



UNIVERSIDADE ESTADUAL PAULISTA
“JÚLIO DE MESQUITA FILHO”

**Faculdade de Engenharia de Ilha Solteira
(FEIS)**

Departamento de Física e Química (DFQ)

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

**Moléculas de Andreev mediadas por
férmons de Majorana**

José Eduardo Cardozo Sanches

Mestrado

05 de março de 2020

Ilha Solteira, São Paulo, Brasil

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

**Moléculas de Andreev mediadas por férmons de
Majorana**

José Eduardo Cardozo Sanches

Orientador: Prof. Dr. Antonio Carlos Ferreira Seridonio

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

Ilha Solteira - SP

Março/2020

FICHA CATALOGRÁFICA

Desenvolvido pelo Serviço Técnico de Biblioteca e Documentação

Sanches, José Eduardo Cardozo.

S211m Moléculas de Andreev mediadas por férmions de Majorana / José Eduardo
Cardozo Sanches. -- Ilha Solteira: [s.n.], 2020
140 f. : il.

Dissertação (mestrado) - Universidade Estadual Paulista. Faculdade de
Engenharia de Ilha Solteira. Área de conhecimento: Física da Matéria
Condensada, 2020

Orientador: Antonio Carlos Ferreira Seridonio
Inclui bibliografia

1. Férmions de Majorana. 2. Estados moleculares ligante e antiligante . 3.
Molécula de Andreev.

Raiane da Silva Santos
Raiane da Silva Santos

Supervisora Técnica de Seção
Seção Técnica de Referência, Atendimento ao usuário e Documentação
Diretoria Técnica de Biblioteca e Documentação
CRB/S - 9999

CERTIFICADO DE APROVAÇÃO

TÍTULO DA DISSERTAÇÃO: Moléculas de Andreev mediadas por férmions de Majorana

AUTOR: JOSÉ EDUARDO CARDOZO SANCHES

ORIENTADOR: ANTONIO CARLOS FERREIRA SERIDONIO

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

Prof. Dr. ANTONIO CARLOS FERREIRA SERIDONIO

Departamento de Física e Química / Faculdade de Engenharia de Ilha Solteira - UNESP

Prof. Dr. RAFAEL ZADOROSNY

Departamento de Física e Química / Faculdade de Engenharia de Ilha Solteira - UNESP

Prof. Dr. VALDECI PEREIRA MARIANO DE SOUZA

Departamento de Física / Instituto de Geociências e Ciências Exatas de Rio Claro - UNESP

Ilha Solteira, 05 de março de 2020

*Duas coisas me enchem a mente de assombro e reverênci... o céu estrelado
sobre mim... e a lei moral dentro de mim.*

[Immanuel Kant]

AGRADECIMENTOS

Deixo aqui meus agradecimentos a todos que fizeram parte da jornada para o desenvolvimento dessa pesquisa, especialmente para:

- Minha família, meus pais José e Maria e meu irmão Adriano, que tanto me auxiliaram com sua sabedoria nos momentos de difíceis tomadas de decisão e por sempre terem me apoiado durante minha carreira como estudante.
- Meu orientador, Prof. Dr. Antonio Carlos Ferreira Seridonio, pelo conhecimento, incentivo, sabedoria em lidar com novas ideias e também pela paciência em me orientar.
- Meus amigos de pós graduação e membros do *Strongly Correlated System Group*, Luciano Ricco, Mathaus Penha, William Mizobata e Yuri Marques pelas conversas e discussões que levaram ao desenvolvimento desta dissertação e ao meu aprimoramento como pesquisador.
- Meus amigos de graduação e da vida, Guilherme (Acerola), Hermerson (Salsicha) e Welinton Hirai (o Japa), por terem participado das conversas malucas sobre os mais variados assuntos, por terem feito parte de meu percurso acadêmico e por sua contribuição a este trabalho e a minha carreira como pesquisador.
- Ao Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior (CAPES) pelo auxílio financeiro que tornou possível a realização desta pesquisa.

Muito Obrigado!

José Eduardo Cardozo Sanches

Orientador

Antonio C. F. Seridonio

Autor

José E. C. Sanches

Moléculas de Andreev mediadas por férmiões de Majorana

Resumo

Estudou-se teoricamente um modelo composto por um fio de Kitaev na fase topológica com dois pontos quânticos (QDs - Quantum Dots), um em cada extremidade do nanofio. Desta forma, dois casos foram factíveis de análise, um deles com os estados ligados de Majorana (MBSs - Majorana Bound States) das bordas do fio acoplados a um único QD e o segundo em que se tem ambos os MBSs acoplados aos dois QDs. Para a primeira situação três condições foram estudadas, nas quais se verificou, na primeira, os perfis de férmiões de Majorana não locais, dados pelo acoplamento entre o MBS e o QD mais próximo e, nas outras duas condições, dois perfis relacionados aos acoplamentos dos dois MBSs a um QD, em que se considerou também a superposição entre os MBS. Estes dois perfis são denominados de *bowtie* e *diamond*, já conhecidos na literatura, possuindo também experimentos que validam suas manifestações. No segundo caso, em que se tem o acoplamento dos dois MBSs aos dois QDs e que se considerou também amplitudes de superposição entre os férniões de Majorana, investigou-se a manifestação de estados moleculares mediados por tais férniões, pois o transporte eletrônico entre os QDs, no sistema proposto, se dá por meio do nanofio. Constatou-se padrões condizentes a níveis moleculares ligante e antiligante nas assinaturas dos estados ligados de Andreev (ABSs), originários da superposição dos MBSs, assim como nos níveis dos QDs que foram desdobrados após a formação molecular.

Palavras-chaves: Férniões de Majorana, fio de Kitaev, estados moleculares ligante e antiligante, estados ligados de Andreev.

Advisor

Antonio C. F. Seridonio

Author

José E. C. Sanches

Andreev molecule mediated by Majorana fermions

Abstract

A model composed by a Kitaev wire within the topological phase with two quantum dots (QDs), one at each end of the nanowire, was theoretically studied. Two cases were analyzed: (i) Both the Majorana bound states (MBSs) at opposite ends of the nanowire are coupled to a single QD and (ii) both MBSs are coupled to the both QDs. For the first situation, three conditions were studied. In the first one, the profiles of nonlocal MBSs were verified, owing to the finite overlap between these states and the nearest QD; in the other two conditions, two profiles related to the couplings between the two MBSs and a QD, which also considered the overlap between the MBS. These profiles are known from previous experimental works as bowtie and diamond patterns. In the second case, in which both overlapped MBSs the manifestation of molecular states mediated by the MBSs was investigated, since electronic transport between the QDs , is mediated by nanowire. Patterns consistent with molecular levels of bonding and antibonding were found in the signatures of Andreev's bound states (ABSs), originating from the overlapped MBSs, as well as in the split of the QDs levels due to the molecular formation via the transport through the nanowire.

Keywords: Majorana fermions, Kitaev wire, bonding and antibonding molecular states, Andreev bound states.

Nomenclatura

ABS Andreev bound states — Estados ligados de Andreev

ABS-A Andreev bound states antibonding — Estados ligados de Andreev - antiligantes

ABS-B Andreev bound states bonding — Estados ligados de Andreev - ligantes

CAR Crossed Andreev reflection — Reflexão de Andreev cruzada

DOS Density of states — Densidade de estados

EOM Equation of Motion — Equação de movimento

LAR Local Andreev reflection — Reflexão de Andreev local

LCAO Linear combination of atomic orbitals — Combinação linear de orbitais atômicos

MBS Majorana bound state — Estados ligados de Majorana

QD Quantum dot — Ponto quântico

SIAM Single impurity Anderson model — Modelo de Anderson de uma impureza.

SO Spin-orbit — Spin-órbita

STM Scanning tunneling microscope — Microscópio de varredura por tunelamento

TS Topological superconductor — Supercondutor topológico

ZBA Zero bias anomaly — Anomalia de voltagem zero

Lista de Figuras

1.1	Esquema conceitual de dispositivo para criação do fio de Kitaev, composto por um nanofio semicondutor (em azul), um superconductor <i>s-wave</i> e as designações para campo spin-órbita (B_{SO}) e campo magnético (B). Os asteriscos em vermelho indicam os MBSs [13].	2
1.2	Cadeia atômica ferromagnética sob a superfície de um superconductor <i>s-wave</i> e estudado com uma ponta de STM (Scanning Tunneling Microscope) [2].	3
1.3	(a) Micrografia do dispositivo experimental com um QD (circulo traçejado). (b) Seção esquemática do dispositivo com InAs (verde) e camada epitaxial de Al (azul). B é o campo magnético aplicado paralelamente ao nanofio. Os termos V_{dot} , V_{wire} , V_{bg} e V_{sd} são referentes aos potenciais aplicados para controlar o nível do QD, a densidade do nanofio, o sistema QD e nanofio e, por fim, a diferença de potencial aplicada entre os terminais metálicos(Ti/Au) do sistema para se analisar fenômenos de condutância [20].	5
1.4	Esboço esquemático representando o fio de Kitaev na denominada fase trivial. Nota-se que os férmiões de Majorana (esferas vermelhas) se acoplam no mesmo sítio (elipses azuis), como expresso pela Eq. (1.10), formando um férnion regular.	8
1.5	Representação esquemática para a chamada fase topológica do fio de Kitaev. Nesta só existe acoplamento dos férniões de Majorana de um determinado sítio com o de um sítio vizinho adjacente, como estabelecido pela Eq. (1.11). É justamente nessa fase em que se encontram os MBSs isolados nas bordas do fio.	9

1.6 (a) Átomos e suas representações de funções de onda, Ψ_A e Ψ_B ; (b) Esquema representativo das funções moleculares ligante e antiligante; e (c) Níveis dos átomos A e B desdobrados nos níveis moleculares ligante e antiligante.	10
1.7 Esquema no qual N representa os terminais normais e TS o supercondutor topológico. (a) Processo de reflexão de Andreev local (LAR): um elétron é injetado no TS e um buraco é ejetado para o terminal de origem do elétron; (b) processo de Andreev cruzado (CAR): um elétron é injetado no TS e um buraco é ejetado no terminal oposto ao de origem do elétron; e (c) transporte de elétrons: o elétron de um terminal é transmitido para o outro.	11
2.1 Modelo de Anderson com uma impureza magnética (esfera vermelha) sob uma matriz metálica não magnética. A amplitude de hibridização entre impureza e hospedeiro metálico é determinada pelo parâmetro V	13
2.2 Representação de uma molécula formada por dois átomos cuja troca de informação é realizada por um termo de <i>hopping</i> $ t $, seguida pela representação dos orbitais moleculares ligante ($\varepsilon_d - t_c$) e antiligante ($\varepsilon_d + t_c$), oriundos da combinação dos níveis atômicos.	21
2.3 Formação molecular para $ t = 0.1$ e $\varepsilon_0 = 0$. a) Densidades de estados para cada funções de Green definida no sistema de dois átomos interagentes, sendo ρ_{11} e ρ_{22} as densidades para as funções de Green diretas e ρ_{12} e ρ_{21} referentes as funções cruzadas. b) Curva do estado molecular ligante dada pela soma das densidades de estados do sistema. Para este sistema considerou-se $\eta = 0.01$, fator este que agiu no sistema atribuindo largura aos picos.	26
2.4 Densidades de estados para a formação molecular com <i>hopping</i> $t = 3.0\Gamma_N$, as grandezas físicas do sistema foram estimadas em unidades do parâmetro de Anderson Γ_N . Os painéis (a) e (b) representam as densidades de estados obtidas nos QDs da esquerda e direita; (c) e (d) apresentam os termos de interferência entre os QDs e expressam as antirressonâncias presentes no sistema que são fundamentais para caracterizar, por sua vez, os estados moleculares ligante e antiligante, painel (e) e (f), respectivamente.	27

