\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial t} \mathcal{R}_{f^\dagger, d_j}(t) &= -\frac{i}{\hbar} \delta(t) \mathcal{Z}_e^{-1} \sum_n e^{-\beta E_n} \langle n | [f^\dagger(t), d_j^\dagger(0)]_+ | n \rangle \\
&\quad - \frac{i}{\hbar} \epsilon_M(-1) \left\{ -\frac{i}{\hbar} \theta(t) \mathcal{Z}_e^{-1} \sum_n e^{-\beta E_n} \langle n | [f^\dagger(t), d_j^\dagger(0)]_+ | n \rangle \right\} \\
&\quad - \frac{i}{\hbar} \frac{\lambda}{\sqrt{2}} (-1) \left\{ -\frac{i}{\hbar} \theta(t) \mathcal{Z}_e^{-1} \sum_n e^{-\beta E_n} \langle n | [d_1(t), d_j^\dagger(0)]_+ | n \rangle \right\} \\
&\quad - \frac{i}{\hbar} \frac{\lambda}{\sqrt{2}} \left\{ -\frac{i}{\hbar} \theta(t) \mathcal{Z}_e^{-1} \sum_n e^{-\beta E_n} \langle n | [d_1^\dagger(t), d_j^\dagger(0)]_+ | n \rangle \right\} \quad (8.30) \\
&= -\frac{i}{\hbar} \delta(t) \mathcal{Z}_e^{-1} \sum_n e^{-\beta E_n} \langle n | [f^\dagger(t), d_j^\dagger(0)]_+ | n \rangle - \frac{i}{\hbar} \epsilon_M(-1) \mathcal{R}_{f^\dagger, d_j}(t) \\
&\quad - \frac{i}{\hbar} \frac{\lambda}{\sqrt{2}} (-1) \mathcal{R}_{d_1, d_j}(t) - \frac{i}{\hbar} \frac{\lambda}{\sqrt{2}} \mathcal{R}_{d_1^\dagger, d_j}(t).
\end{aligned}$$

Tomando a transformada de Fourier no tempo nas Eqs. (8.24) e (8.30), nós encontramos

$$(\varepsilon + i\eta) \tilde{\mathcal{R}}_{\eta_1, d_j}(\varepsilon) = \frac{1}{\sqrt{2}} (\varepsilon + i\eta) \tilde{\mathcal{R}}_{f, d_j}(\varepsilon) + \frac{1}{\sqrt{2}} (\varepsilon + i\eta) \tilde{\mathcal{R}}_{f^\dagger, d_j}(\varepsilon), \quad (8.31)$$

$$(\varepsilon + i\eta) \tilde{\mathcal{R}}_{f, d_j}(\varepsilon) = \epsilon_M \tilde{\mathcal{R}}_{f, d_j}(\varepsilon) - \frac{\lambda}{\sqrt{2}} \tilde{\mathcal{R}}_{d_1, d_j}(\varepsilon) + \frac{\lambda}{\sqrt{2}} \tilde{\mathcal{R}}_{d_1^\dagger, d_j}(\varepsilon), \quad (8.32)$$

e

$$(\varepsilon + i\eta) \tilde{\mathcal{R}}_{f^\dagger, d_j}(\varepsilon) = -\epsilon_M \tilde{\mathcal{R}}_{f^\dagger, d_j}(\varepsilon) - \frac{\lambda}{\sqrt{2}} \tilde{\mathcal{R}}_{d_1, d_j}(\varepsilon) + \frac{\lambda}{\sqrt{2}} \tilde{\mathcal{R}}_{d_1^\dagger, d_j}(\varepsilon). \quad (8.33)$$

Utilizando a Eq. (8.15) generalizada

$$(\varepsilon + i\eta) \tilde{\mathcal{R}}_{d_j, d_l}(\varepsilon) = \delta_{jl} + \varepsilon_j \tilde{\mathcal{R}}_{d_j, d_l}(\varepsilon) + \sqrt{2} V \tilde{\mathcal{R}}_{f_e d_l}(\varepsilon) - \delta_{j1} \lambda \tilde{\mathcal{R}}_{\eta_1, d_l}(\varepsilon), \quad (8.34)$$

que dá

$$\left(\varepsilon - \tilde{\varepsilon}_j - i \sum^I \right) \tilde{\mathcal{R}}_{d_j, d_l}(\varepsilon) = \delta_{jl} + \left(\sum^R + i \sum^I \right) \sum_{\tilde{l} \neq j} \tilde{\mathcal{R}}_{d_j, d_{\tilde{l}}}(\varepsilon) - \delta_{j1} \lambda \tilde{\mathcal{R}}_{\eta_1, d_l}(\varepsilon). \quad (8.35)$$

Em particular para $l \neq j$, a Eq. (8.35) torna-se

$$\left(\varepsilon - \tilde{\varepsilon}_j - i\tilde{\Sigma}^I\right) \tilde{\mathcal{R}}_{d_j d_l}(\varepsilon) = \left(\tilde{\Sigma}^R + i\tilde{\Sigma}^I\right) \tilde{\mathcal{R}}_{d_l d_l}(\varepsilon) - \delta_{j1} \lambda \tilde{\mathcal{R}}_{\eta_1, d_l}(\varepsilon). \quad (8.36)$$

Assim nós temos que resolver as Eqs. (8.36) e

$$\left(\varepsilon - \tilde{\varepsilon}_j - i\tilde{\Sigma}^I\right) \tilde{\mathcal{R}}_{d_j d_j}(\varepsilon) = 1 + \left(\tilde{\Sigma}^R + i\tilde{\Sigma}^I\right) \sum_{l \neq j} \tilde{\mathcal{R}}_{d_j d_l}(\varepsilon) - \delta_{j1} \lambda \tilde{\mathcal{R}}_{\eta_1, d_j}(\varepsilon). \quad (8.37)$$

Tais equações nós podemos reescrever introduzindo uma nova notação,

$$\left(\varepsilon - \tilde{\varepsilon}_j - i\tilde{\Sigma}^I\right) \tilde{\mathcal{R}}_{d_j d_j}(\varepsilon) = 1 + \left(\tilde{\Sigma}^R + i\tilde{\Sigma}^I\right) \tilde{\mathcal{R}}_{d_j d_{\bar{j}}}(\varepsilon) - \delta_{j1} \lambda \tilde{\mathcal{R}}_{\eta_1, d_j}(\varepsilon) \quad (8.38)$$

e

$$\left(\varepsilon - \tilde{\varepsilon}_j - i\tilde{\Sigma}^I\right) \tilde{\mathcal{R}}_{d_j d_{\bar{j}}}(\varepsilon) = \left(\tilde{\Sigma}^R + i\tilde{\Sigma}^I\right) \tilde{\mathcal{R}}_{d_{\bar{j}} d_{\bar{j}}}(\varepsilon) - \delta_{j1} \lambda \tilde{\mathcal{R}}_{\eta_1, d_{\bar{j}}}(\varepsilon), \quad (8.39)$$

com \bar{j} oposto a j , $\bar{1} = 2$ e $\bar{2} = 1$. Como podemos perceber, a função de Green $\tilde{\mathcal{R}}_{\eta_1, d_2}(\varepsilon)$ deve ser encontrada. Das Eqs. (8.31), (8.32) e (8.33) temos

$$\tilde{\mathcal{R}}_{\eta_1, d_2}(\varepsilon) = \frac{1}{\sqrt{2}} \tilde{\mathcal{R}}_{f, d_2}(\varepsilon) + \frac{1}{\sqrt{2}} \tilde{\mathcal{R}}_{f^+, d_2}(\varepsilon), \quad (8.40)$$

$$\tilde{\mathcal{R}}_{f, d_2}(\varepsilon) = -\frac{\frac{\lambda}{\sqrt{2}} \tilde{\mathcal{R}}_{d_1, d_2}(\varepsilon)}{(\varepsilon - \epsilon_M + i\eta)} + \frac{\frac{\lambda}{\sqrt{2}} \tilde{\mathcal{R}}_{d_1^\dagger, d_2}(\varepsilon)}{(\varepsilon - \epsilon_M + i\eta)}, \quad (8.41)$$

$$\tilde{\mathcal{R}}_{f^+, d_2}(\varepsilon) = -\frac{\frac{\lambda}{\sqrt{2}} \tilde{\mathcal{R}}_{d_1, d_2}(\varepsilon)}{(\varepsilon + \epsilon_M + i\eta)} + \frac{\frac{\lambda}{\sqrt{2}} \tilde{\mathcal{R}}_{d_1^\dagger, d_2}(\varepsilon)}{(\varepsilon + \epsilon_M + i\eta)} \quad (8.42)$$

e

$$\left(\varepsilon + \tilde{\varepsilon}_1 - i\tilde{\Sigma}^I\right) \tilde{\mathcal{R}}_{d_1^\dagger, d_2}(\varepsilon) = \lambda \frac{1}{\sqrt{2}} \tilde{\mathcal{R}}_{f, d_2} + \lambda \frac{1}{\sqrt{2}} \tilde{\mathcal{R}}_{f^+, d_2}(\varepsilon). \quad (8.43)$$

Substituindo as Eqs. (8.41) e (8.42) em (8.43), nós encontramos

$$\begin{aligned}
\left(\varepsilon + \tilde{\varepsilon}_1 - i\tilde{\Sigma}^I\right) \tilde{\mathcal{R}}_{d_1^\dagger, d_2}(\varepsilon) &= -\frac{\frac{\lambda^2}{2}\tilde{\mathcal{R}}_{d_1, d_2}(\varepsilon)}{(\varepsilon - \epsilon_M + i\eta)} + \frac{\frac{\lambda^2}{2}\tilde{\mathcal{R}}_{d_1^\dagger, d_2}(\varepsilon)}{(\varepsilon - \epsilon_M + i\eta)} \\
&\quad - \frac{\frac{\lambda^2}{2}\tilde{\mathcal{R}}_{d_1, d_2}(\varepsilon)}{(\varepsilon + \epsilon_M + i\eta)} + \frac{\frac{\lambda^2}{2}\tilde{\mathcal{R}}_{d_1^\dagger, d_2}(\varepsilon)}{(\varepsilon + \epsilon_M + i\eta)} \\
&= \lambda^2 K(\varepsilon) \tilde{\mathcal{R}}_{d_1^\dagger, d_2}(\varepsilon) - \lambda^2 K(\varepsilon) \tilde{\mathcal{R}}_{d_1, d_2}(\varepsilon). \tag{8.44}
\end{aligned}$$

onde

$$\begin{aligned}
\frac{\lambda^2}{2} \left\{ \frac{1}{(\varepsilon + \epsilon_M + i\eta)} + \frac{1}{(\varepsilon - \epsilon_M + i\eta)} \right\} &= \frac{\lambda^2}{2} \frac{2\varepsilon}{(\varepsilon + \epsilon_M + i\eta)(\varepsilon - \epsilon_M + i\eta)} \\
&= \frac{\lambda^2}{2} \frac{2\varepsilon}{(\varepsilon + \epsilon_M)(\varepsilon - \epsilon_M)} = \frac{\lambda^2}{2} \frac{2\varepsilon}{(\varepsilon^2 - \epsilon_M^2)} \\
&= \lambda^2 \frac{\varepsilon}{(\varepsilon^2 - \epsilon_M^2)} = \lambda^2 \frac{1}{\varepsilon - \frac{\epsilon_M^2}{\varepsilon}} = \lambda^2 K(\varepsilon). \tag{8.45}
\end{aligned}$$

Assim,

$$\tilde{\mathcal{R}}_{d_1^\dagger, d_2}(\varepsilon) = -\frac{\lambda^2 K(\varepsilon)}{\left(\varepsilon + \tilde{\varepsilon}_1 - i\tilde{\Sigma}^I - \lambda^2 K(\varepsilon)\right)} \tilde{\mathcal{R}}_{d_1, d_2}(\varepsilon). \tag{8.46}$$

Da Eq. (8.40) e levando em conta as Eqs. (8.41), (8.42) e (8.44), temos

$$-\lambda \tilde{\mathcal{R}}_{\eta_1, d_2}(\varepsilon) = \lambda^2 K(\varepsilon) \left(1 + \lambda^2 \tilde{K}(\varepsilon)\right) \tilde{\mathcal{R}}_{d_1, d_2}(\varepsilon) \tag{8.47}$$

e

$$-\lambda \tilde{\mathcal{R}}_{\eta_1, d_1}(\varepsilon) = \lambda^2 K(\varepsilon) \left(1 + \lambda^2 \tilde{K}(\varepsilon)\right) \tilde{\mathcal{R}}_{d_1, d_1}(\varepsilon), \tag{8.48}$$

com $\tilde{K}(\varepsilon) = \frac{K(\varepsilon)}{\left(\varepsilon + \tilde{\varepsilon}_1 - i\tilde{\Sigma}^I - \lambda^2 K(\varepsilon)\right)}$,

$$\left(\varepsilon - \tilde{\varepsilon}_1 - i\tilde{\Sigma}^I\right) \tilde{\mathcal{R}}_{d_1 d_1}(\varepsilon) = 1 + \left(\tilde{\Sigma}^R + i\tilde{\Sigma}^I\right) \tilde{\mathcal{R}}_{d_1 d_2}(\varepsilon) - \lambda \tilde{\mathcal{R}}_{\eta_1, d_1}(\varepsilon), \tag{8.49}$$

$$\left(\varepsilon - \tilde{\varepsilon}_1 - i\tilde{\Sigma}^I\right) \tilde{\mathcal{R}}_{d_1 d_2}(\varepsilon) = \left(\tilde{\Sigma}^R + i\tilde{\Sigma}^I\right) \tilde{\mathcal{R}}_{d_2 d_2}(\varepsilon) - \lambda \tilde{\mathcal{R}}_{\eta_1, d_2}(\varepsilon), \tag{8.50}$$

$$\left(\varepsilon - \tilde{\varepsilon}_2 - i\tilde{\Sigma}^I\right) \tilde{\mathcal{R}}_{d_2d_2}(\varepsilon) = 1 + \left(\tilde{\Sigma}^R + i\tilde{\Sigma}^I\right) \tilde{\mathcal{R}}_{d_2d_1}(\varepsilon), \quad (8.51)$$

e

$$\left(\varepsilon - \tilde{\varepsilon}_2 - i\tilde{\Sigma}^I\right) \tilde{\mathcal{R}}_{d_2d_1}(\varepsilon) = \left(\tilde{\Sigma}^R + i\tilde{\Sigma}^I\right) \tilde{\mathcal{R}}_{d_1d_1}(\varepsilon). \quad (8.52)$$

Assim, o sistema de funções de Green fica da seguinte forma

$$\left[\varepsilon - \tilde{\varepsilon}_1 - i\tilde{\Sigma}^I - \lambda^2 K(\varepsilon) \left(1 + \lambda^2 \tilde{K}(\varepsilon)\right)\right] \tilde{\mathcal{R}}_{d_1d_1}(\varepsilon) = 1 + \left(\tilde{\Sigma}^R + i\tilde{\Sigma}^I\right) \tilde{\mathcal{R}}_{d_1d_2}(\varepsilon), \quad (8.53)$$

$$\left[\varepsilon - \tilde{\varepsilon}_1 - i\tilde{\Sigma}^I - \lambda^2 K(\varepsilon) \left(1 + \lambda^2 \tilde{K}(\varepsilon)\right)\right] \tilde{\mathcal{R}}_{d_1d_2}(\varepsilon) = \left(\tilde{\Sigma}^R + i\tilde{\Sigma}^I\right) \tilde{\mathcal{R}}_{d_2d_2}(\varepsilon), \quad (8.54)$$

$$\left(\varepsilon - \tilde{\varepsilon}_2 - i\tilde{\Sigma}^I\right) \tilde{\mathcal{R}}_{d_2d_2}(\varepsilon) = 1 + \left(\tilde{\Sigma}^R + i\tilde{\Sigma}^I\right) \tilde{\mathcal{R}}_{d_2d_1}(\varepsilon), \quad (8.55)$$

e

$$\left(\varepsilon - \tilde{\varepsilon}_2 - i\tilde{\Sigma}^I\right) \tilde{\mathcal{R}}_{d_2d_1}(\varepsilon) = \left(\tilde{\Sigma}^R + i\tilde{\Sigma}^I\right) \tilde{\mathcal{R}}_{d_1d_1}(\varepsilon), \quad (8.56)$$

Resolvendo o sistema acima, nós encontramos as funções de Green $\tilde{\mathcal{R}}_{d_1d_1}(\varepsilon)$, $\tilde{\mathcal{R}}_{d_2d_2}(\varepsilon)$, $\tilde{\mathcal{R}}_{d_1d_2}(\varepsilon)$ e $\tilde{\mathcal{R}}_{d_2d_1}(\varepsilon)$. Desse modo, o sistema final de funções de Green fica da seguinte forma

$$\tilde{\mathcal{R}}_{d_1d_1}(\varepsilon) = \frac{1}{\left[\varepsilon - \tilde{\varepsilon}_1 - i\tilde{\Sigma}^I - \lambda^2 K(\varepsilon) \left(1 + \lambda^2 \tilde{K}(\varepsilon)\right)\right] - \frac{\left(\tilde{\Sigma}^R + i\tilde{\Sigma}^I\right)^2}{\left(\varepsilon - \tilde{\varepsilon}_2 - i\tilde{\Sigma}^I\right)^2}}, \quad (8.57)$$

$$\tilde{\mathcal{R}}_{d_2 d_2}(\varepsilon) = \frac{1}{(\varepsilon - \tilde{\varepsilon}_2 - i\tilde{\Sigma}^I)} + \frac{(\tilde{\Sigma}^R + i\tilde{\Sigma}^I)^2}{(\varepsilon - \tilde{\varepsilon}_2 - i\tilde{\Sigma}^I)^2} \tilde{\mathcal{R}}_{d_1 d_1}(\varepsilon), \quad (8.58)$$

$$\tilde{\mathcal{R}}_{d_1 d_2}(\varepsilon) = \frac{(\tilde{\Sigma}^R + i\tilde{\Sigma}^I)}{[\varepsilon - \tilde{\varepsilon}_1 - i\tilde{\Sigma}^I - \lambda^2 K(\varepsilon)(1 + \lambda^2 \tilde{K}(\varepsilon))]} \quad (8.59)$$

$$\times \left[\frac{1}{(\varepsilon - \tilde{\varepsilon}_2 - i\tilde{\Sigma}^I)} + \frac{(\tilde{\Sigma}^R + i\tilde{\Sigma}^I)^2}{(\varepsilon - \tilde{\varepsilon}_2 - i\tilde{\Sigma}^I)^2} \tilde{\mathcal{R}}_{d_1 d_1}(\varepsilon) \right], \quad (8.60)$$

$$\tilde{\mathcal{R}}_{d_2 d_1}(\varepsilon) = \frac{(\tilde{\Sigma}^R + i\tilde{\Sigma}^I)}{(\varepsilon - \tilde{\varepsilon}_2 - i\tilde{\Sigma}^I)} \tilde{\mathcal{R}}_{d_1 d_1}(\varepsilon), \quad (8.61)$$

Fano interference and a slight fluctuation of the Majorana hallmark

A. C. Seridonio,^{1,2} E. C. Siqueira,² F. A. Dessotti,² R. S. Machado,² and M. Yoshida¹

¹*Instituto de Geociências e Ciências Exatas-IGCE, Universidade Estadual Paulista, Departamento de Física, 13506-970, Rio Claro, São Paulo, Brazil*

²*Departamento de Física e Química, Universidade Estadual Paulista, 15385-000, Ilha Solteira, São Paulo, Brazil*

(Received 19 December 2013; accepted 31 January 2014; published online 13 February 2014)

According to the Liu and Baranger [Phys. Rev. B 84, 201308(R) (2011)], an isolated Majorana state bound to one edge of a long enough Kitaev chain in the topological phase and connected to a quantum dot, results in a robust transmittance of 1/2 at zero-bias. In this work, we show that the removal of such a hallmark can be achieved by using a metallic surface hosting two adatoms in a scenario where there is a lack of symmetry in the Fano effect, which is feasible by coupling the Kitaev chain to one of these adatoms. Thus in order to detect this feature experimentally, one should apply the following two-stage procedure: (i) first, attached to the adatoms, one has to lock AFM tips in opposite gate voltages (symmetric detuning of the levels $\Delta\epsilon$) and measure by an STM tip, the zero-bias conductance; (ii) thereafter, the measurement of the conductance is repeated with the gates swapped. For $|\Delta\epsilon|$ away from the Fermi energy and in the case of strong coupling tip-host, this approach reveals in the transmittance, a persistent dip placed at zero-bias and immune to the aforementioned permutation, but characterized by an amplitude that fluctuates slightly around 1/2. However, in the case of a tip acting as a probe, the adatom decoupled from the Kitaev chain becomes completely inert and no fluctuation is observed. Therefore, the STM tip must be considered in the same footing as the “host+adatoms” system. As a result, we have found that despite the small difference between these two Majorana dips, the zero-bias transmittance as a function of the symmetric detuning yields two distinct behaviors, in which one of them is unpredictable by the standard Fano’s theory. Therefore, to access such a non trivial pattern of Fano interference, the hypothesis of the STM tip acting as a probe should be discarded. © 2014 AIP Publishing LLC. [<http://dx.doi.org/10.1063/1.4865503>]

I. INTRODUCTION

Majorana fermions are particles that constitute their own antiparticles. Such a proposal was made almost a century ago by Ettore Majorana in the context of high-energy physics. In solid state systems, these exotic particles are not fundamental but emerge as quasiparticle excitations.¹ This species of excitation is ranked as non-Abelian anyons and obeys an unusual quantum statistics. Its most remarkable property lies on the possibility of bounding two far apart Majoranas that define an unique nonlocal Dirac fermion. Once this spatially delocalized state is occupied, it yields a robust qubit decoupled from the surroundings, thus avoiding decoherence due to perturbations. This protected qubit then enlarges the feasibility to make these blocks as essential to the accomplishment of a topological quantum computer. Thus, in the last few years, the quest for devices nesting Majorana fermions has received much attention from the community of researchers working with quantum computing.^{2–6}

To the best knowledge, the superconductor state is considered suitable for the emergence of Majorana excitations. Superconductivity lies on Cooper-pair condensation and spontaneous breaking of charge conservation, thus leading to the superposition of electrons and holes. However, s-wave superconductivity arises from electrons with opposite spins that result in distinct operators for creation and annihilation of quasiparticles, thus preventing the realization of Majorana bound

states (MBSs). To support them, a spinless superconductor is indeed required. Such conditions can be found in the topological phase of the Kitaev chain,⁷ which offers the proper environment to sustain Majoranas. The Majoranas are zero-energy modes, in particular, placed at the edges of this chain.