- 4.4 (a) Condutância diferencial para $B = 0.5\text{ T}$, caracteriza o desdobramento da ZBA em dois ABSs com padrões característicos do perfil *bowtie*, próximo da energia zero do sistema. (c) Mesma análise que a apresentada pelo painel (a), porém com $B = 1.0\text{ T}$, o comportamento dos ABSs próximos da energia zero do sistema expressam características referentes ao perfil *diamond* (as caixas representam medidas realizadas em resolução mais alta). Os painéis (b) e (d) expressão os mesmos comportamentos dos apresentados em (a) e (c), porém com um ajuste na escala de cores e um delineamento mais bem definido dos perfis (linhas azul e vermelha) [20]. 53
- 4.5 Representação esquemática dos acoplamentos para o aqui denominado perfil *double diamond*. Em que os QDs e os férmons de Majorana Ψ_1 e Ψ_2 , tidos como primeiros e segundos vizinhos são iguais, ou seja, as amplitudes de acoplamento dos QDs são simétricas e a superposição dos MBSs é $\varepsilon_M = 0.05\Gamma_N$ 55
- 4.6 Gráfico da DOS em função da frequência espectral ω e da energia do QD ε_d . Os painéis (a) e (b) são as leituras feitas para os QDs da esquerda e direita no regime molecular com os acoplamentos apresentados pela Fig. 4.5, onde nota-se o desdobramento dos níveis dos QDs e a interferência entre os ABSs. Os painéis (c) e (d) apresentam os termos de interferência entre o QD da esquerda e direita, τ_{LR} e τ_{RL} , em que se tem perfis antirressonantes e ressonantes. Os perfis dos QDs isolados (a) e (b) ao serem combinados com os padrões de interferência (c) e (d), dão origem aos chamados estados moleculares ligante e antiligante, painéis (e) e (f). 56
- 4.7 Representação ilustrativa dos (a) estados moleculares ligantes para os ABSs (ABS-B, em linha vermelha) e para os níveis desdobrados dos QDs (linhas azuis); (b) estados moleculares antiligantes relativos aos ABSs (ABS-A, linha vermelha) e aos níveis dos QDs (linhas azuis). O painel (c) traz a junção dos painéis (a) e (b), resultando nos perfis moleculares lidos em cada QD, τ_{LL} e τ_{RR} , da Fig. 4.6. . . . 58

- 4.8 Assinaturas dos QDs da esquerda e direita separados em plotagens relativas aos estados moleculares ligante e antiligante, $\tau_{\uparrow\uparrow}$ e $\tau_{\downarrow\downarrow}$, que são iguais devido ao fato possuírem a mesma energia e os mesmos acoplamentos. Os painéis (c) e (d), por sua vez, representam os termos mistos para os estados ligante e antiligante ($\tau_{\uparrow\downarrow}$ e $\tau_{\downarrow\uparrow}$) e suas amplitudes podem ser negligenciadas, pois escalam com 10^{-17} 59
- 4.9 Assinaturas dos termos de interferência entre os QDs da esquerda e direita, τ_{LR} e τ_{RL} , separados em plotagens relativas aos estados moleculares ligante e antiligante, $\tau_{\uparrow\uparrow}$ e $\tau_{\downarrow\downarrow}$, que quando combinados dão origem aos painéis (c) e (d), da Fig. 4.6. Os painéis (c) e (d), por sua vez, representam os termos interferência entre os estados ligante e antiligante ($\tau_{\uparrow\downarrow}$ e $\tau_{\downarrow\uparrow}$) e suas amplitudes são negligenciáveis. 60

Sumário

1	Introdução	1
1.1	O modelo de Kitaev	5
1.2	Orbitais moleculares	9
2	Formalismo matemático	13
2.1	Modelo de Anderson de uma impureza	13
2.2	Funções de Green	15
2.3	Equação de movimento	16
2.4	Molécula usual	21
3	Modelo teórico	29
3.1	Hamiltoniano	30
3.2	Transformação para a base molecular	31
3.3	Transformação para o Hamiltoniano Majorana	36
3.4	Função de Green dos pontos quânticos	40
4	Resultados e discussão	48
4.1	Caso 1: QDs isolados	48
4.2	Proposta de Formação molecular	55
5	Conclusão	61
A	Cálculos realizados para obtenção da DOS.	67
A.1	Hamiltonian	67
A.1.1	The full Hamiltonian	67
A.1.2	Anderson model transformation	68
A.1.3	Majorana Transformation	82
A.1.4	Full Hamiltonian	93
A.2	Equation of motion (EOM)	94

A.2.1	System of Green's functions	113
A.2.1.1	Finding the spin-up matrix Green's function $G^\uparrow(\omega)$. .	115
A.2.1.2	Finding the spin-down matrix Green's function $G^\downarrow(\omega)$	119
A.2.1.3	Results for the matrix $G^\sigma(\omega)$	122
A.2.2	The density of states for the spinless QDs	123

Capítulo 1

Introdução

O físico italiano Ettore Majorana, há praticamente um século, encontrou uma solução peculiar para a equação de Dirac. Esta solução permitia uma nova classe hipotética de partículas que, diferentemente dos elétrons e pósitrons, são descritas como suas próprias antipartículas [1, 2]. Tais partículas ficaram conhecidas como férmiões de Majorana. Ettore realizou esta proposta ao estudar neutrinos no contexto de física de altas energias, sua sugestão original foi que os neutrinos poderiam de fato ser explicados como férmiões de Majorana, tal hipótese permanece sendo estudada pela ciência atualmente [1, 3].

Os férmiões de Majorana se tornaram uma proposta promissora de estudo nos campos da Física da Matéria Condensada, nesse âmbito tais férmiões não são partículas fundamentais e surgem como excitações ou quasipartículas em determinados sistemas. Essas quasipartículas ao serem combinadas dão origem a um férnion usual não local, ou seja, um férnion regular pode ser definido como a combinação de dois férniões de Majorana. Quasipartículas Majorana possuem um grande potencial de utilização na construção de *quantum bits* (qubit) topológicos, o que daria origem a computação quântica livre de falhas, ou seja, pares de férniões de Majorana espacialmente separados podem ser utilizados para armazenar informações, tornando essa informação imune a efeitos de decoerência quântica [1, 4, 5, 6]. São estas características que têm dado aos férniões de Majorana um destaque sem precedentes no desenvolvimento de pesquisas voltadas à computação quântica.

Seguindo a premissa promissora dos férniões de Majorana, nos últimos anos muita dedicação de pesquisadores tem sido direcionada ao estudo de sistemas que possam dar origem a tais quasipartículas. Nesse contexto, os chamados supercondutores topológicos desempenham uma papel elementar, uma vez que,

em determinadas circunstâncias, estes materiais podem dar origem aos chamados estados ligados de Majorana (do inglês, MBSs - Majorana bound states) [7, 8, 9, 10].

No que diz respeito à emergência e detecção de férmons de Majorana, o fio de Kitaev, na fase topológica tem se destacado [1, 11]. Este dispositivo consiste de um nanofio 1D (unidimensional) com supercondutividade do tipo *p-wave* que, em suas bordas, é capaz de abrigar os MBSs.

Um material convencional no estado supercondutor consiste na formação de pares de Cooper, dessa forma o material passa a conduzir por meio da atração indireta de dois elétrons. Para a chamada supercondutividade do tipo *s-wave* o par de Cooper é formado por dois elétrons de spins contrários, já para o caso em que se tem a supercondutividade *p-wave*, diferentemente da *s-wave*, os elétrons que formam os pares de Cooper no material possuem o mesmo spin. É importante que fique claro que esses tipos de materiais se relacionam com a chamada teoria BCS (referente aos pesquisadores - John Bardeen, Leon Cooper e Robert Schrieffer) [12], onde os pares de Cooper são o elemento básico para o transporte eletrônico do sistema.

Experimentalmente, os dispositivos com supercondutividade *p-wave* podem ser obtidos em sistemas como o apresentado pela Fig. 1.1, onde se tem um nanofio semicondutor com forte interação spin-órbita (SO) [14] na superfície ou próximo de um material supercondutor *s-wave*, pois dessa forma, por efeito de proximidade, tem-se a indução do emparelhamento entre elétrons de spins e momentos opostos no nanofio [13]. O ingrediente final é a submissão desse sistema a um campo magnético paralelo ao nanofio e perpendicular ao campo SO, campo este que deve possuir magnitude suficiente para alinhar os spins dos elétrons que compõem os pares de Cooper induzidos no semicondutor, porém não deve ser intenso ao ponto de destruir a supercondutividade do sistema. Dessa forma, como supracitado, o alinhamento dos spins nos pares de Cooper induzidos no nanofio semicondutor dá origem à supercon-

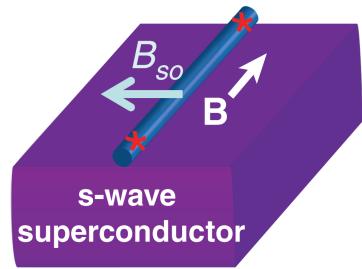


Figura 1.1: Esquema conceitual de dispositivo para criação do fio de Kitaev, composto por um nanofio semicondutor (em azul), um supercondutor *s-wave* e as designações para campo spin-órbita (B_{SO}) e campo magnético (B). Os asteriscos em vermelho indicam os MBSs [13].

dutividade *p-wave*. Essa engenharia para se desenvolver um dispositivo com supercondutividade *p-wave* capaz de dar origem aos estados de Majorana se faz necessária, pois são muito raros os materiais na natureza com estas características. Somente o Sr_2RuO_4 (Rutenato de estrôncio) e o Hélio (${}^3\text{He}$) superfluido são materiais naturalmente capazes de apresentar a supercondutividade *p-wave*. Porém não apresentam as possibilidades de ajuste ou configurações apresentadas em modelos como o de Kitaev, onde parâmetros como campos magnéticos, potenciais elétricos, entre outros, podem ser controlados.