The engineering of a sample with *p*-wave superconductivity can be achieved experimentally by proximity effect. It is known that a *s*-wave superconductor nearby a semiconducting nanowire with strong spin-orbit interaction and crossed by a magnetic field, induces *p*-wave superconductivity on the latter system.^{8–16} Additionally, the existence of Majoranas are predicted in the fractional quantum Hall state with filling factor $\nu = 5/2$,¹⁷ in three-dimensional topological insulators¹⁸ and at the core of superconducting vortices.^{19–21} In this scenario, quantum transport becomes a sensible tool for detecting Majorana quasiparticles. Particularly in Ref. 22, it was predicted for the experimental setup of a single quantum dot (QD) side-coupled to a Majorana state, that the zero-bias peak (ZBP) for the conductance should be given by the robust Majorana hallmark $\mathcal{G} = 0.5\mathcal{G}_0$, where $\mathcal{G}_0 = e^2/h$ is the background conductance. We highlight that in Ref. 23, Vernek *et al.* have determined that such an amplitude arises from the leaking of the Majorana state into the QD.

Experimentally, a persistent ZBP has been observed in transport measurements through a setup composed by a nanowire of indium antimonide merged to gold and niobium titanium nitride.²⁴ In this aforementioned system, Majoranas are

supposed to exist due to the ZBP that stands up to a wide range of magnetic fields and gate voltages. Such a robustness of the ZBP has also been found in the analogous system of a superconductor of aluminium close to a nanowire of indium arsenide.²⁵ Moreover, we stress that the ZBP feature may also have another physical origin, for instance, the Kondo effect.^{26–33}

In this context, an apparatus based on Fano effect^{34,35} becomes an alternative approach to detect a Majorana state. Here, we benefit of this mechanism, an interference phenomenon found in systems where tunneling channels compete for the electron transport. This effect can be detectable by the Scanning Tunneling Microscope (STM), a device made by a metallic tip that detects, for low enough temperatures, the transmittance through a system by measuring the differential conductance.^{29–33} Thus, we have studied theoretically the conductance probed by an STM tip of a metallic surface coupled to two adatoms, in which one of them is coupled to a MBS hosted by a long enough Kitaev chain in the topological phase. We should remark that nowadays such a chain is achievable experimentally as found in Ref. 24, whose system becomes the most promising candidate to our proposal [see Fig. 1].

Additionally, we have considered in the model two Atomic Force Microscope (AFM) tips capacitively coupled to the adatoms, just in order to tune their levels as proposed in Ref. 36. Our approach employs the spinless Hamiltonian of Ref. 22 in combination with the equation-of-motion procedure for the Green's functions.

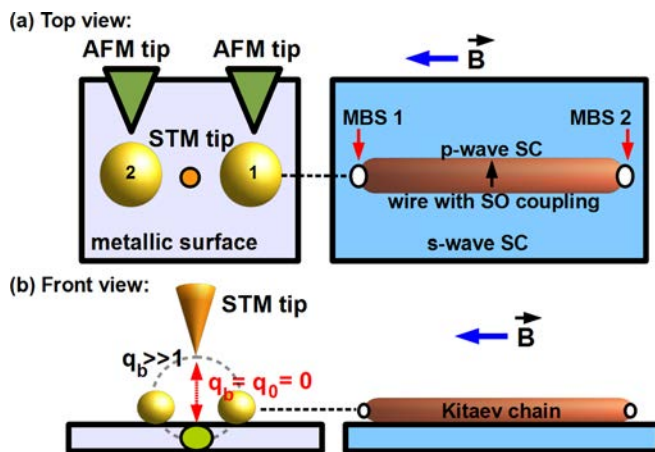


FIG. 1. Two perspectives of the same apparatus: in panel (a) we have the top view, while (b) represents the front view. In both, Majorana bound states (MBSs) appear lying on a long enough Kitaev chain within the topological phase [right side of panels (a) and (b)], which can be accomplished as proposed experimentally in Ref. 24: s-wave superconductivity (SC) inducing p-wave pairing in a semiconducting wire with strong spin-orbit interaction (SO) and crossed by a perpendicular magnetic field B . Here we follow such a proposal by adding an STM tip nearby a metallic surface coupled to two adatoms, in which one of them is hybridized with a MBS 1 (a half-electron state). The MBS 1 is connected far apart to a MBS 2. The AFM tips are employed to tune the levels of the adatoms. This device explores the lack of symmetry in Fano interference, which is detectable via the zero-bias conductance. The parameters q_0 and q_b are Fano factors due to the interference between the different paths taken by the electrons from the tip to the surface. When $q_b \gg 1$ the hybridization between the tip and the adatoms is stronger than the hybridization to the surface. In this case the electrons tunnel to the surface throughout the adatoms. In contrast, for $q_0=0$ the electrons tunnel directly to the surface. The green-circle represents the site of the host side-coupled to the adatoms.

By determining the transmittance of this setup, we have found Fano profiles due to the coupling between the setup of the adatoms and an isolated MBS. For the setup decoupled from this MBS, the direct and the mixed Green's functions are symmetric with respect to the labels 1 and 2 that designate the parameters of the adatoms. In the opposite limit, this symmetry property is broken and the swap of the indexes $1 \leftrightarrow 2$ leads to a lack of symmetry in the Fano profile.

This lack of symmetry can be accessed experimentally by performing the following proposed two-stage procedure: (i) first, attached to the adatoms, one has to lock AFM tips in opposite gate voltages (symmetric detuning of the levels $\Delta\epsilon$) and measure by an STM tip, the zero-bias conductance; (ii) thereafter, the measurement of the conductance is repeated with the gates swapped.

As a result of this method and the Fano regime as well, the transmittance for $|\Delta\epsilon|$ away from the Fermi energy exhibits a zero-bias dip persistent against the permutation of the gate voltages. For the case in which the STM acts as a probe of the LDOS (local density of states) for the “host+adatoms” system, the adatom decoupled from the Kitaev chain plays no role and the typical Majorana hallmark is verified: a robust zero-bias transmittance characterized by an amplitude of 1/2 as that found in Ref. 22 for a single QD setup. On the other hand, for the STM in the same footing as the “host + adatoms” system, a slight fluctuation around the amplitude of 1/2 manifests as a straight aftermath of the two-stage procedure in combination with the adatom free of the MBS. However, despite the small difference between these two Majorana dips, each one leads to a particular Fano lineshape for the zero-bias transmittance as a function of the symmetric detuning. Therefore, we demonstrate in this work that the assumption of the STM as a probe tip is not enough to reveal the unexpected pattern of Fano interference for the proposed setup of Fig. 1.

This paper is organized as follows. In Sec. II, we show the theoretical model for the system sketched in Fig. 1 as well as the derivation of the transmittance. The Green's functions of the adatoms are also presented in this section. The results appear in Sec. III and in Sec. IV, we summarize the conclusions.

II. THEORETICAL MODEL

A. Hamiltonian

The system we investigate is described according to the Hamiltonian

$$\mathcal{H}_{\text{total}} = \mathcal{H}_{\text{host+ads}} + \mathcal{H}_{\text{tip}} + \mathcal{H}_{\text{tun}}. \quad (1)$$

In order to mimic the system outlined in Fig. 1, we follow the spinless Hamiltonian proposed by Liu *et al.*,²² taking two adatoms into account, which reads

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{\text{host+ads}} = & \sum_k (\epsilon_k - \mu_{\text{host}}) c_k^\dagger c_k + \sum_j \epsilon_j d_j^\dagger d_j \\ & + V \left(\sum_{jk} c_k^\dagger d_j + \text{H.c.} \right) + i\epsilon_M \eta_1 \eta_2 \\ & + \lambda (d_1 - d_1^\dagger) \eta_1, \end{aligned} \quad (2)$$

where the electrons in the host are described by the operator c_k^\dagger (c_k) for the creation (annihilation) of an electron in a quantum state labeled by the wave number k , energy ε_k and chemical potential μ_{host} . For the adatoms, d_j^\dagger (d_j) creates (annihilates) an electron in the state ε_j , with $j=1, 2$. V is the hybridization of the adatoms with the host. In particular for $j=1$, the adatom 1 is coupled to the MBS 1 described by the operator $\eta_1^\dagger = \eta_1$. The strength of this coupling is λ . The MBS 2 given by $\eta_2^\dagger = \eta_2$ is connected to the MBS 1 via the coefficient $\varepsilon_M \sim e^{-L/\xi}$, with L being the distance between the MBSs and ξ the coherence length. It is worth mentioning that the present spinless model supposes a strong magnetic field over the entire system, which leads to a large Zeeman splitting where the higher levels are not energetic favorable at low temperatures. In this situation, one spin component plays no role and the spin degrees of freedom can be ignored.

The second part of Eq. (1) is described by the Hamiltonian

$$\mathcal{H}_{\text{tip}} = \sum_q (\varepsilon_q - \mu_{\text{tip}}) b_q^\dagger b_q, \quad (3)$$

which corresponds to free electrons ruled by fermionic operators b_q^\dagger and b_q in the STM tip, with energy ε_q and chemical potential μ_{tip} .

To perform the coupling between Eqs. (2) and (3), we have to define the tunneling Hamiltonian

$$\mathcal{H}_{\text{tun}} = w(f_t^\dagger \psi_0 + \text{H.c.}), \quad (4)$$

where w is the STM tip-host coupling,

$$f_t = \sum_q b_q \quad (5)$$

is for the edge of the STM tip,

$$\psi_0 = f_0 + (\pi\Gamma\rho_0)^{1/2} q_0 \sum_j d_j \quad (6)$$

is the field operator that accounts for Fano interference,

$$f_0 = \sum_k c_k \quad (7)$$

represents the host site laterally coupled to the adatoms [see the green-circle of the host outlined in Fig. 1],

$$\Gamma = \pi V^2 \rho_0 \quad (8)$$

is the Anderson parameter, with $\rho_0 = \frac{1}{2D}$ as the density of states for the surface without adatoms, D is the band half-width and

$$q_0 = (\pi\Gamma\rho_0)^{-1/2} \left(\frac{\tilde{V}}{w} \right) \quad (9)$$

is the Fano factor of interference,³⁷ with \tilde{V} as the couplings between the STM tip and the adatoms. Notice that due to Eqs. (6) and (9), the limit $q_0 \gg 1$ represents the situation in

which the tip is highly hybridized with the adatoms, while in the opposite regime $q_0=0$, the tip is strongly connected to the surface [see Fig. 1]. As the former case in presence of a MBS still obeys the standard Fano's theory, in this work we will focus on the latter, where we can find a non trivial Fano interference. Such a point will be discussed in Sec. III.

B. Calculation of the transmittance

1. The STM tip as a probe

By applying the linear response theory, in which the STM tip is considered as a probe, it is possible to show that the zero-bias conductance is given by

$$\mathcal{G}(0) = \frac{e^2}{h} (2\pi w)^2 \int \rho_{\text{LDOS}}(\varepsilon) \rho_{\text{tip}}(\varepsilon) \left(-\frac{\partial f_F}{\partial \varepsilon} \right) d\varepsilon, \quad (10)$$

where e is the electron charge, h is the Planck constant, $\rho_{\text{LDOS}}(\varepsilon)$ is the LDOS of the "host+adatoms" system, $\rho_{\text{tip}}(\varepsilon)$ as the DOS of the STM tip and f_F is the Fermi-Dirac distribution. The total transmittance is then defined as follows:

$$\mathcal{T}_{\text{probe}}(\varepsilon) = (2\pi w)^2 \rho_{\text{LDOS}}(\varepsilon) \rho_{\text{tip}}(\varepsilon). \quad (11)$$

To obtain the LDOS, we follow Ref. 36 by introducing the retarded Green's function

$$\mathcal{R}_{\psi_0\psi_0} = -\frac{i}{\hbar} \theta(t) \text{Tr} \left\{ \varrho_{\text{host+ads}} [\psi_0(t), \psi_0^\dagger(0)]_+ \right\} \quad (12)$$

for the field operator of Eq. (6) in the time domain t , where $\theta(t)$ is the Heaviside function, $\varrho_{\text{host+ads}}$ is the density matrix of the system described by the Hamiltonian in Eq. (2) and $[\dots, \dots]_+$ is the anticommutator of Eq. (6) at distinct times. From Eq. (12), the LDOS of the host can be obtained as

$$\rho_{\text{LDOS}}(\varepsilon) = -\frac{1}{\pi} \text{Im}(\tilde{\mathcal{R}}_{\psi_0\psi_0}), \quad (13)$$

where $\tilde{\mathcal{R}}_{\psi_0\psi_0}$ is the Fourier transform of $\mathcal{R}_{\psi_0\psi_0}$ in the energy domain ε . Analogously, we have

$$\rho_{\text{tip}}(\varepsilon) = -\frac{1}{\pi} \text{Im}(\tilde{\mathcal{R}}_{f_t f_t}), \quad (14)$$

with

$$\mathcal{R}_{f_t f_t} = -\frac{i}{\hbar} \theta(t) \text{Tr} \left\{ \varrho_{\text{tip}} [f_t(t), f_t^\dagger(0)]_+ \right\}, \quad (15)$$

where ϱ_{tip} is the density matrix of the system described by the Hamiltonian in Eq. (3).

Thus to determine an analytical expression for the LDOS, we apply the equation-of-motion approach on Eq. (12). Such a procedure is summarized as follows:

$$(\varepsilon + i\eta) \tilde{\mathcal{R}}_{\mathcal{A}\mathcal{B}} = [\mathcal{A}, \mathcal{B}^\dagger]_+ + \tilde{\mathcal{R}}_{[\mathcal{A}, \mathcal{H}_i] \mathcal{B}}, \quad (16)$$

with $\eta \rightarrow 0^+$, \mathcal{A} and \mathcal{B} as fermionic operators belonging to the Hamiltonian \mathcal{H}_i ($i = \text{host} + \text{ads}$ or tip).

By taking Eq. (12), one can calculate via Eqs. (2), (6), and (16) with $\mathcal{A} = \mathcal{B} = \psi_0$ and $\mathcal{H}_i = \mathcal{H}_{\text{host+ads}}$, the following relation:

$$\begin{aligned} \tilde{\mathcal{R}}_{\psi_0\psi_0} &= \tilde{\mathcal{R}}_{f_0f_0} + (\pi\Gamma\rho_0)q_0^2 \sum_{jl} \tilde{\mathcal{R}}_{d_jd_l} + 2(\pi\Gamma\rho_0)^{1/2}q_0 \\ &\times \sum_j \tilde{\mathcal{R}}_{d_jf_0}, \end{aligned} \quad (17)$$

which depends on the Green's functions $\tilde{\mathcal{R}}_{f_0f_0}$, $\tilde{\mathcal{R}}_{f_0d_j}$ and $\tilde{\mathcal{R}}_{d_jd_l}$. First, we find $\tilde{\mathcal{R}}_{f_0f_0}$,

$$\tilde{\mathcal{R}}_{f_0f_0} = \pi\rho_0(\bar{\gamma} - i) + \pi\rho_0\Gamma(\bar{\gamma} - i)^2 \sum_{jl} \tilde{\mathcal{R}}_{d_jd_l} \quad (18)$$

and later on, the mixed Green's function $\tilde{\mathcal{R}}_{d_jf_0}$,

$$\tilde{\mathcal{R}}_{d_jf_0} = \sqrt{\pi\Gamma\rho_0}(\bar{\gamma} - i) \sum_l \tilde{\mathcal{R}}_{d_jd_l}, \quad (19)$$

where

$$\bar{\gamma} = \frac{1}{\pi\rho_0} \sum_k \frac{1}{\varepsilon - \varepsilon_k}. \quad (20)$$

Now, we choose for Eq. (16), $\mathcal{H}_i = \mathcal{H}_{\text{tip}}$ and $\mathcal{A} = \mathcal{B} = f_i$, respectively, from Eqs. (3) and (14), to show that

$$\tilde{\mathcal{R}}_{f_if_i} = \pi\rho_0(\bar{\gamma} - i). \quad (21)$$

In particular, for the wide band limit $D \rightarrow \infty$, $\bar{\gamma} \rightarrow 0$. Thus, the imaginary parts of Eqs. (18)–(21) become

$$\text{Im}(\tilde{\mathcal{R}}_{f_0f_0}) = -\pi\rho_0[1 + \Gamma \sum_{jl} \text{Im}(\tilde{\mathcal{R}}_{d_jd_l})], \quad (22)$$

$$\text{Im}(\tilde{\mathcal{R}}_{d_jf_0}) = -\sqrt{\pi\Gamma\rho_0} \sum_l \text{Re}(\tilde{\mathcal{R}}_{d_jd_l}) \quad (23)$$

and

$$\text{Im}(\tilde{\mathcal{R}}_{f_if_i}) = -\pi\rho_0. \quad (24)$$

Now, we take Eqs. (22)–(24) into Eq. (11) to obtain

$$\begin{aligned} T_{\text{probe}}(\varepsilon) &= \frac{\mathcal{T}_{\text{probe}}(\varepsilon)}{\mathcal{T}_b} = 1 + \Gamma \sum_{jl} [(1 - q_0^2) \text{Im}(\tilde{\mathcal{R}}_{d_jd_l}) \\ &+ 2q_0 \text{Re}(\tilde{\mathcal{R}}_{d_jd_l})] \end{aligned} \quad (25)$$

as the total transmittance through the system, expressed in terms of the background conductance

$$\mathcal{T}_b = 4x = 4(\pi w\rho_0)^2, \quad (26)$$

and the Green's functions $\tilde{\mathcal{R}}_{d_jd_l}$ of the adatoms.

2. The STM tip in the same footing as the “host+adatoms” system

Here, we derive the Landauer-Büttiker formula for the zero-bias conductance $\mathcal{G}(0)$ by considering the STM tip in

the same footing as the “host+adatoms” system, which is achievable with $\tilde{V} = V$ in Eq. (9).

The zero-bias conductance is a function of the transmittance $\mathcal{T}_{\text{full}}(\varepsilon)$ as follows:

$$\mathcal{G}(0) = \frac{\partial}{\partial\varphi} \mathcal{J}_{\text{host}}(\varphi = 0) = \frac{e^2}{h} \int d\varepsilon \left(-\frac{\partial f_F}{\partial\varepsilon} \right) \mathcal{T}_{\text{full}}(\varepsilon), \quad (27)$$

with $\mathcal{J}_{\text{host}}$ as the current for the host and $\mu_{\text{host}} - \mu_{\text{tip}} = e\varphi$, with φ as the applied bias-voltage. We begin with the transformation

$$\begin{pmatrix} c_k \\ b_k \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \\ -\frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_{ok} \\ c_{ek} \end{pmatrix}, \quad (28)$$

on the Hamiltonian of Eq. (1), which depends on the *even* and *odd* conduction operators c_{ek} and c_{ok} , respectively. These definitions allow us to express Eq. (1) as

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_e + \mathcal{H}_o + \tilde{\mathcal{H}}_{\text{tun}} = \mathcal{H}_{\varphi=0} + \tilde{\mathcal{H}}_{\text{tun}}, \quad (29)$$

where

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_e &= \sum_k \varepsilon_k c_{ek}^\dagger c_{ek} + \sum_j \varepsilon_j d_j^\dagger d_j \\ &+ \sum_{jk} \sqrt{2}V(c_{ek}^\dagger d_j + \text{H.c.}) + w \sum_{kq} c_{ek}^\dagger c_{eq} \\ &+ i\varepsilon_M \eta_1 \eta_2 + \lambda(d_1 - d_1^\dagger) \eta_1 \end{aligned} \quad (30)$$

represents the Hamiltonian part of the system coupled to the adatoms via an effective hybridization $\sqrt{2}V$, while

$$\mathcal{H}_o = \sum_k \varepsilon_k c_{ok}^\dagger c_{ok} - w \sum_{kq} c_{ok}^\dagger c_{oq} \quad (31)$$

is the decoupled one. However, they are connected to each other by the tunneling Hamiltonian

$$\tilde{\mathcal{H}}_{\text{tun}} = -\Delta\mu \sum_k (c_{ek}^\dagger c_{ok} + c_{ok}^\dagger c_{ek}), \quad (32)$$

with $\mu_{\text{host}} = \Delta\mu$, $\mu_{\text{tip}} = -\Delta\mu$ and $\Delta\mu = e\varphi/2$. As in the zero-bias regime $\Delta\mu \rightarrow 0$, due to $\varphi \rightarrow 0$, $\tilde{\mathcal{H}}_{\text{tun}}$ is a perturbative term.