Com a proposta de confecção do fio de Kitaev e a possível formação dos MBSs em suas bordas surgiu a necessidade de se detectar tais estados. Uma das maneiras para se fazer isso é avaliar o transporte eletrônico em sistemas em que o fio de Kitaev se acopla a pontos quânticos (QDs - quantum dots)¹ [15, 16, 17]. É sabido da literatura que quando se tem um QD acoplado a um MBS, uma das bordas do fio de Kitaev, observa-se a manifestação de uma modificação na condutância quando o sistema passa por voltagem zero, modificação esta que atribui uma redução da condutância por um fator $1/2$ em relação ao *quantum* de condutância $G_0 = e^2/h$, que seria um valor obtido sem o acoplamento com o estado Majorana e em sistemas *spinless* (apenas uma orientação de spin) [18]. Como já mencionado, dois férmiões de Majorana quando combinados dão origem a um férnion usual, desta forma é plausível dizer que um majorana é como um meio estado fermiônico e é devido a essa característica que quando se acopla uma borda do nanofio ao QD se tem a redução da condutância pela metade, ou seja, tem-se o vazamento desse meio estado fermiônico para o QD causando uma modificação no transporte eletrônico, já que o nível do QD passa estar parcialmente ocupado. Liu e Baranger [18], afirmam que para o caso de acoplamento do QD com um férnion regular (como um elétron), a condutância do sistema vai a zero, pois se tem o estado eletrônico do QD completamente ocupado, afirmam também que a assinatura do férnion de Majorana neste tipo de sistema é, justamente, a

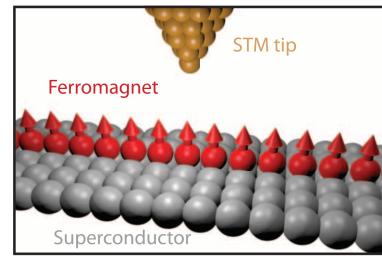


Figura 1.2: Cadeia atômica ferromagnética sob a superfície de um supercondutor *s-wave* e estudado com uma ponta de STM (Scanning Tunneling Microscope) [2].

¹QDs são dispositivos quânticos que expressam comportamento de átomos, tipicamente são abordados como átomos artificiais de um único ou multiníveis eletrônicos.

redução da condutância por um fator 1/2.

Essas assinaturas em voltagem zero são as denominadas ZBA (zero bias anomaly) [19] e, em sistemas como os aqui explorados, elas têm origem devido as características dos MBSs, como o fato de que possuem energia zero, surgindo como uma assinatura anômala em zero de energia. Na Ref. [2], foram usadas cadeias ferromagnéticas (F_e) depositadas na superfície de materiais supercondutores do tipo *s-wave* com forte acoplamento SO, como o P_b [ver Fig. 1.2], esta proposta tinha como finalidade a detecção de férmions de Majorana, que surgem como assinaturas em zero de energia. A assinatura obtida em zero de energia, a ZBA, para este sistema, poderia ter origem causada por desordem atômica no sistema, mas afirmam que tais picos não possuem relação alguma com a desordem, isso provavelmente se deve a supercondutividade topológica gerada no sistema que o “protege” de imperfeições ao longo das cadeias atômicas ferromagnéticas. Essa ZBA detectada poderia também ser causado por efeito Kondo e, se o fosse, haveria apenas um aumento na densidade de estados (DOS) próximo do nível de Fermi [2].

O sistema proposto neste trabalho, que será apresentado mais adiante, assemelha-se ao sistema apresentado pela Fig. 1.3, em que os MBSs do sistema se acoplam ao estado de um único QD. O painel (a) da Fig. 1.3 (cores meramente ilustrativas) apresenta uma micrografia do dispositivo experimental em que se tem a formação do QD na região demarcada por um círculo pontilhado; o painel (b), por sua vez, é uma representação esquemática de uma seção do dispositivo experimental, em que se tem a representação do nanofio semicondutor de InAs (*Indium arsenide*) ou InSb (*Indium antimonide*) [21] com forte acoplamento SO, no qual, em determinada seção, tem-se o crescimento epitaxial de Al (alumínio), material supercondutor *s-wave*. Por efeito de proximidade gera-se, na região recoberta pelo supercondutor, a indução de pares de Cooper no material semicondutor e, para que se tenha a emergência da supercondutividade *p-wave*, um campo magnético é aplicado paralelamente ao nanofio ou perpendicularmente ao campo SO. Desta forma, criam-se as condições necessárias para o surgimento dos MBSs nas bordas do fio, como proposto por Kitaev [11, 21].

A camada epitaxial de Al sobre o nanofio possui de 7 a 10 nm em três faces do dispositivo e, como apresentado pela Fig. 1.3, a camada preenche completamente uma das extremidades do nanofio e a outra não é recoberta, é nessa extremidade (sem Al) que se tem a formação do QD. O campo magnético aplicado ao longo do fio tem seu limite crítico em torno de 2 T. Os potenciais eletrostáti-

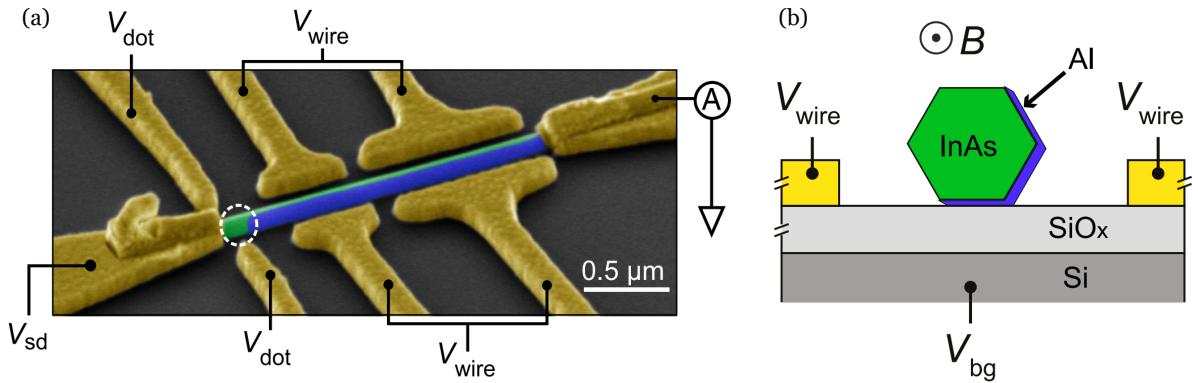


Figura 1.3: (a) Micrografia do dispositivo experimental com um QD (circulo tracejado). (b) Seção esquemática do dispositivo com InAs (verde) e camada epitaxial de Al (azul). B é o campo magnético aplicado paralelamente ao nanofio. Os termos V_{dot} , V_{wire} , V_{bg} e V_{sd} são referentes aos potenciais aplicados para controlar o nível do QD, a densidade do nanofio, o sistema QD e nanofio e, por fim, a diferença de potencial aplicada entre os terminais metálicos(Ti/Au) do sistema para se analisar fenômenos de condutância [20].

cos V_{dot} controlam a ocupação do QD, enquanto que os potenciais V_{wire} ajustam a densidade ao longo do fio e, como afirma a Ref. [20], para ajustar o nível do QD ou o potencial químico do nanofio, os valores de V_{dot} e V_{wire} são modificados de forma compensativa. A tensão V_{bg} , por sua vez, é um potencial chamado de *global back gate* e modifica tanto o nível do QD quanto a densidade do nanofio [20].

O modelo estudado nessa dissertação difere do aparato apresentado na Fig. 1.3, pois nele existem dois QDs, um em cada extremidade do nanofio e, como será apresentado mais adiante, quando a análise é feita para um único QD os resultados apresentados na literatura são recuperados, como alguns perfis que são gerados com os acoplamentos do sistema e a superposição dos férmons de Majorana. O modelo também é uma formulação feita à luz do sistema proposto por Kitaev e, por tanto, o entendimento desse sistema é fundamental. Em função disso, a próxima seção será dedicada à descrição do modelo do fio de Kitaev.

1.1 O modelo de Kitaev

Como abordado previamente, o fio de Kitaev é uma proposta promissora para a detecção dos férmons de Majorana quando na fase topológica, com supercondutividade *p-wave* (triplo), pois sob tal condição se tem sítios isolados

nas bordas do fio nos quais os MBSs emergem. Como demonstrado por Kitaev, estes sítios isolados, que contém os férnion de Majorana, são imunes a qualquer tipo de erro que poderia ser causado pelos demais sítios [11]. O modelo de Kitaev, considerando uma cadeia com um grande número de sítios, $x \gg 1$ (x número de sítios), que podem ou não estar ocupados com elétrons *spinless* (sempre com mesma orientação de spin) [11, 19], é análogo a uma rede *tight-binding* e o Hamiltoniano pode ser escrito na forma

$$\mathcal{H} = -\mu \sum_x c_x^\dagger c_x - \frac{1}{2} \sum_x (t c_x^\dagger c_{x+1} + \Delta e^{i\phi} c_x c_{x+1} + H.c.), \quad (1.1)$$

em que μ é o potencial químico, t é amplitude do *hopping* entre os primeiros vizinhos e Δ é a amplitude de formação do par de Cooper com fase correspondente ϕ , para a supercondutividade *p-wave*.

Os operadores fermiônicos usuais de criação e destruição (c_x^\dagger e c_x , respectivamente) podem ser escritos como a combinação de dois operadores Majorana por meio das relações

$$c_x = \frac{e^{-i\phi/2}}{2} (\gamma_{B,x} + i\gamma_{A,x}), \quad (1.2)$$

e

$$c_x^\dagger = \frac{e^{i\phi/2}}{2} (\gamma_{B,x} - i\gamma_{A,x}), \quad (1.3)$$

nas quais os operadores Majorana satisfazem a igualdade $\gamma_A = \gamma_A^\dagger$ que descreve que as partículas são iguais às antipartículas assim como a relação de anticomutação fermiônica $\{\gamma_{\alpha x}, \gamma_{\alpha' x'}\} = 2\delta_{\alpha\alpha'}\delta_{xx'}$ e a partir dela, para os casos de mesmo sítio, obtém-se

$$\begin{aligned} \gamma_{\alpha x}\gamma_{\alpha x} + \gamma_{\alpha x}\gamma_{\alpha x} &= 2\delta_{\alpha\alpha}\delta_{xx} \\ 2\gamma_{\alpha x}\gamma_{\alpha x} &= 2 \\ \gamma_{\alpha x}^2 &= 1. \end{aligned} \quad (1.4)$$

Considerando os operadores fermiônicos definidos, a Eq. (1.1) precisa ser

reescrita em função dos mesmos. Então,

$$\begin{aligned}
 \mathcal{H} = & -\frac{\mu}{4} \sum_x (\gamma_{B,x}\gamma_{B,x} + i\gamma_{B,x}\gamma_{A,x} - i\gamma_{A,x}\gamma_{B,x} + \gamma_{A,x}\gamma_{A,x}) \\
 & - \frac{t}{8} \sum_x (\gamma_{B,x}\gamma_{B,x+1} + i\gamma_{B,x}\gamma_{A,x+1} - i\gamma_{A,x}\gamma_{B,x+1} + \gamma_{A,x}\gamma_{A,x+1}) \\
 & + \frac{t}{8} \sum_x (\gamma_{B,x}\gamma_{B,x+1} + i\gamma_{A,x}\gamma_{B,x+1} - i\gamma_{B,x}\gamma_{A,x+1} + \gamma_{A,x}\gamma_{A,x+1}) \\
 & - \frac{\Delta}{8} \sum_x (\gamma_{B,x}\gamma_{B,x+1} + i\gamma_{B,x}\gamma_{A,x+1} + i\gamma_{A,x}\gamma_{B,x+1} - \gamma_{A,x}\gamma_{A,x+1}) \\
 & + \frac{\Delta}{8} \sum_x (\gamma_{B,x}\gamma_{B,x+1} - i\gamma_{B,x}\gamma_{A,x+1} - i\gamma_{A,x}\gamma_{B,x+1} - \gamma_{A,x}\gamma_{A,x+1}),
 \end{aligned} \tag{1.5}$$

simplificando, pela soma dos termos

$$\begin{aligned}
 \mathcal{H} = & -\frac{\mu}{4} \sum_x (\gamma_{B,x}\gamma_{B,x} + i\gamma_{B,x}\gamma_{A,x} - i\gamma_{A,x}\gamma_{B,x} + \gamma_{A,x}\gamma_{A,x}) \\
 & - i\frac{t}{4} \sum_x (\gamma_{B,x}\gamma_{A,x+1} - \gamma_{A,x}\gamma_{B,x+1}) \\
 & - i\frac{\Delta}{4} \sum_x (\gamma_{B,x}\gamma_{A,x+1} + \gamma_{A,x}\gamma_{B,x+1}).
 \end{aligned} \tag{1.6}$$

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

$$\begin{aligned}
 \mathcal{H} = & -\frac{\mu}{4} \sum_{x=1}^N (2 + 2i\gamma_{B,x}\gamma_{A,x}) \\
 & - i\frac{t}{4} \sum_{x=1}^{N-1} (\gamma_{B,x}\gamma_{A,x+1} - \gamma_{A,x}\gamma_{B,x+1}) \\
 & - i\frac{\Delta}{4} \sum_{x=1}^{N-1} (\gamma_{B,x}\gamma_{A,x+1} + \gamma_{A,x}\gamma_{B,x+1}).
 \end{aligned} \tag{1.7}$$

Então,

$$\begin{aligned}\mathcal{H} = & -\frac{\mu}{2} \sum_{x=1}^N (1 + i\gamma_{B,x}\gamma_{A,x}) - i\frac{t}{4} \sum_{x=1}^{N-1} (\gamma_{B,x}\gamma_{A,x+1} - \gamma_{A,x}\gamma_{B,x+1}) \\ & - i\frac{\Delta}{4} \sum_{x=1}^{N-1} (\gamma_{B,x}\gamma_{A,x+1} + \gamma_{A,x}\gamma_{B,x+1}),\end{aligned}\quad (1.8)$$

logo

$$\mathcal{H} = -\frac{\mu}{2} \sum_{x=1}^N (1 + i\gamma_{B,x}\gamma_{A,x}) - \frac{i}{4} \sum_{x=1}^{N-1} (t + \Delta) \gamma_{B,x}\gamma_{A,x+1} - \frac{i}{4} \sum_{x=1}^{N-1} (t - \Delta) \gamma_{A,x}\gamma_{B,x+1}. \quad (1.9)$$

O Hamiltoniano apresentado pela Eq. (1.9), escrito na base dos operadores Majorana, pode assumir dois casos especiais. Estes casos caracterizam o sistema como estando nas chamadas fase trivial ou topológica. Inicialmente, considere $\Delta = t = 0$ e $\mu < 0$, essa é condição que dá origem à fase trivial do fio de Kitaev e o Hamiltoniano torna-se

$$\mathcal{H} = -\frac{\mu}{2} \sum_{x=1}^N (1 + i\gamma_{B,x}\gamma_{A,x}). \quad (1.10)$$

Note que o segundo e o terceiro termo da Eq. (1.9) são iguais a zero neste regime, restando apenas o termo apresentado pela Eq. (1.10). Este termo possui os operadores $\gamma_{B,x}\gamma_{A,x}$ que descrevem o emparelhamento entre majoranas do mesmo sítio x , não havendo assim acoplamento com os sítios vizinhos adjacentes, como apresentado pela Fig. (1.4).

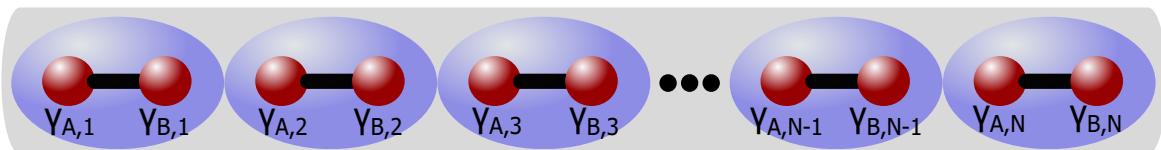


Figura 1.4: Esboço esquemático representando o fio de Kitaev na denominada fase trivial. Nota-se que os férmiões de Majorana (esferas vermelhas) se acoplam no mesmo sítio (elipses azuis), como expresso pela Eq. (1.10), formando um férmião regular.

O outro limite apresentado pelo sistema diz respeito a fase topológica que se origina nas condições de $\Delta = t > 0$ e $\mu = 0$. Sob tais circunstâncias, o Hamiltoniano de Kitaev tem o primeiro e o terceiro termo anulados, sendo assim

$$\mathcal{H} = -i \frac{t}{2} \sum_{x=1}^{N-1} \gamma_{B,x} \gamma_{A,x+1}, \quad (1.11)$$

como pode-se notar por meio dos operadores $\gamma_{B,x} \gamma_{A,x+1}$ existe um emparelhamento de majoranas de sítios vizinhos adjacentes. Dessa forma, nas bordas do fio de Kitaev, haverão majoranas remanescentes, como pode ser evidenciado pela Fig. (1.5) e, como estão desacoplados de seu entorno, pode-se afirmar que eles estão protegidos topologicamente.

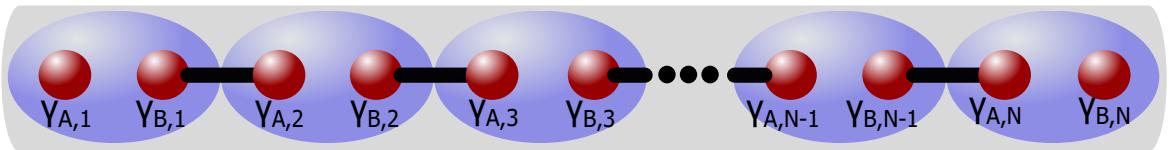


Figura 1.5: Representação esquemática para a chamada fase topológica do fio de Kitaev. Nesta só existe acoplamento dos férmons de Majorana de um determinado sítio com o de um sítio vizinho adjacente, como estabelecido pela Eq. (1.11). É justamente nessa fase em que se encontram os MBSs isolados nas bordas do fio.

Devido à estas características, os férmons de Majorana são promissores para a computação quântica, pois acredita-se que por estarem isolados nas bordas do fio, eles possam armazenar informações e prevenir sua perda por efeitos de decoerência quântica, que basicamente é a perda de informação de um sistema físico para o ambiente. Isso tem sido o grande desafio da computação quântica, uma vez que, para que os processos quânticos realizados por essas máquinas ocorram de maneira satisfatória, os estados coerentes precisam ser mantidos no sistema.

1.2 Orbitais moleculares

Neste trabalho, a formação molecular mediada por férmons de Majorana será explorada a fim de se analisar as características desse tipo de molécula.

Neste intuito, este tópico abordará informações relacionadas à formação molecular, entretanto, irá se restringir a moléculas covalentes simples, como H_2 , nas quais se tem o compartilhamento de elétrons entre os átomos formando uma nuvem eletrônica. Em moléculas mais complexas, em que existem variados elementos, cada átomo contribui de maneira diferente à formação molecular [22].

Na formação molecular, os orbitais atômicos, que são característicos de cada tipo de átomo, se combinam formando orbitais totalmente novos que pertencem a molécula, os chamados orbitais moleculares, cuja a quantidade de novos orbitais é igual a soma do número de orbitais provenientes de cada átomo. Em linguagem de primeira quantização (funções de onda), os orbitais moleculares se formam a partir da superposição, combinação matemática, das funções de onda dos orbitais atômicos, como apresentado pelo método denominado de combinação linear dos orbitais atômicos (LCAO - *Linear combination of atomic orbitals*). A determinação da função de onda molecular (ou orbital molecular) Ψ_{mol} é dada pela solução da equação de Schrödinger $\mathcal{H}\Psi_{mol} = E\Psi_{mol}$. A solução exata é complicada de ser obtida, mas uma forma mais simples é considerar o orbital molecular como combinação das funções de onda de cada átomo isolado, ψ_A e ψ_B . Sendo assim, $\Psi_{mol} = C_A\psi_A + C_B\psi_B$ em que C_A e C_B são constantes e note que, se por acaso um desses coeficientes for zero, para fins de exemplificação considere $C_B = 0$, o elétron, na formação molecular, estará preso ao núcleo atômico A , e, na situação em que $C_A = 0$, o elétron estará preso ao núcleo do átomo B [23].