Here, we use the interaction picture to calculate $\mathcal{T}_{\text{full}}(\varepsilon)$. It ensures that a state $|\Phi_n\rangle$ from the spectrum of the Hamiltonian given by Eq. (29) admits the following time-dependency:

$$\begin{aligned} |\Phi_n\rangle &= e^{-\frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^0 \tilde{\mathcal{H}}_{\text{tun}}(\tau) d\tau} |\Psi_n\rangle \\ &\simeq \left(1 - \frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^0 \tilde{\mathcal{H}}_{\text{tun}}(\tau) d\tau \right) |\Psi_n\rangle, \end{aligned} \quad (33)$$

where $\hbar = \frac{h}{2\pi}$ and $|\Psi_n\rangle$ is an eigenstate of $\mathcal{H}_e + \mathcal{H}_o = \mathcal{H}_{\varphi=0}$. Thus, the current $\mathcal{J}_{\text{host}}$ for the host can be obtained by

performing the expected mean value of the current operator $\mathcal{I}_{\text{host}} \equiv \mathcal{I}_{\text{host}}(t=0)$, which reads

$$\begin{aligned} \mathcal{I}_{\text{host}} &= \langle \Phi_n | \mathcal{I}_{\text{host}} | \Phi_n \rangle \\ &= -\frac{i}{\hbar} \left\langle \Psi_n \left| \int_{-\infty}^0 [\mathcal{I}_{\text{host}}, \tilde{\mathcal{H}}_{\text{tun}}(\tau)] d\tau \right| \Psi_n \right\rangle + \mathcal{O}(\tilde{\mathcal{H}}_{\text{tun}}^2), \end{aligned} \quad (34)$$

where we have regarded $\langle \Psi_n | \mathcal{I}_{\text{host}} | \Psi_n \rangle = 0$ and by considering the thermal average on the latter equation, which gives

$$\mathcal{I}_{\text{host}} = -\frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^0 \text{Tr} \left\{ \rho_{\varphi=0} [\mathcal{I}_{\text{host}}, \tilde{\mathcal{H}}_{\text{tun}}(\tau)] \right\} d\tau, \quad (35)$$

where $\rho_{\varphi=0}$ is the density matrix of the system described by the Hamiltonian $\mathcal{H}_{\varphi=0}$ in Eq. (29). By applying the equation-of-motion on $\mathcal{I}_{\text{host}}$, we show that

$$\begin{aligned} \mathcal{I}_{\text{host}} &= -\frac{i}{\hbar} [e \sum_k c_k^\dagger c_k, \mathcal{H}_{\varphi=0}] \\ &= \left(-\frac{ie}{\sqrt{2}\hbar} \right) V \sum_{kj} \left\{ (c_{ek}^\dagger d_j - d_j^\dagger c_{ek}) + (c_{ok}^\dagger d_j - d_j^\dagger c_{ok}) \right\} \\ &\quad + \left(-\frac{ie}{\hbar} \right) w \sum_{q\bar{q}} (c_{oq}^\dagger c_{e\bar{q}} - c_{e\bar{q}}^\dagger c_{oq}), \end{aligned} \quad (36)$$

which, in combination with Eq. (35), leads to

$$\mathcal{I}_{\text{host}} = -\frac{e}{\hbar} \Delta\mu \text{Im} \int_{-\infty}^{+\infty} d\tau \left\{ \sqrt{2}V \sum_j \mathcal{F}_j(-\tau) + 2w\mathcal{M}(-\tau) \right\}, \quad (37)$$

where

$$\mathcal{F}_j(-\tau) = -\frac{i}{\hbar} \theta(-\tau) \text{Tr} \left\{ \rho_{\varphi=0} [f_o^\dagger d_j, \sum_q c_{eq}^\dagger(\tau) c_{oq}(\tau)] \right\} \quad (38)$$

and

$$\mathcal{M}(-\tau) = -\frac{i}{\hbar} \theta(-\tau) \text{Tr} \left\{ \rho_{\varphi=0} [f_o^\dagger f_e, \sum_k c_{ek}^\dagger(\tau) c_{ok}(\tau)] \right\} \quad (39)$$

are retarded Green's functions, expressed in terms of the operators

$$f_o = \sum_{\bar{q}} c_{o\bar{q}} \quad (40)$$

and

$$f_e = \sum_q c_{eq}. \quad (41)$$

In order to find a closed expression for the current $\mathcal{I}_{\text{host}}$, we should evaluate the integrals in the time coordinate τ of Eq. (37), which result in

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{+\infty} d\tau \mathcal{F}_j(-\tau) &= \mathcal{Z}^{-1} \sum_{mn} \frac{(e^{-\beta E_n} - e^{-\beta E_m})}{E_n - E_m + i\eta} \\ &\quad \times \langle \Psi_n | f_o^\dagger d_j | \Psi_m \rangle \langle \Psi_m | \sum_q c_{eq}^\dagger c_{oq} | \Psi_n \rangle \end{aligned} \quad (42)$$

and

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{+\infty} d\tau \mathcal{M}(-\tau) &= \mathcal{Z}^{-1} \sum_{mn} \frac{(e^{-\beta E_n} - e^{-\beta E_m})}{E_n - E_m + i\eta} \\ &\quad \times \langle \Psi_n | f_o^\dagger f_e | \Psi_m \rangle \langle \Psi_m | \sum_q c_{eq}^\dagger c_{oq} | \Psi_n \rangle, \end{aligned} \quad (43)$$

where we have used \mathcal{Z} as the partition function of $\mathcal{H}_{\varphi=0} | \Psi_m \rangle = E_m | \Psi_m \rangle$, $\mathcal{A}(\tau) = e^{\frac{i}{\hbar} \mathcal{H}_{\varphi=0} \tau} \mathcal{A} e^{-\frac{i}{\hbar} \mathcal{H}_{\varphi=0} \tau}$ for an arbitrary time-dependent operator $\mathcal{A}(\tau)$ and $\eta \rightarrow 0^+$. To eliminate the matrix element $\langle \Psi_m | c_{eq}^\dagger c_{oq} | \Psi_n \rangle$ in Eqs. (42) and (43), we calculate $\langle \Psi_m | [\sum_q c_{eq}^\dagger c_{oq}, \mathcal{H}_{\varphi=0}] | \Psi_n \rangle$, which gives

$$\begin{aligned} \langle \Psi_m | \sum_q c_{eq}^\dagger c_{oq} | \Psi_n \rangle &= -\frac{\sqrt{2}V}{(E_n - E_m)} \\ &\quad \times \sum_j \langle \Psi_m | d_j^\dagger f_o | \Psi_n \rangle \\ &\quad - \frac{2w}{(E_n - E_m)} \langle \Psi_m | f_e^\dagger f_o | \Psi_n \rangle. \end{aligned} \quad (44)$$

By performing the substitutions of Eqs. (42), (43) with (44) in Eq. (37), we enclose the result into the function labeled by χ_{mn} to show that

$$\begin{aligned} \mathcal{I}_{\text{host}} &= \frac{e}{\hbar} \pi \Delta\mu \mathcal{Z}^{-1} \sum_{mn} \chi_{mn} \frac{(e^{-\beta E_n} - e^{-\beta E_m})}{E_n - E_m} \delta(E_n - E_m) \\ &= -\frac{e}{\hbar} \pi \Delta\mu \beta \sum_{mn} [\mathcal{Z}^{-1} e^{-\beta E_n} \delta(E_n - E_m)] \chi_{nm}, \end{aligned} \quad (45)$$

where we have defined

$$\begin{aligned} \chi_{nm} &= (\sqrt{2}V)^2 \sum_{jj} \langle \Psi_n | f_o^\dagger d_j | \Psi_m \rangle \langle \Psi_m | d_j^\dagger f_o | \Psi_n \rangle \\ &\quad + 2\sqrt{2}V(2w) \sum_j \langle \Psi_n | f_o^\dagger d_j | \Psi_m \rangle \langle \Psi_m | f_e^\dagger f_o | \Psi_n \rangle \\ &\quad + (2w)^2 \langle \Psi_n | f_o^\dagger f_e | \Psi_m \rangle \langle \Psi_m | f_e^\dagger f_o | \Psi_n \rangle. \end{aligned} \quad (46)$$

In this calculation, we have used

$$\begin{aligned} \langle \Psi_n | f_o^\dagger d_j | \Psi_m \rangle \langle \Psi_m | f_e^\dagger f_o | \Psi_n \rangle \\ = \langle \Psi_n | f_o^\dagger f_e | \Psi_m \rangle \langle \Psi_m | d_j^\dagger f_o | \Psi_n \rangle, \end{aligned}$$

with

$$\frac{(e^{-\beta E_n} - e^{-\beta E_m})}{E_n - E_m} = -\beta e^{-\beta E_n} \quad (47)$$

in the limit $E_n \rightarrow E_m$. The property $[\mathcal{H}_e, \mathcal{H}_o] = 0$ ensures the partitions $E_n = E_n^e + E_n^o$ and $\mathcal{Z} = \mathcal{Z}_e \mathcal{Z}_o$ for the Hamiltonians

\mathcal{H}_e and \mathcal{H}_o , respectively in the brackets of Eq. (45), thus leading to

$$\begin{aligned} \mathcal{Z}^{-1} e^{-\beta E_n} \delta(E_n - E_m) &= \frac{1}{\beta} \mathcal{Z}_e^{-1} \mathcal{Z}_o^{-1} \int d\varepsilon \left(-\frac{\partial f_F}{\partial \varepsilon} \right) \\ &\times (e^{-\beta E_n^e} + e^{-\beta E_m^e}) (e^{-\beta E_n^o} + e^{-\beta E_m^o}) \\ &\times \delta(\varepsilon + E_n^e - E_m^e) \delta(\varepsilon + E_n^o - E_m^o). \end{aligned} \quad (48)$$

Therefore, we substitute Eqs. (46) and (48) in Eq. (45) to calculate $\frac{\partial}{\partial \varphi} \mathcal{J}_{\text{host}}(\varphi = 0)$. The comparison of such a result with Eq. (27) allows us to find

$$\mathcal{T}_{\text{full}}(\varepsilon) = (2\pi w)^2 \tilde{\rho}_{\text{LDOS}}(\varepsilon) \tilde{\rho}_{\text{tip}}(\varepsilon), \quad (49)$$

where

$$\tilde{\rho}_{\text{LDOS}}(\varepsilon) = -\frac{1}{\pi} \text{Im}(\tilde{\mathcal{R}}_{\psi_e \psi_e}) \quad (50)$$

and

$$\mathcal{R}_{\psi_e \psi_e} = -\frac{i}{\hbar} \theta(t) \text{Tr} \left\{ \varrho_\varepsilon [\psi_e(t), \psi_e^\dagger(0)]_+ \right\}, \quad (51)$$

with the former as the renormalized LDOS of the “host+adatoms” system described by the Hamiltonian of Eq. (30), which is affected by the STM tip via the scattering term $w \sum_{kq} c_{ek}^\dagger c_{eq}$, thus leading to

$$\psi_e = f_e + (\pi \Delta \rho_0)^{1/2} \gamma \sum_j d_j \quad (52)$$

and

$$\begin{aligned} \tilde{\mathcal{R}}_{\psi_e \psi_e} &= \tilde{\mathcal{R}}_{f_e f_e} + (\pi \rho_0 \Delta) \gamma^2 \sum_{jl} \tilde{\mathcal{R}}_{d_j d_l} \\ &+ 2(\pi \rho_0 \Delta)^{1/2} \gamma \sum_j \tilde{\mathcal{R}}_{d_j f_e} \end{aligned}$$

that generalize Eqs. (6) and (17), respectively, with a renormalized Anderson parameter

$$\Delta = 2\pi V^2 \rho_0 \quad (53)$$

and Fano factor

$$\gamma = (\pi \rho_0 \Delta)^{-1/2} \left(\frac{\sqrt{2}V}{2w} \right). \quad (54)$$

Additionally, the scattering term $-w \sum_{kq} c_{ok}^\dagger c_{oq}$ renormalizes the DOS of the STM tip due to the Hamiltonian of Eq. (31), which provides

$$\tilde{\rho}_{\text{tip}}(\varepsilon) = -\frac{1}{\pi} \text{Im}(\tilde{\mathcal{R}}_{f_o f_o}). \quad (55)$$