Quando ocorre a formação molecular e as funções de onda resultam em

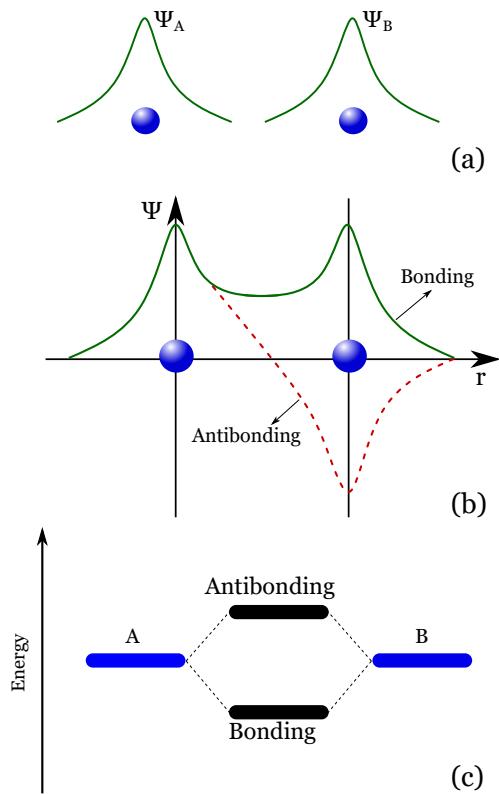


Figura 1.6: (a) Átomos e suas representações de funções de onda, Ψ_A e Ψ_B ; (b) Esquema representativo das funções moleculares ligante e antiligante; e (c) Níveis dos átomos A e B desdobrados nos níveis moleculares ligante e antiligante.

uma interferência construtiva, há uma redistribuição da densidade eletrônica entre os núcleos atômicos causando um efeito de redução do potencial de Coulomb, dando origem as características do orbital ligante da molécula. Para o caso em que as funções de onda resultam de uma interferência destrutiva, tem-se a presença das peculiaridades que caracterizam o estado molecular antiligante, como a repulsão das nuvens eletrônicas de cada átomo.

A energia da molécula pode ser maior ou menor que a energia dos átomos isolados, como apresentado pela Fig. 1.6. Desta forma, como apresentado pela Ref. [23], uma molécula possui distribuição energética mais favorável que átomos isolados e seu níveis moleculares de menor e maior energia são, respectivamente, denominados de estados moleculares ligante e antiligante [23].

No contexto de transporte eletrônico por meio de materiais supercondutores, é importante entender os chamados processos de reflexão de Andreev. Estes processos existem em sistemas em que terminais metálicos trocam informações por meio de um material supercondutor, N-TS-N, como ilustra a Fig. 1.7, para um supercondutor topológico (TS - *Topological superconductor*).

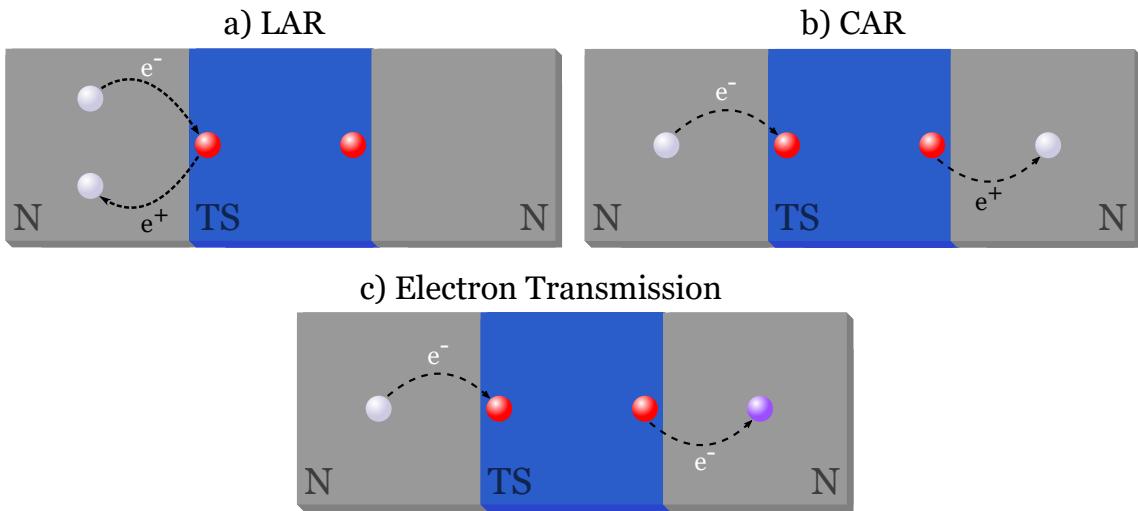


Figura 1.7: Esquema no qual N representa os terminais normais e TS o supercondutor topológico. (a) Processo de reflexão de Andreev local (LAR): um elétron é injetado no TS e um buraco é ejetado para o terminal de origem do elétron; (b) processo de Andreev cruzado (CAR): um elétron é injetado no TS e um buraco é ejetado no terminal oposto ao de origem do elétron; e (c) transporte de elétrons: o elétron de um terminal é transmitido para o outro.

O painel (a) da Fig. 1.7 apresenta a chamada reflexão de Andreev local (LAR - Local Andreev reflection), em que um elétron sai de um dos terminais me-

tálicos e entra no TS, em resposta a isso, o TS ejeta um buraco para o mesmo terminal. A chamada reflexão de Andreev cruzada (CAR - Crossed Andreev reflection), por sua vez, é apresentada pelo painel (b), onde se tem um elétron injetado no TS a partir de um dos terminais e o TS ejeta um buraco no terminal oposto ao que o elétron se originou. O painel (c), expressa a transmissão de elétrons, que se dá por meio da injeção de um elétron no TS a partir de um dos terminais, e diferentemente da CAR, se tem a ejeção de um elétron no terminal oposto [24].

Na abordagem molecular realizada nesta dissertação, os processos de reflexão de Andreev dão origem aos estados ligados de Andreev (ABS - *Andreev bound states*), que serão peças fundamentais para entendimento dos resultados obtidos. Os ABSs têm origem na superposição de férmons de Majorana, desta forma, são elementos responsáveis pela formação molecular no sistema estudado e devido a isso, se atribui do nome “moléculas de Andreev”.

Capítulo 2

Formalismo matemático

2.1 Modelo de Anderson de uma impureza

O modelo de Anderson, como o próprio nome sugere, foi desenvolvido por P. W. Anderson em 1961. Este está entre os primeiros modelos na Matéria Condensada a considerar a correlação de muitos corpos em sistemas físicos. O modelo de Anderson de uma impureza (do inglês, SIAM: *Single Impurity Anderson Model*) está representado na Fig. 2.1. Tal modelo estuda a forma com que uma impureza magnética interage com uma matriz não magnética, ou seja, a forma com que se pode ter a formação de momentos magnéticos em matrizes devido a sua dopagem por impurezas com momentos magnéticos bem definidos [25, 26].

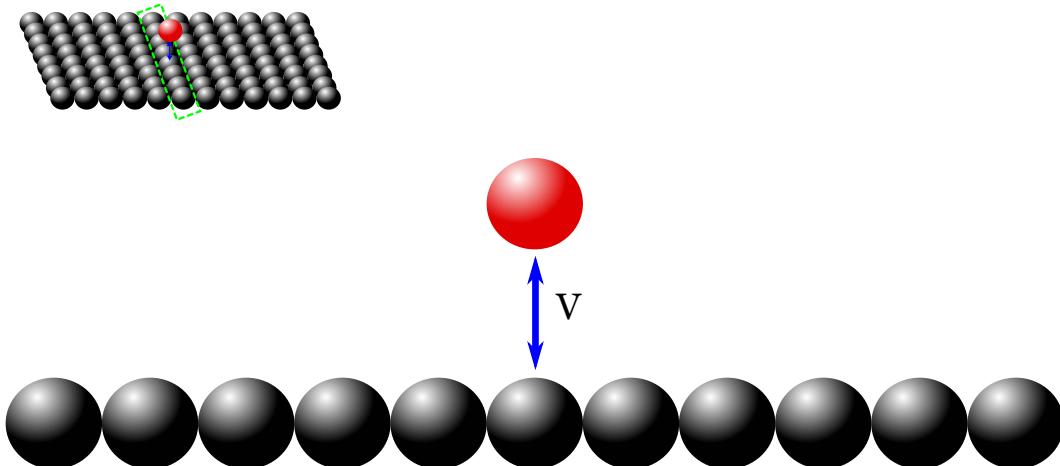


Figura 2.1: Modelo de Anderson com uma impureza magnética (esfera vermelha) sob uma matriz metálica não magnética. A amplitude de hibridização entre impureza e hospedeiro metálico é determinada pelo parâmetro V .

Como apresentado na Fig. 2.1, o SIAM aborda um sistema composto por uma impureza e uma matriz hospedeira e busca explanar como se dá a interação entre esses dois componentes. Desta forma, o Hamiltoniano de Anderson, que expressa esse sistema, é escrito como [25]:

$$\mathcal{H}_{SIAM} = \mathcal{H}_{host} + \mathcal{H}_{imp} + \mathcal{H}_{hib}. \quad (2.1)$$

O primeiro termo do Hamiltoniano da Eq. (2.1) descreve o hospedeiro, o gás de elétrons não interagentes do sistema. Em linguagem de segunda quantização (operadores de criação e destruição), o Hamiltoniano do hospedeiro é escrito como

$$\mathcal{H}_{host} = \sum_{\sigma k} \varepsilon_{\sigma k} c_{\sigma k}^\dagger c_{\sigma k}, \quad (2.2)$$

no qual se tem $\varepsilon_{\sigma k}$ que descreve a energia dos elétrons livres, bem como os operadores $c_{\sigma k}^\dagger$ ($c_{\sigma k}$) que representam a criação (aniquilação) de elétrons com spin σ e número de onda k no hospedeiro.

O segundo termo da Eq. (2.1), \mathcal{H}_{imp} , descreve a impureza e pode ser definido na forma

$$\mathcal{H}_{imp} = \sum_{\sigma} \epsilon_{d\sigma} d_{\sigma}^\dagger d_{\sigma} + U n_{d\uparrow} n_{d\downarrow}$$

em que o primeiro termo a direita representa a impureza de um único sítio que pode ser ocupado por elétrons que possuam determinada energia $\epsilon_{d\sigma}$ e, necessariamente, spins contrários, seguido dos operadores d_{σ}^\dagger (d_{σ}) que criam (destroem) elétrons no nível energético da impureza. O segundo termo descreve a repulsão de Coulomb de spins opostos, da impureza, $U n_{d\uparrow} n_{d\downarrow} = U (d_{\uparrow}^\dagger d_{\uparrow} d_{\downarrow}^\dagger d_{\downarrow})$, os termos $n_{d\uparrow}$ e $n_{d\downarrow}$ são os chamados operadores número e são compostos por operadores de criação (d_{σ}^\dagger) e destruição (d_{σ}) em função do spin σ .

O termo de hibridização, a terceira parte do Hamiltoniano de Anderson, descreve a interação entre os elétrons do nível eletrônico da impureza e do contínuo de energias do hospedeiro metálico,

$$\mathcal{H}_{hib} = \sum_{\sigma k} \left(V_{\sigma k} c_{\sigma k}^\dagger d_\sigma + V_{\sigma k}^* d_\sigma^\dagger c_{\sigma k} \right)$$

sendo que o termo $(c_{\sigma k}^\dagger d_\sigma + h.c.)$ expressa a destruição (d_σ) de um elétron no nível da impureza e criação ($c_{\sigma k}^\dagger$) de um elétron no contínuo de energia, representando justamente a troca de elétrons entre a impureza e o hospedeiro. Tem-se aqui também a chamada amplitude de hibridização, $V_{\sigma k}$, que representa a amplitude de transição entre elétrons dos estados da impureza com o contínuo do hospedeiro. Vale ressaltar que o termo de hibridização independe do vetor de onda k quando a hibridização for puramente local.

2.2 Funções de Green

O formalismo de funções de Green é fundamentalmente utilizado no estudo de equações diferenciais ordinárias e parciais essencialmente empregadas em distintos campos da matemática e física. No ramo da mecânica quântica, as funções de Green são ferramentas básicas para se resolver equações de Schrödinger do tipo $[H_0(\mathbf{r}) + V(\mathbf{r})]\psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r})$, nas quais a determinação dos autovalores de $H_0(\mathbf{r})$ são imprescindíveis sob presença de um potencial externo $V(\mathbf{r})$. George Green (1793-1841) foi o responsável pelo desenvolvimento dessa classe de equações diferenciais com condições de contorno generalizadas, que desempenham um papel indispensável no estudo e no desenvolvimento de soluções para funções diferenciais ordinárias e parciais [26, 27, 28].

No campo da física de muitos corpos as funções de Green são de suma importância, pois possibilitam a solução de problemas envolvendo espalhamento de partículas, sistemas fora do equilíbrio, mecânica estatística, sistemas contendo potenciais perturbativos, entre outros. Existem diversos tipos de funções de Green, neste trabalho faremos uso das funções de Green retardadas de equilíbrio [26, 28], que podem ser escritas da seguinte forma

$$\mathcal{G}_\sigma^R(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t') = -\frac{i}{\hbar} \theta(t - t') Z_e^{-1} \sum_n e^{-\beta E_n} \left\langle n \left| [\Psi_\sigma(\mathbf{r}, t), \Psi_\sigma^\dagger(\mathbf{r}', t')]_+ \right| n \right\rangle, \quad (2.3)$$

no qual $\theta(t - t')$ é a função degrau (também chamada de função Heaviside); Z é

a função de partição do sistema, $Z = \text{Tr} \{ e^{-\beta \mathcal{H}} \}$, em que Tr simboliza o traço e $\beta = \frac{1}{k_B T}$; o \mathcal{H} é o Hamiltoniano do sistema; $[..., ...]_+$ retrata a operação de anticomutação (também representada por $\{..., ...\}$). Os operadores $\Psi_\sigma^\dagger(r', t')$ e $\Psi_\sigma(r, t)$ representam, respectivamente, a criação de uma partícula com spin σ em um sítio r' no instante t' e sua destruição em um sítio r e instante t ; e, por fim, a média térmica $\langle ... \rangle$ aplicada no anticomutador.

A relação contida nos operadores “ Ψ ” evidenciam uma característica fundamental das função de Green. Tal característica pode ser dita como a evolução dos operadores, pois tem-se a criação de uma partícula em um determinado sítio r' da rede em um instante específico t' e sua destruição em um sítio r no instante t , à isso se dá a característica de modificação dos operadores e, devido a esse fator, as funções de Green são conhecidas ou descritas como “propagadores”, pois são capazes de descrever fenômenos que ocorrem ao longo dos sítios do material em estudo [27].

As funções de Green apresentadas até o momento pertencem ao domínio do tempo (t e t'), porém, neste trabalho, a grandeza estudada é a densidade de estados (do inglês, DOS - *Density of states*), que é obtida através da parte imaginária da função de Green no domínio da energia,

$$\rho_{DOS}(\omega) = -\frac{1}{\pi} \text{Im} [\mathcal{G}_\sigma^R(\omega)]. \quad (2.4)$$

Desta forma, a transformada de Fourier do domínio do tempo para o domínio da energia se mostra fundamental e será abordada por meio da técnica da equação de movimento.

2.3 Equação de movimento

Até o momento foram apresentadas formas com as quais observáveis físicas podem ser expressas por meio da representação de funções de Green. Neste tópico será abordada uma técnica para se determinar funções de Green por meio da evolução temporal de seus operadores, a técnica da equação de movimento (do inglês, *EOM: Equation of Motion*) [27, 28].

Para fins de exemplificação da técnica da EOM considere uma função de Green retardada, análoga a que foi apresentada no tópico anterior. Para fins de simplicidade a dependência espacial e t' serão omitidos, desta forma

$$\mathcal{G}_{\Psi_i \Psi_j}^R(t, 0) = -\frac{i}{\hbar} \theta(t-0) Z_e^{-1} \sum_n e^{-\beta E_n} \left\langle n \left| \left[\Psi_i(t), \Psi_j^\dagger(0) \right]_+ \right| n \right\rangle. \quad (2.5)$$

É necessário realizar a derivada temporal da função \mathcal{G}^R para que se possa desenvolver o método da EOM.

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \mathcal{G}_{\Psi_i \Psi_j}^R(t, 0) &= -\frac{i}{\hbar} \left(\frac{\partial}{\partial t} \theta(t-0) \right) Z_e^{-1} \sum_n e^{-\beta E_n} \left\langle n \left| \left[\Psi_i(t), \Psi_j^\dagger(0) \right]_+ \right| n \right\rangle \\ &- \frac{i}{\hbar} \theta(t-0) Z_e^{-1} \sum_n e^{-\beta E_n} \left\langle n \left| \left[\left(\frac{\partial}{\partial t} \Psi_i(t) \right), \Psi_j^\dagger(0) \right]_+ \right| n \right\rangle, \end{aligned} \quad (2.6)$$

a derivada da função degrau corresponde a uma função delta de Dirac, $\frac{\partial}{\partial t} \theta(t-0) = \delta(t-0)$. Para se estudar a evolução temporal do operador $\Psi_i(t)$ a utilização da equação de Heisenberg é fundamental. Esta função,

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi_i(t) &= [\Psi_i, \mathcal{H}] \\ \frac{\partial}{\partial t} \Psi_i(t) &= -\frac{i}{\hbar} [\Psi_i, \mathcal{H}], \end{aligned} \quad (2.7)$$

desenvolve a derivada temporal do operador de aniquilação, $\Psi_i(t)$, por meio da operação de comutação com o Hamiltoniano (\mathcal{H}) total do sistema em estudo. Sendo assim, a Eq. (2.6) torna-se

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \mathcal{G}_{\Psi_i \Psi_j}^R(t, 0) &= -\frac{i}{\hbar} \delta(t-0) Z_e^{-1} \sum_n e^{-\beta E_n} \left\langle n \left| \left[\Psi_i(t), \Psi_j^\dagger(0) \right]_+ \right| n \right\rangle \\ &- \frac{i}{\hbar} \theta(t-0) Z_e^{-1} \sum_n e^{-\beta E_n} \left\langle n \left| \left[-\frac{i}{\hbar} [\Psi_i, \mathcal{H}], \Psi_j^\dagger(0) \right]_+ \right| n \right\rangle \\ &= -\frac{i}{\hbar} \delta(t-0) Z_e^{-1} \sum_n e^{-\beta E_n} \left\langle n \left| \left[\Psi_i(t), \Psi_j^\dagger(0) \right]_+ \right| n \right\rangle \\ &- \left(-\frac{i}{\hbar} \right) \frac{i}{\hbar} \theta(t-0) Z_e^{-1} \sum_n e^{-\beta E_n} \left\langle n \left| \left[[\Psi_i, \mathcal{H}], \Psi_j^\dagger(0) \right]_+ \right| n \right\rangle, \end{aligned} \quad (2.8)$$

porém, esta equação pode ser reescrita, reconhecendo a função de Green que compõe o último termo,

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial t} \mathcal{G}_{\Psi_i \Psi_j}^R(t, 0) &= -\frac{i}{\hbar} \delta(t-0) Z_e^{-1} \sum_n e^{-\beta E_n} \left\langle n \left| \left[\Psi_i(t), \Psi_j^\dagger(0) \right]_+ \right| n \right\rangle \\ &\quad - \frac{i}{\hbar} \mathcal{G}_{[\Psi_i, \mathcal{H}] \Psi_j}^R(t, 0).\end{aligned}\tag{2.9}$$

A aplicação da transformada de Fourier se faz necessária para que se tenha a função de Green no domínio da energia e não mais do tempo. A equação da transformada de Fourier para uma dada função de Green retardada pode ser escrita como

$$\tilde{\mathcal{G}}_{\Psi_i \Psi_j}^R(\omega^+) = \int_{-\infty}^{+\infty} dt \mathcal{G}_{\Psi_i \Psi_j}^R(t, 0) e^{\frac{i}{\hbar} \omega^+ t},\tag{2.10}$$

na qual a frequência espectral $\omega^+ \rightarrow (\omega + i\eta^+)$ e $\eta^+ \rightarrow 0^+$. Aplicando a propriedade de integração por partes na Eq. (2.10), obtém-se

$$-\frac{i}{\hbar} \omega^+ \tilde{\mathcal{G}}_{\Psi_i \Psi_j}^R(\omega^+) = \int_{-\infty}^{+\infty} dt \frac{\partial}{\partial t} \mathcal{G}_{\Psi_i \Psi_j}^R(t, 0) e^{\frac{i}{\hbar} \omega^+ t}.\tag{2.11}$$