From Eqs. (30) and (41), we make the substitutions $\mathcal{A} = \mathcal{B} = f_e$ and $\mathcal{H}_i = \mathcal{H}_e$ in Eq. (16), which gives

$$\begin{aligned} \tilde{\mathcal{R}}_{f_e f_e} &= \frac{\pi \rho_0 (\bar{\gamma} - i)}{1 - \sqrt{x}(\bar{\gamma} - i)} + \pi \rho_0 \Delta \left[\frac{(\bar{\gamma} - i)}{1 - \sqrt{x}(\bar{\gamma} - i)} \right]^2 \\ &\times \sum_{jl} \tilde{\mathcal{R}}_{d_j d_l}(\varepsilon), \end{aligned} \quad (56)$$

where we have used the mixed Green’s function

$$\tilde{\mathcal{R}}_{d_j f_e} = \sqrt{\pi \Delta \rho_0} \frac{(\bar{\gamma} - i)}{1 - \sqrt{x}(\bar{\gamma} - i)} \sum_l \tilde{\mathcal{R}}_{d_j d_l}, \quad (57)$$

determined from Eq. (16) by considering $\mathcal{A} = d_j$, $\mathcal{B} = f_e$ and $\mathcal{H}_i = \mathcal{H}_e$, with the parameter x being the same as found in Eq. (26). We point out that, Eqs. (56) and (57) constitute respectively, generalizations of Eqs. (18) and (19), where the latter can be obtained from the former by making $x \ll 1$. Thus, the imaginary parts of Eqs. (56) and (57) for the wide band limit $D \rightarrow \infty$, become

$$\begin{aligned} \text{Im}(\tilde{\mathcal{R}}_{f_e f_e}) &= -\frac{\pi \rho_0}{1+x} - \frac{(1-x)}{(1+x)^2} \pi \Delta \rho_0 \sum_{jl} \text{Im}(\tilde{\mathcal{R}}_{d_j d_l}) \\ &+ \frac{2\sqrt{x}}{(1+x)^2} \pi \Delta \rho_0 \sum_{jl} \text{Re}(\tilde{\mathcal{R}}_{d_j d_l}) \end{aligned} \quad (58)$$

and

$$\begin{aligned} \text{Im}(\tilde{\mathcal{R}}_{d_j f_e}) &= -\frac{\sqrt{x\pi\Delta\rho_0}}{1+x} \sum_l \text{Im}(\tilde{\mathcal{R}}_{d_j d_l}) \\ &- \frac{\sqrt{\pi\Delta\rho_0}}{1+x} \sum_l \text{Re}(\tilde{\mathcal{R}}_{d_j d_l}), \end{aligned} \quad (59)$$

where we have used $\bar{\gamma} \rightarrow 0$. To conclude, we notice that $\tilde{\mathcal{R}}_{f_o f_o}$ is decoupled from the adatoms. Thereby, from Eqs. (31) and (40), we take $\mathcal{A} = \mathcal{B} = f_o$ and $\mathcal{H}_i = \mathcal{H}_o$ in Eq. (16) and we obtain

$$\text{Im}(\tilde{\mathcal{R}}_{f_o f_o}) = -\frac{\pi \rho_0}{1+x}, \quad (60)$$

which is equal to the first term of Eq. (58).

Thus the substitution of Eqs. (58)–(60) in Eq. (49), leads to

$$\begin{aligned} \mathcal{T}_{\text{full}}(\varepsilon) &= \frac{\mathcal{T}_{\text{full}}(\varepsilon)}{\bar{\mathcal{T}}_b} = 1 + \bar{\Gamma} \sum_{jl} [(1 - q_b^2) \text{Im}(\tilde{\mathcal{R}}_{d_j d_l}) \\ &+ 2q_b \text{Re}(\tilde{\mathcal{R}}_{d_j d_l})], \end{aligned} \quad (61)$$

where

$$\bar{\mathcal{T}}_b = \frac{4x}{(1+x)^2} \quad (62)$$

represents the transmittance in the absence of the adatoms and MBSs (background contribution),

$$\bar{\Gamma} = \frac{\Delta}{1+x} \quad (63)$$

is an effective coupling and

$$q_b = \frac{(1-x)}{2\sqrt{x}} \quad (64)$$

is the Fano parameter. Notice that Eq. (61) has the same form of Eq. (25), but with q_0 replaced by q_b . In this work, we will focus on the limit $q_0 = q_b = 0$.

C. Green's functions of the adatoms

In this section, we calculate the Green's functions $\tilde{\mathcal{R}}_{d_j d_l}$ within the wide band limit $D \rightarrow \infty$. We point out that, the expressions derived here describe the situation of Sec. II B 1 for an STM tip as probe with Γ instead of Δ [see Eqs. (8) and (53)] and by assuming $x \ll 1$ [Eq. (26)], otherwise, they belong to the case of Sec. II B 2. We begin by applying the equation-of-motion procedure on

$$\mathcal{R}_{d_j d_l} = -\frac{i}{\hbar} \theta(t) \text{Tr} \left\{ \rho_s [d_j(t), d_l^\dagger(0)]_+ \right\}, \quad (65)$$

where $s = \text{host} + \text{ads}$ or $s = e$, and changing to the energy domain ε , we obtain the following relation:

$$(\varepsilon - \tilde{\varepsilon}_j - i\Sigma^I - \delta_{jl} \Sigma_{\text{MBS1}}) \tilde{\mathcal{R}}_{d_j d_l} = \delta_{jl} + \Sigma \sum_{\tilde{l} \neq j} \tilde{\mathcal{R}}_{d_l \tilde{l}}, \quad (66)$$

with

$$\tilde{\varepsilon}_j = \varepsilon_j + \Sigma^R \quad (67)$$

is the adatom level renormalized by the STM tip-host coupling w , with $\Sigma = \Sigma^R + i\Sigma^I$,

$$\Sigma^R = -\frac{\sqrt{x}}{1+x} \Delta, \quad (68)$$

$$\Sigma^I = -\frac{\Delta}{1+x} \quad (69)$$

and

$$\Sigma_{\text{MBS1}} = \lambda^2 K (1 + \lambda^2 \tilde{K}) \quad (70)$$

as the self-energy due to the MBS 1 coupled to the adatom 1,

$$K = \frac{1}{2} \left(\frac{1}{\varepsilon - \varepsilon_M + i\eta} + \frac{1}{\varepsilon + \varepsilon_M + i\eta} \right) \quad (71)$$

and

$$\tilde{K} = \frac{K}{\varepsilon + \tilde{\varepsilon}_1 - i\Sigma^I - \lambda^2 K}, \quad (72)$$

which have the same forms as found in Ref. 22. Thus, the solution of Eq. (66) provides

$$\tilde{\mathcal{R}}_{d_1 d_1} = \frac{1}{\varepsilon - \tilde{\varepsilon}_1 - i\Sigma^I - \Sigma_{\text{MBS1}} - \mathcal{C}_2} \quad (73)$$

as the Green's function of the adatom 1, with

$$\mathcal{C}_j = \frac{(\Sigma^R + i\Sigma^I)^2}{\varepsilon - \tilde{\varepsilon}_j - i\Sigma^I}, \quad (74)$$

as the self-energy due to the presence of the j th adatom. For $\mathcal{C}_2 = 0$, we highlight that Eq. (73) is reduced to the Green's function of the single QD system found in Ref. 22. In the case of the adatom 2, we have

$$\tilde{\mathcal{R}}_{d_2 d_2} = \frac{1 - \tilde{\mathcal{R}}_{d_1 d_1}^0 \Sigma_{\text{MBS1}}}{\varepsilon - \tilde{\varepsilon}_2 - i\Sigma^I - \frac{\tilde{\mathcal{R}}_{d_1 d_1}^0}{\tilde{\mathcal{R}}_{d_2 d_2}} \Sigma_{\text{MBS1}} - \mathcal{C}_1}, \quad (75)$$

where $\tilde{\mathcal{R}}_{d_1 d_1}^0 = 1/(\varepsilon - \tilde{\varepsilon}_1 - i\Sigma^I)$ and $\tilde{\mathcal{R}}_{d_2 d_2}^0 = 1/(\varepsilon - \tilde{\varepsilon}_2 - i\Sigma^I)$ represent the corresponding Green's functions for the single adatom system without Majoranas. To conclude, the mixed Green's functions are

$$\tilde{\mathcal{R}}_{d_2 d_1} = \frac{\Sigma^R + i\Sigma^I}{\varepsilon - \tilde{\varepsilon}_2 - i\Sigma^I} \tilde{\mathcal{R}}_{d_1 d_1} \quad (76)$$

and

$$\tilde{\mathcal{R}}_{d_1 d_2} = \frac{\Sigma^R + i\Sigma^I}{\varepsilon - \tilde{\varepsilon}_1 - i\Sigma^I - \Sigma_{\text{MBS1}}} \tilde{\mathcal{R}}_{d_2 d_2}. \quad (77)$$

The main result of this section is the emergence of a lack of symmetry in these Green's functions. This property lies on the coupling of the adatom 1 with the MBS 1. To notice that, let us examine the situation where the adatom 1 is decoupled from the MBS 1, which can be obtained with $\Sigma_{\text{MBS1}} = 0$ in Eq. (70). By inspection of Eqs. (73) and (75)–(77), we verify that the functions $\tilde{\mathcal{R}}_{d_1 d_1}$ and $\tilde{\mathcal{R}}_{d_1 d_2}$ can be determined by the swap of the indexes $1 \leftrightarrow 2$ in $\tilde{\mathcal{R}}_{d_2 d_2}$ and $\tilde{\mathcal{R}}_{d_2 d_1}$, respectively. However, in the opposite situation with $\Sigma_{\text{MBS1}} \neq 0$, this symmetry is broken. Thus, in Sec. III, we will investigate this lack of symmetry via the transmittances of Eqs. (25) and (61). To this end, we will follow the two-stage procedure presented in Sec. I.

III. RESULTS

Here, we consider the Kitaev chain long enough, which forces $\varepsilon_M \sim e^{-L/\xi} \rightarrow 0$ in Eq. (2) for $L \gg \xi$. We adopt typical values for adatoms in metals [Ref. 32]: $\Delta = \Gamma = 0.2$ for the Anderson parameters of Eqs. (8) and (53), λ , $\varepsilon_1 = -\frac{\Delta\varepsilon}{2}$, $\varepsilon_2 = \frac{\Delta\varepsilon}{2}$, the symmetric detuning $\Delta\varepsilon = \varepsilon_2 - \varepsilon_1$ and ε in units of eV.

In order to investigate the transmittance $T_{\text{full}}(\varepsilon)$ of Eq. (61) as a function of the single particle energy ε , in Fig. 2 we use $\lambda = 5\Delta$, with $x = 1$ and Fano factor $q_b = 0$ [Eq. (64)]. This set of parameters allows one to emulate the situation where the STM tip is strongly connected to the host surface and therefore, considered in the same footing as the “host + adatoms” system.