Substituindo a Eq. (2.9) na relação obtida pela transformada de Fourier, Eq. (2.11), tem-se

$$\begin{aligned}-\frac{i}{\hbar} \omega^+ \tilde{\mathcal{G}}_{\Psi_i \Psi_j}^R(\omega^+) &= \int_{-\infty}^{+\infty} dt \left[-\frac{i}{\hbar} \delta(t-0) Z_e^{-1} \sum_n e^{-\beta E_n} \left\langle n \left| \left[\Psi_i(t), \Psi_j^\dagger(0) \right]_+ \right| n \right\rangle \right. \\ &\quad \left. - \frac{i}{\hbar} \mathcal{G}_{[\Psi_i, \mathcal{H}] \Psi_j}^R(t, 0) \right] e^{\frac{i}{\hbar} \omega^+ t} \\ &= -\frac{i}{\hbar} Z_e^{-1} \sum_n e^{-\beta E_n} \int_{-\infty}^{+\infty} dt \delta(t-0) \left\langle n \left| \left[\Psi_i(t), \Psi_j^\dagger(0) \right]_+ \right| n \right\rangle e^{\frac{i}{\hbar} \omega^+ t} \\ &\quad - \frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} dt \mathcal{G}_{[\Psi_i, \mathcal{H}] \Psi_j}^R(t, 0) e^{\frac{i}{\hbar} \omega^+ t},\end{aligned}\tag{2.12}$$

o primeiro termo da direita pode ser resolvido fazendo-se uso da relação $Z = \text{Tr} \{e^{-\beta \mathcal{H}}\} = \sum_n e^{-\beta E_n}$, bem como da propriedade da delta de Dirac, $\int_{-\infty}^{+\infty} \delta(t-t_0) f(t) dt = f(t_0)$, já o segundo termo da Eq. (2.12) pode ser reconhecido como uma função de Green no domínio da energia. Assim,

$$\begin{aligned}
-\frac{i}{\hbar}\omega^+\tilde{\mathcal{G}}_{\Psi_i\Psi_j}^R(\omega^+) &= -\frac{i}{\hbar}\left(\frac{1}{\sum_n e^{-\beta E_n}}\right)\sum_n e^{-\beta E_n} \left\langle n \left| \left[\Psi_i(0), \Psi_j^\dagger(0) \right]_+ \right| n \right\rangle e^{\frac{i}{\hbar}\omega^+ n} \\
&- \frac{i}{\hbar}\tilde{\mathcal{G}}_{[\Psi_i, \mathcal{H}]\Psi_j}^R(\omega^+) \\
&= -\frac{i}{\hbar}\left\langle \left[\Psi_i(0), \Psi_j^\dagger(0) \right]_+ \right\rangle \langle n | n \rangle \cdot 1 - \frac{i}{\hbar}\tilde{\mathcal{G}}_{[\Psi_i, \mathcal{H}]\Psi_j}^R(\omega^+), \quad (2.13)
\end{aligned}$$

fazendo $\omega^+ = (\omega + i\eta)$ e sabendo que a média $\langle n | n \rangle = 1$, a função de Green resulta em

$$(\omega + i\eta)\tilde{\mathcal{G}}_{\Psi_i\Psi_j}^R(\omega) = \left\langle \left[\Psi_i(0), \Psi_j^\dagger(0) \right]_+ \right\rangle + \tilde{\mathcal{G}}_{[\Psi_i, \mathcal{H}]\Psi_j}^R(\omega). \quad (2.14)$$

Como se pode notar a abordagem da equação de movimento gera uma série de novas funções de Green, como no caso apresentado. Ao se calcular a função $\tilde{\mathcal{G}}_{\Psi_i\Psi_j}^R(\omega)$ uma nova função surge, $\tilde{\mathcal{G}}_{[\Psi_i, \mathcal{H}]\Psi_j}^R(\omega)$, dando origem à necessidade de se aplicar o método novamente. Em alguns casos o número de equações que surgirão a partir de uma única função de Green tende a ser infinito, isso se dá tipicamente quando o Hamiltoniano possui termos de ordem maior que dois (não quadráticos). Para esses casos, a utilização de aproximações se faz necessária a fim de tornar o sistema solúvel, o que deve ser feito cuidadosamente para que nenhuma informação de interesse seja perdida no processo de truncagem das equações. Neste trabalho nenhum cálculo de aproximação foi necessário, porém dentre tais aproximações estão Hubbard I [29], Lacroix [30], entre outras.

No desenvolvimento deste trabalho fez-se uso da representação espectral, uma notação simplificada das funções de Green retardadas no domínio da energia, essa é denominada notação de Zubarev [31]. Nesta linguagem, a Eq. (2.14) pode ser escrita como:

$$\omega^+ \langle \langle \Psi_i; \Psi_j^\dagger \rangle \rangle = \left\langle \left[\Psi_i; \Psi_j^\dagger \right]_+ \right\rangle + \langle \langle [\Psi_i, \mathcal{H}], \Psi_j^\dagger \rangle \rangle, \quad (2.15)$$

no qual $\langle \langle \Psi_i; \Psi_j^\dagger \rangle \rangle = \tilde{\mathcal{G}}_{\Psi_i\Psi_j}^R(\omega)$.

No desenvolvimento da EOM a equação de Heisenberg é elementar para se estudar a evolução temporal dos operadores e, por meio dessa equação, obtém-se a dependência da função de Green com o Hamiltoniano do sistema, isso pode ser

notado nas Eqs. (2.15) e (2.14). Desta forma é correto afirmar que a dinâmica das funções de Green é estabelecida pelo Hamiltoniano do sistema [27].

2.4 Molécula usual

Como forma de apresentar mais detalhadamente a aplicação do formalismo matemático abordado, este tópico será dedicado à análise da interação entre dois átomos por meio de um termo de *hopping*. A aplicação da técnica de EOM desempenha papel indispensável para se obter as densidades de estados do sistema, assim como, para se obter a formação dos estados moleculares ligante e anti-ligante. Vale lembrar que para este problema não se levou em consideração a repulsão coulombiana nos QDs.

O Hamiltoniano para o sistema de dois átomos interagentes pode ser escrito na forma:

$$\mathcal{H}_{mol} = \sum_l \varepsilon_0 d_l^\dagger d_l + t d_1^\dagger d_2 + t^* d_2^\dagger d_1, \quad (2.16)$$

onde l representa os átomos 1 e 2, ε_0 representa a energia do nível dos átomos, que são iguais nessa abordagem, e t e t^* descrevem o *hopping* entre os átomos, como apresentado na Fig. (2.2).

Aplicando a técnica da EOM para o sistema e considerando a notação de Zubarev, pode-se escrever a função de Green para os QDs

$$\omega^+ \langle\langle d_l; d_{l'}^\dagger \rangle\rangle = \langle [d_l, d_{l'}^\dagger]_+ \rangle + \langle\langle [d_l, \mathcal{H}_{mol}]; d_{l'}^\dagger \rangle\rangle, \quad (2.17)$$

o anticomutador obedece a relação de anticomutação fermiônica $[A_{i\sigma}, B_{j\sigma'}]_+ = \delta_{ij}\delta_{\sigma\sigma'}$, assim:

$$\begin{aligned} [d_l, d_{l'}^\dagger]_+ &= d_l d_{l'}^\dagger + d_{l'}^\dagger d_l \\ &= \delta_{ll'}, \end{aligned} \quad (2.18)$$

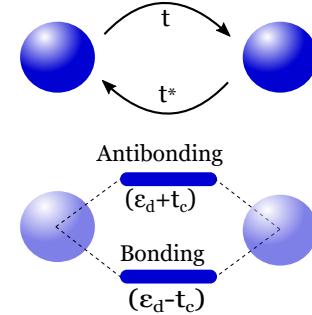


Figura 2.2: Representação de uma molécula formada por dois átomos cuja troca de informação é realizada por um termo de *hopping* $|t|$, seguida pela representação dos orbitais moleculares ligante ($\varepsilon_d - t_c$) e antiligante ($\varepsilon_d + t_c$), oriundos da combinação dos níveis atômicos.

em que $\delta_{ll'}$ é uma delta de Kronecker e pode assumir os valores

$$\delta_{ll'} = \begin{cases} 1, & \text{se } l = l' \\ 0, & \text{se } l \neq l' \end{cases}, \quad (2.19)$$

desta forma, a Eq. (2.17) é reescrita como

$$\omega^+ \langle\langle d_l; d_{l'}^\dagger \rangle\rangle = \delta_{ll'} + \langle\langle [d_l, \mathcal{H}_{mol}] ; d_{l'}^\dagger \rangle\rangle. \quad (2.20)$$

Dando continuidade, o cálculo do comutador no segundo termo da Eq. (2.20) é elementar e descreve a evolução temporal do operador d_l dada pela relação de Heisenberg, Eq. (2.7), assim

$$[d_l, \mathcal{H}_{mol}] = \left[d_l, \sum_{l'} \varepsilon_0 d_{l'}^\dagger d_{l'} \right] + \left[d_l, t d_1^\dagger d_2 \right] + \left[d_l, t^* d_2^\dagger d_1 \right], \quad (2.21)$$

em que

$$\begin{aligned} \left[d_l, \sum_{l'} \varepsilon_0 d_{l'}^\dagger d_{l'} \right] &= \sum_{l'} \varepsilon_0 \left[d_l, d_{l'}^\dagger d_{l'} \right] \\ &= \sum_{l'} \varepsilon_0 \left[d_l d_{l'}^\dagger d_{l'} - d_{l'}^\dagger d_{l'} d_l \right] \\ &= \sum_{l'} \varepsilon_0 \left[(\delta_{ll'} - d_{l'}^\dagger d_l) d_{l'} - d_{l'}^\dagger d_{l'} d_l \right] \\ &= \sum_{l'} \varepsilon_0 \left[d_{l'} \delta_{ll'} - d_{l'}^\dagger d_l d_{l'} - d_{l'}^\dagger d_{l'} d_l \right] \\ &= \sum_{l'} \varepsilon_0 \left[d_{l'} \delta_{ll'} - d_{l'}^\dagger (0 - d_{l'} d_l) - d_{l'}^\dagger d_{l'} d_l \right] \\ &= \sum_{l'} \varepsilon_0 \left[d_{l'} \delta_{ll'} + d_{l'}^\dagger d_l d_{l'} - d_{l'}^\dagger d_{l'} d_l \right] \\ &= \sum_{l'} \varepsilon_0 d_{l'} \delta_{ll'} \\ &= \varepsilon_0 d_l, \end{aligned} \quad (2.22)$$

no qual utilizou-se a propriedade da delta de Kronecker na relação $\sum_{l'} \varepsilon_0 d_{l'} \delta_{ll'} = \varepsilon_0 d_l$ para $l' = l$ e $\sum_{l'} \varepsilon_0 d_{l'} \delta_{ll'} = 0$ para o caso em que $l \neq l'$.