In Fig. 2(a) for the case of a free system, i.e., without MBSs [solid-green curve], we observe two antiresonances, each one placed around the corresponding adatom level given by $\varepsilon_1 = -2.5$ and $\varepsilon_2 = +2.5$, respectively. We name

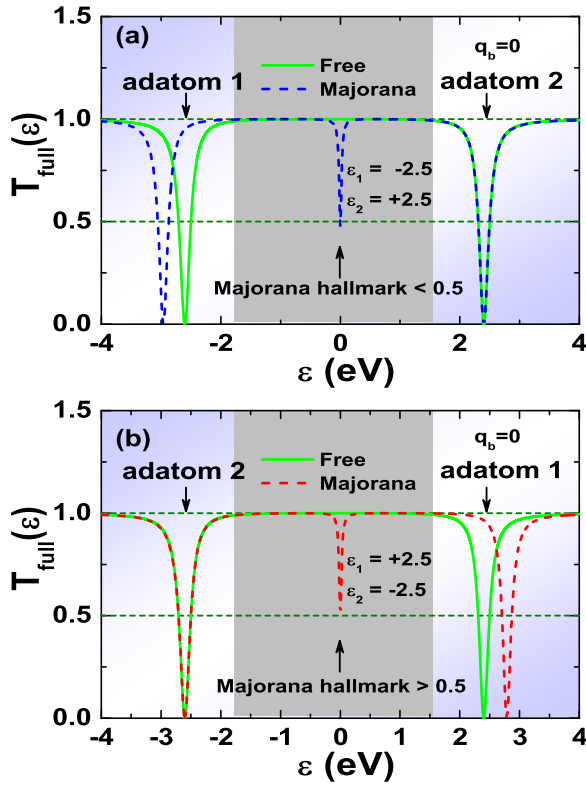


FIG. 2. Parameters employed: $\epsilon_M = 0$ [long enough Kitaev chain], $\lambda = 5\Delta$ and $\Delta = 0.2$ [see Eqs. (2) and (53)]. Transmittance $T_{\text{full}}(\epsilon)$ determined by Eq. (61) in the Fano regime $q_b = 0$ [Eq. (64)] as a function of the single particle energy ϵ . In the panels (a) and (b) we have: the solid-green lineshape is for the apparatus of Fig. 1 in the absence of the MBS 1. Implementation of the two-stage procedure of Sec. I: (a) $\epsilon_1 = -2.5$ and $\epsilon_2 = +2.5$: The dashed-blue curve corresponds to the system coupled to the MBS 1. (b) $\epsilon_1 = +2.5$ and $\epsilon_2 = -2.5$: The dashed-red lineshape is for the MBS 1. Here we see the main result of this procedure: the formation of a Majorana dip with an amplitude that fluctuates slightly around $1/2$, but it remains pinned at zero-bias even by performing the gates swap. The satellite dips do not share such a feature, they become significantly shifted under the permutation of the levels in the adatoms.

these antiresonances as satellite dips. Off the antiresonances, the transmittance approaches the unitary limit and the conductance reaches $\mathcal{G} = \mathcal{G}_0 = e^2/h$. Notice, for instance, the central region bounded by the range $-1.75 \lesssim e\varphi \lesssim 1.5$ [shaded region], where we have a ballistic plateau with the aforementioned conductance. In this free system, the Green's functions of the model are symmetric under the permutation of the indexes that designate the parameters of the adatoms. This property is confirmed by the corresponding solid-green curve of Fig. 2(b), obtained with $\epsilon_1 = +2.5$ and $\epsilon_2 = -2.5$, which agrees with that for $\epsilon_1 = -2.5$ and $\epsilon_2 = +2.5$ in Fig. 2(a). Therefore, the two-stage procedure proposed in this work, in particular for the case of a free double adatom system, yields two identical curves for the transmittance. However, for the device side-coupled to the MBS 1, a novel feature emerges in the central region.

By fixing $\epsilon_1 = -2.5$ and $\epsilon_2 = +2.5$, a dip of amplitude nearby $1/2$ arises in the middle of the ballistic plateau, due to the MBS 1 attached to the adatom 1 [see the dashed-blue curve in Fig. 2(a)]. For this situation, the dip around $\epsilon_2 = +2.5$ coincides with the corresponding one found in the

solid-green curve of the free setup, which is due to the adatom 2 decoupled from the MBS 1. Moreover, the antiresonance in the vicinity of $\epsilon_1 = -2.5$ is not coincident with that in Fig. 2(a) of the solid-green curve for the free system. As we can see, the position of such an antiresonance is shifted as the aftermath of the coupling between the MBS 1 and the adatom 1. After the swap procedure, which leads to $\epsilon_1 = +2.5$ and $\epsilon_2 = -2.5$, the satellite dips of Fig. 2(b) [see the dashed-red lineshape] become reversed with respect to those found in Fig. 2(a).

We emphasize that the central antiresonance remains placed at zero-bias, but its amplitude fluctuates slightly around $1/2$. This behavior of the central dip appears in Fig. 3(a), which can be clearly visualized in the dashed-blue and red lineshapes, respectively. Therefore, a pinned antiresonance protected against the two-stage procedure emerges in the transmittance, which is placed at the zero-bias and characterized by an amplitude nearby $1/2$. In contrast, the satellite dips do not share such a pinning, since they move significantly under the permutation of the levels in the adatoms. However, the complete robustness of the Majorana hallmark does not exist anymore as found in Refs. 22 and 23: the amplitude is not fixed at $1/2$ as a straight result of the interplay between the adatom decoupled from the Kitaev

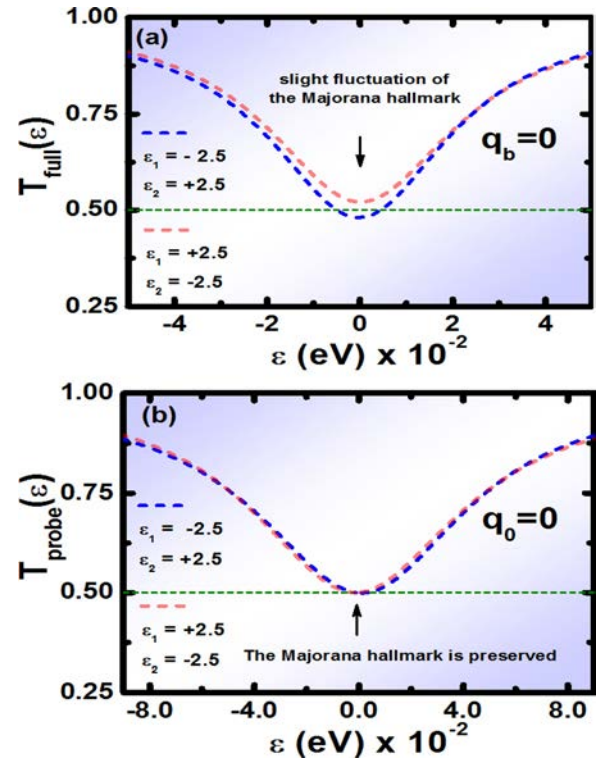


FIG. 3. Parameters employed: $\epsilon_M = 0$ [long enough Kitaev chain], $\lambda = 5\Delta$ and $\Delta = \Gamma = 0.2$ [see Eqs. (2), (8), and (53)]. Transmittance as a function of the single particle energy ϵ . Implementation of the two-stage procedure of Sec. I: (a) via the transmittance $T_{\text{full}}(\epsilon)$ of Eq. (61) in the Fano regime $q_b = 0$ [Eq. (64)], where we see the formation of a Majorana dip with an amplitude that fluctuates slightly around $1/2$ (Majorana hallmark), but it remains pinned at zero-bias even by performing the gates swap. In panel (b), the transmittance $T_{\text{probe}}(\epsilon)$ of Eq. (25) for $q_0 = 0$ does not exhibit such a fluctuation. The Majorana hallmark remains unchanged for the STM tip considered as a probe.

chain and the Fano regime as well, obtained with $x=1$ in Eq. (64). In this situation, the real and imaginary parts of the self-energy Σ , which read Σ^R and Σ^I , respectively, given by Eqs. (68) and (69), depend on x . Otherwise, it would correspond to the case of the tip considered as a probe of the LDOS for the “host+adatoms” system, which suppresses the fluctuation of the Majorana hallmark. This feature can be observed by using the transmittance $T_{\text{probe}}(\varepsilon)$ of Eq. (25) with $q_0=0$, which is confirmed by the dashed-blue and red lineshapes of Fig. 3(b). In fact, it can be observed an antiresonance pinned at zero-bias characterized by a constant amplitude of $1/2$. In this case, Σ^R and Σ^I do not depend on x , since $x \ll 1$ for a probe tip [see Eq. (26)]. As a result, the Majorana hallmark is preserved under the gates swap.

Thus in order to explore the effects due to the fluctuation of the zero-bias transmittance, we present the analysis of $T_{\text{full}}(0)$ and $T_{\text{probe}}(0)$ as a function of the symmetric detuning $\Delta\varepsilon$. In both cases, the Fano parameters are $q_b=0$ and $q_0=0$, which according to Fano’s theory, lead to a destructive interference pattern. Such a behavior can be seen in the transmittance versus ε plots of Figs. 3(a) and 3(b). Additionally, we point out that the Majorana dip verified in

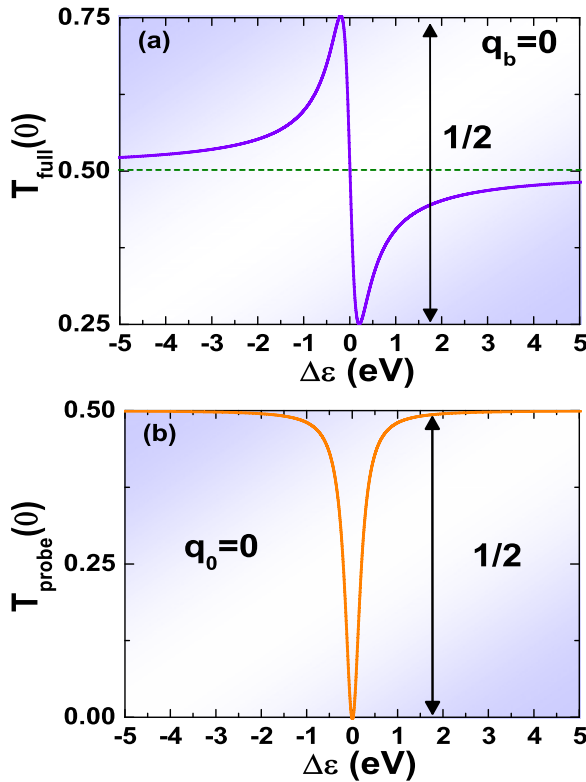


FIG. 4. Parameters employed: $\epsilon_M=0$ [long enough Kitaev chain], $\lambda=5\Delta$ and $\Delta=\Gamma=0.2$ [see Eqs. (2), (8), and (53)]. Panel (a): Transmittance $T_{\text{full}}(0)$ of Eq. (61) in the Fano regime $q_b=0$ [Eq. (64)] as a function of the symmetric detuning $\Delta\varepsilon=\varepsilon_2-\varepsilon_1$. For the STM tip in the same footing as the “host+adatoms” system, we see a novel feature in the transmittance profile: an unexpected Fano lineshape emerges and the Fano dip is not verified. Pained (b): in the case of the STM tip as a probe, the transmittance $T_{\text{probe}}(0)$ of Eq. (25) with $q_0=0$ leads to the standard Fano antiresonance. We remark that despite the small difference in the Majorana dip of Fig. 3(a) with respect to that found in Fig. 3(b), the zero-bias transmittance as a function of the detuning $\Delta\varepsilon$, yields two distinct lineshapes. However, in both situations, the transmittance does not exceed an amplitude of $1/2$.

the former differs slightly with respect to that found in the latter. Remarkably, the slight fluctuation of the Majorana hallmark in Fig. 3(a) is able to provide an unexpected profile of $T_{\text{full}}(0)$ versus $\Delta\varepsilon$, which differs expressively of a Fano dip. The result of this analysis appears in the solid-violet curve of Fig. 4(a), where it is observed that the transmittance approaches $1/2$ from upper (lower) values for $\Delta\varepsilon < 0$ ($\Delta\varepsilon > 0$). In the domain of $\Delta\varepsilon < 0$, it reaches the maximum value of $3/4$, while for $\Delta\varepsilon > 0$, it decreases to $1/4$. Notice that the variation of the transmittance with $\Delta\varepsilon$ does not exceed an amplitude of $1/2$ and particularly at $\Delta\varepsilon=0$, the transmittance recovers the Majorana hallmark $1/2$. On the other hand, in Fig. 4(b), the transmittance $T_{\text{probe}}(0)$ as a function of $\Delta\varepsilon$ in the solid-orange curve, displays the standard profile of Fano antiresonance for $q_0=0$. Notice that in both Figs. 4(a) and 4(b), the variation of the transmittance with $\Delta\varepsilon$ is $1/2$. We highlight that the unexpected Fano profile found in this work becomes a way to identify the existence of isolated MBSs, since the lineshape in Fig. 4(a) is due to a long enough Kitaev chain within the topological phase.

In summary, despite the same Fano parameters $q_0=0$ and $q_b=0$ in $T_{\text{probe}}(0)$ and $T_{\text{full}}(0)$, respectively, for Eqs. (25) and (61), which lead to Fano dips slightly different as those found in Figs. 3(a) and 3(b), we demonstrate in this

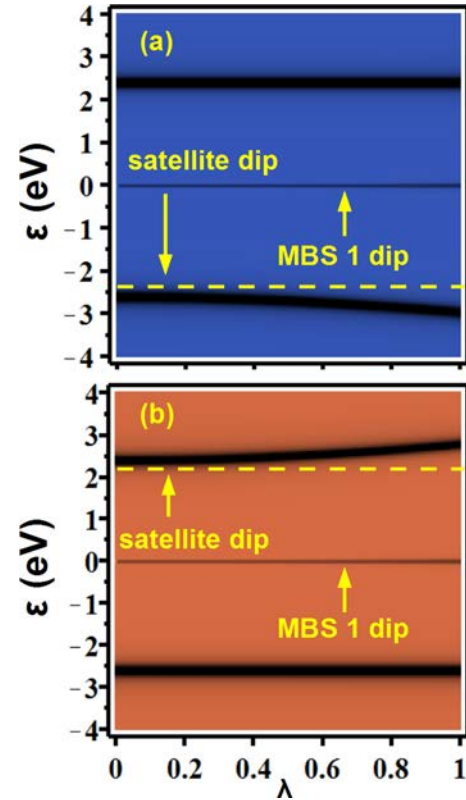


FIG. 5. Parameters employed: $\epsilon_M=0$ [long enough Kitaev chain], $\Delta=0.2$ [see Eqs. (2) and (53)]. Density plots of the transmittance $T_{\text{full}}(\varepsilon)$ determined by Eq. (61) in the Fano regime $q_b=0$ [Eq. (64)] as a function of the single particle energy ε and the coupling λ in units of Δ . Implementation of the two-stage procedure of Sec. I: (a) $\Delta\varepsilon=+5$ (b) $\Delta\varepsilon=-5$. Here we see the main result of this procedure: the formation of a Majorana dip (in black) pinned at zero-bias even by performing the gates swap. The satellite dips (also in black) do not share such a feature being significantly shifted under the permutation of the levels in the adatoms.

work that the usual hypothesis of the STM tip acting as a probe is insensitive for the complete knowing of the zero-bias transmittance versus the symmetric detuning $\Delta\varepsilon$. To overcome such an obstacle, the proper description should consider the STM tip in the same footing as the “host + adatoms” system. It is worth mentioning that we do not present the results for the case $q_b \gg 1$, since it still obeys the standard Fano’s theory, which gives a resonance profile in the $T_{\text{full}}(0)$ versus $\Delta\varepsilon$ plot as expected. In Fig. 5 the density plots for $T_{\text{full}}(\varepsilon)$ of Eq. (61) with $q_b=0$ as a function of ε and the coupling λ are shown. In these graphs, dips appear (black color regions) being possible to observe that the MBS 1 dip at zero-bias is the only structure that does not change with the implementation of the two-stage procedure as well as with the increase of λ . On the other hand, the positions of the satellite dips are displaced by changing λ and no pinning is observed. This feature can be visualized in the dips that deviate from the yellow-dashed lines in Figs. 5(a) and 5(b), respectively, for $\Delta\varepsilon = +5$ and $\Delta\varepsilon = -5$.

IV. CONCLUSIONS

We have explored theoretically in the context of quantum transport an effective Hamiltonian supporting Majorana quasiparticles for a long enough Kitaev chain in the topological phase. This system is coupled to a setup made by an STM tip and a metallic host with two adatoms. Our analysis has revealed that the Green’s functions of the adatoms become symmetric by neglecting the hopping term between one adatom and a side-coupled MBS. However, if we consider this parameter relevant, a lack of symmetry manifests in these functions.

To read out this feature experimentally, it has been proposed a two-stage procedure of gates swap by using AFM tips. As a result, a persistent zero-bias dip with an amplitude nearby 1/2 emerges in the transmittance arising from the isolated MBS under the aforementioned procedure. We have also verified that the fluctuation of the Majorana hallmark occurs only for the STM tip treated in the same footing as the “host+adatoms” system. In the case of an STM tip as a probe, the robustness of the Majorana hallmark is kept. However, this small difference between these two Majorana dips results in contrasting Fano profiles for the zero-bias transmittance versus the symmetric detuning. In the case of the STM tip acting as probe, Fano’s theory is confirmed, but with the tip in the same footing as the “host+adatoms” system, an unexpected Fano lineshape appears. We conclude that to access this non trivial Fano profile, the assumption of an STM tip acting as a probe should not be used.

ACKNOWLEDGMENTS

The authors thank Drs. E. Vernek and J. C. Egues for valuable discussions. This work was supported by the Brazilian agencies CNPq, CAPES and PROPE/UNESP.

- ¹J. Alicea, *Rep. Prog. Phys.* **75**, 076501 (2012).
- ²M. Leijnse and K. Flensberg, *Phys. Rev. B* **84**, 140501(R) (2011).
- ³H.-F. Lü, H.-Z. Lu, and S.-Q. Shen, *Phys. Rev. B* **86**, 075318 (2012).
- ⁴M. Leijnse and K. Flensberg, *Phys. Rev. B* **86**, 134528 (2012).
- ⁵K. Flensberg, *Phys. Rev. Lett.* **106**, 090503 (2011).
- ⁶M. Leijnse and K. Flensberg, *Phys. Rev. Lett.* **107**, 210502 (2011).
- ⁷A. Y. Kitaev, *Phys. Usp.* **44**, 131 (2001).
- ⁸Y. Cao, P. Wang, G. Xiong, M. Gong, and X.-Q. Li, *Phys. Rev. B* **86**, 115311 (2012).
- ⁹M. Gibertini, F. Taddei, M. Polini, and R. Fazio, *Phys. Rev. B* **85**, 144525 (2012).
- ¹⁰L.-J. Lang and S. Chen, *Phys. Rev. B* **86**, 205135 (2012).
- ¹¹C.-H. Lin, J. D. Sau, and S. Das Sarma, *Phys. Rev. B* **86**, 224511 (2012).
- ¹²X.-J. Liu and A. M. Lobos, *Phys. Rev. B* **87**, 060504(R) (2013).
- ¹³D. Sticlet, C. Bena, and P. Simon, *Phys. Rev. B* **87**, 104509 (2013).
- ¹⁴J. Liu, A. C. Potter, K. T. Law, and P. A. Lee, *Phys. Rev. Lett.* **109**, 267002 (2012).
- ¹⁵S. Nakosai, J. C. Budich, Y. Tanaka, B. Trauzettel, and N. Nagaosa, *Phys. Rev. Lett.* **110**, 117002 (2013).
- ¹⁶D. Roy, C. J. Bolech, and N. Shah, *Phys. Rev. B* **86**, 094503 (2012).
- ¹⁷G. Moore and N. Read, *Nucl. Phys.* **360**, 362 (1991).
- ¹⁸L. Fu, C. L. Kane, and E. J. Mele, *Phys. Rev. Lett.* **98**, 106803 (2007).
- ¹⁹L. Fu and C. L. Kane, *Phys. Rev. Lett.* **100**, 096407 (2008).
- ²⁰J. D. Sau, R. M. Lutchyn, S. Tewari, and S. Das Sarma, *Phys. Rev. Lett.* **104**, 040502 (2010).
- ²¹C. J. Bolech and E. Demler, *Phys. Rev. Lett.* **98**, 237002 (2007).
- ²²D. E. Liu and H. U. Baranger, *Phys. Rev. B* **84**, 201308(R) (2011).
- ²³E. Vernek, P. H. Penteado, A. C. Seridonio, and J. C. Egues, e-print [arXiv: 1308.0092v2 \[cond-mat.mes-hall\]](https://arxiv.org/abs/1308.0092v2) (2013).
- ²⁴V. Mourik, K. Zuo, S. M. Frolov, S. R. Plissard, E. P. A. M. Bakkers, and L. P. Kouwenhoven, *Science* **336**, 1003 (2012).
- ²⁵A. Das, Y. Ronen, Y. Most, Y. Oreg, M. Heiblum, and H. Shtrikman, *Nature Phys.* **8**, 887 (2012).
- ²⁶A. C. Hewson, *The Kondo Problem to Heavy Fermions* (Cambridge University Press, Cambridge, England 1993).
- ²⁷D. Goldhaber-Gordon, H. Shtrikman, D. Mahalu, D. Abusch-Magder, U. Meirav, and M. A. Kastner, *Nature* **391**, 156 (1998).
- ²⁸S. M. Cronenwett, T. H. Oosterkamp, and L. P. Kouwenhoven, *Science* **281**, 540 (1998).
- ²⁹A. F. Otte, M. Ternes, K. V. Bergmann, S. Loth, H. Brune, C. P. Lutz, C. F. Hirjibehedin, and A. J. Heinrich, *Nature Phys.* **4**, 847 (2008).
- ³⁰V. Madhavan, W. Chen, T. Jamneala, and F. Crommie, *Phys. Rev. B* **64**, 165412 (2001).
- ³¹N. Knorr, M. A. Schneider, L. Diekhöner, P. Wahl, and K. Kern, *Phys. Rev. Lett.* **88**, 096804 (2002).
- ³²C. Y. Lin, A. H. C. Neto, and B. A. Jones, *Phys. Rev. Lett.* **97**, 156102 (2006).
- ³³M. Ternes, A. J. Heinrich, and W. D. Schneider, *J. Phys.: Condens. Matter* **21**, 053001 (2009).
- ³⁴U. Fano, *Phys. Rev.* **124**, 1866 (1961).
- ³⁵A. E. Miroshnichenko, S. Flach, and Y. S. Kivshar, *Rev. Mod. Phys.* **82**, 2257 (2010).
- ³⁶A. C. Seridonio, E. C. Siqueira, F. M. Souza, R. S. Machado, S. S. Lyra, and I. A. Shelykh, *Phys. Rev. B* **88**, 195122 (2013).
- ³⁷A. C. Seridonio, F. S. Orahcio, F. M. Souza, and M. S. Figueira, *Phys. Rev. B* **85**, 165109 (2012).