Para os termos de *hopping*, os comutadores são

$$\begin{aligned}
[d_l, t d_1^\dagger d_2] &= t \left(d_l d_1^\dagger d_2 - d_1^\dagger d_2 d_l \right) \\
&= t \left((\delta_{l1} - d_1^\dagger d_l) d_2 - d_1^\dagger d_2 d_l \right) \\
&= t \left(d_2 \delta_{l1} - d_1^\dagger d_l d_2 - d_1^\dagger d_2 d_l \right) \\
&= t \left(d_2 \delta_{l1} + d_1^\dagger d_2 d_l - d_1^\dagger d_2 d_l \right) \\
&= t d_2 \delta_{l1},
\end{aligned} \tag{2.23}$$

e

$$\begin{aligned}
[d_l, t^* d_2^\dagger d_1] &= t^* \left(d_l d_2^\dagger d_1 - d_2^\dagger d_1 d_l \right) \\
&= t^* \left((\delta_{l2} - d_2^\dagger d_l) d_1 - d_2^\dagger d_1 d_l \right) \\
&= t^* \left(d_1 \delta_{l2} - d_2^\dagger d_l d_1 - d_2^\dagger d_1 d_l \right) \\
&= t^* \left(d_1 \delta_{l2} + d_2^\dagger d_1 d_l - d_2^\dagger d_1 d_l \right) \\
&= t^* d_1 \delta_{l2}.
\end{aligned} \tag{2.24}$$

Sendo assim, a função de Green é escrita como

$$\begin{aligned}
\omega^+ \langle\langle d_l; d_{l'}^\dagger \rangle\rangle &= \delta_{ll'} + \varepsilon_0 \langle\langle d_l; d_{l'}^\dagger \rangle\rangle + t \delta_{l1} \langle\langle d_2; d_{l'}^\dagger \rangle\rangle + t^* \delta_{l2} \langle\langle d_1; d_{l'}^\dagger \rangle\rangle \\
(\omega^+ - \varepsilon_0) \langle\langle d_l; d_{l'}^\dagger \rangle\rangle &= \delta_{ll'} + t \delta_{l1} \langle\langle d_2; d_{l'}^\dagger \rangle\rangle + t^* \delta_{l2} \langle\langle d_1; d_{l'}^\dagger \rangle\rangle.
\end{aligned} \tag{2.25}$$

Tendo como base a Eq. (2.25) nota-se que para $l = l' = 1$ e $l = l' = 2$, adquiriu-se duas novas equações

$$(\omega^+ - \varepsilon_0) \langle\langle d_1; d_1^\dagger \rangle\rangle = 1 + t \langle\langle d_2; d_1^\dagger \rangle\rangle \tag{2.26}$$

e

$$(\omega^+ - \varepsilon_0) \langle\langle d_2; d_2^\dagger \rangle\rangle = 1 + t^* \langle\langle d_1; d_2^\dagger \rangle\rangle. \quad (2.27)$$

Já para os casos em que $l = 1$ e $l' = 2$, bem como $l = 2$ e $l' = 1$ obtém-se, respectivamente,

$$(\omega^+ - \varepsilon_0) \langle\langle d_1; d_2^\dagger \rangle\rangle = t \langle\langle d_2; d_2^\dagger \rangle\rangle \quad (2.28)$$

e

$$(\omega^+ - \varepsilon_0) \langle\langle d_2; d_1^\dagger \rangle\rangle = t^* \langle\langle d_1; d_1^\dagger \rangle\rangle. \quad (2.29)$$

Como pode-se notar, as funções de Green cruzadas são escritas em termos das funções diretas, assim como as diretas são dadas em função das cruzadas. Agora que tais equações foram obtidas é possível isolá-las e definí-las por meio de substituições. Considerando $t^* = |t|$ e $t = |t|$, bem como a frequência espectral $\omega^+ = \omega + i\eta$ e substituindo as Eqs. (2.28) e (2.29) nas Eqs. (2.26) e (2.27), obtém-se

$$\langle\langle d_1; d_1^\dagger \rangle\rangle = \frac{1}{\omega - \varepsilon_0 - \frac{|t|^2}{(\omega - \varepsilon_0 + i\eta)} + i\eta} \quad (2.30)$$

e

$$\langle\langle d_2; d_2^\dagger \rangle\rangle = \frac{1}{\omega - \varepsilon_0 - \frac{|t|^2}{(\omega - \varepsilon_0 + i\eta)} + i\eta}, \quad (2.31)$$

e, fazendo agora a substituição das funções de Green diretas, (2.30) e (2.31) nas Eqs. (2.28) e (2.29), determina-se as funções cruzadas

$$\langle\langle d_2; d_1^\dagger \rangle\rangle = \frac{|t|}{(\omega - \varepsilon_0 + i\eta) \left(\omega - \varepsilon_0 - \frac{|t|^2}{(\omega - \varepsilon_0 + i\eta)} + i\eta \right)} \quad (2.32)$$

e

$$\langle\langle d_1; d_2^\dagger \rangle\rangle = \frac{|t|}{(\omega - \varepsilon_0 + i\eta) \left(\omega - \varepsilon_0 - \frac{|t|^2}{(\omega - \varepsilon_0 + i\eta)} + i\eta \right)}. \quad (2.33)$$

É notável que, o termo $\frac{|t|}{(\omega - \varepsilon_0 + i\eta)}$ emerge em todas as funções de Green e possui parte real e imaginária em seu denominador. Tais partes, real e imaginária, são responsáveis pelas modificações das posições e larguras dos picos em função da energia ε_0 , respectivamente. Porém, se tratando do caso atômico a parte imaginária não contribui com um alargamento, como é o caso apresentado na Fig. (2.3) em que é preciso atribuir um valor significativo para η para que se tenha um alargamento dos picos.

As funções podem ser reescritas por meio da soma de frações parciais, onde se pode visualizar as relações que definem os estados moleculares ligante e antiligante, $(\varepsilon_0 - |t|)$ e $(\varepsilon_0 + |t|)$. Desta forma, as funções de Green podem ser escritas de modo que estes estados moleculares sejam explicitados nos seus denominadores. Segundo a Ref. [23], a molécula possui uma configuração energética mais favorável do que a configuração de átomos isolados.

Vale lembrar que, para $|t|$ as funções diretas $\langle\langle d_1; d_1^\dagger \rangle\rangle$ e $\langle\langle d_2; d_2^\dagger \rangle\rangle$ são iguais e as funções cruzadas $\langle\langle d_1; d_2^\dagger \rangle\rangle$ e $\langle\langle d_2; d_1^\dagger \rangle\rangle$ também. Assim, em frações parciais,

$$\langle\langle d_1; d_1^\dagger \rangle\rangle = \frac{1/2}{\omega - (\varepsilon_0 - |t|) + i\eta} + \frac{1/2}{\omega - (\varepsilon_0 + |t|) + i\eta} \quad (2.34)$$

e, as funções de interferência

$$\langle\langle d_1; d_2^\dagger \rangle\rangle = \frac{|t|}{(\omega - \varepsilon_0 + i\eta)} \left[\frac{1/2}{\omega - (\varepsilon_0 - |t|) + i\eta} + \frac{1/2}{\omega - (\varepsilon_0 + |t|) + i\eta} \right]. \quad (2.35)$$

Na Fig. (2.3) está plotada a DOS para cada uma das funções de Green obtidas para o sistema de dois átomos interagentes que, como já apresentado pela Eq. (2.4), é proporcional a parte imaginária da função de Green, $\text{Im} [\langle\langle d_l; d_{l'}^\dagger \rangle\rangle]$. Devido ao *hopping* que ocorre entre os átomos do sistema, a energia local é modificada de ε_0 para $(\varepsilon_0 \pm |t|)$ e pode-se afirmar que os níveis atômicos são desdobrados em dois níveis moleculares.

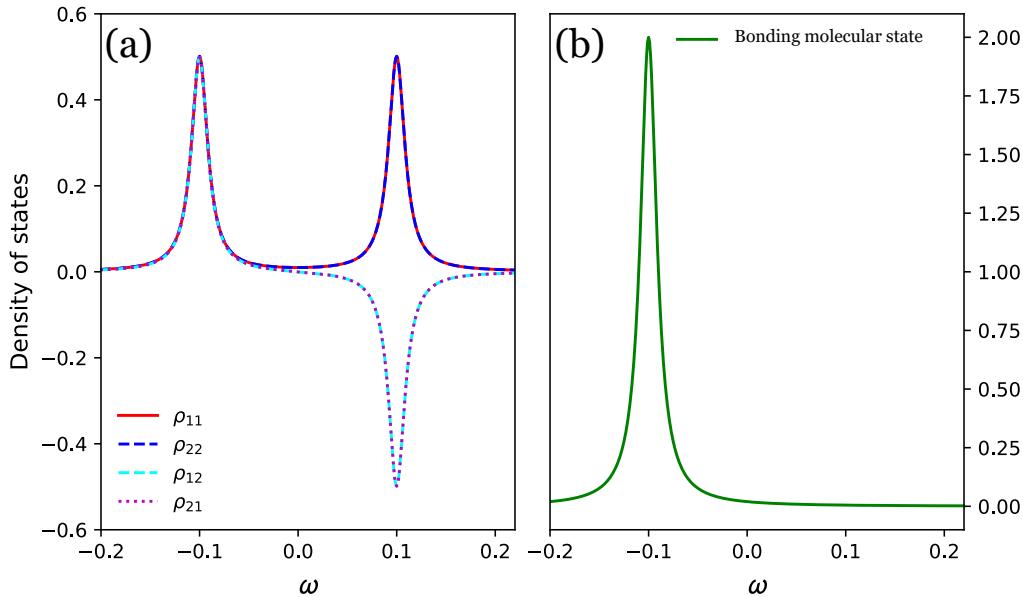


Figura 2.3: Formação molecular para $|t| = 0.1$ e $\varepsilon_0 = 0$. a) Densidades de estados para cada funções de Green definida no sistema de dois átomos interagentes, sendo ρ_{11} e ρ_{22} as densidades para as funções de Green diretas e ρ_{12} e ρ_{21} referentes as funções cruzadas. b) Curva do estado molecular ligante dada pela soma das densidades de estados do sistema. Para este sistema considerou-se $\eta = 0.01$, fator este que agiu no sistema atribuindo largura aos picos.

Como apresentado pela plotagem a) na Fig. 2.3, a interação entre os átomos gera ressonâncias e antirressonâncias nas densidades de estados, sendo as antirressonâncias dadas pelas funções de Green cruzadas e, como pode-se notar em b), a soma destas densidades resulta na aniquilação do segundo pico, o que se deve à antirressonância proveniente da interação entre os átomos. Esta segunda plotagem também descreve o chamado estado molecular ligante. Vale lembrar que, se tratando de um caso atômico, as densidades de estados deveriam ser deltas de Dirac (picos com largura zero e altura infinita), porém não o são devido ao valor atribuído a η ($\eta = 0.01$), que, para efeitos de visualização, é responsável por ocasionar um alargamento dos picos presentes na Fig. 2.3.

As plotagens de densidades presentes na Fig. 2.4 expressam as densidades de estados com relação à frequência espectral ω pela energia dos QDs ε_d . Estas plotagens diferem das apresentadas pela Fig. 2.3, pois o sistema está acoplado a terminais metálicos. Desta forma, não é necessário introduzir um valor finito em η para que se tenha o alargamento dos pico, pois isso acontece naturalmente devido ao sistema estar acoplado ao contínuo de energias que introduz

um termo Γ_N , conhecido como parâmetro de Anderson.

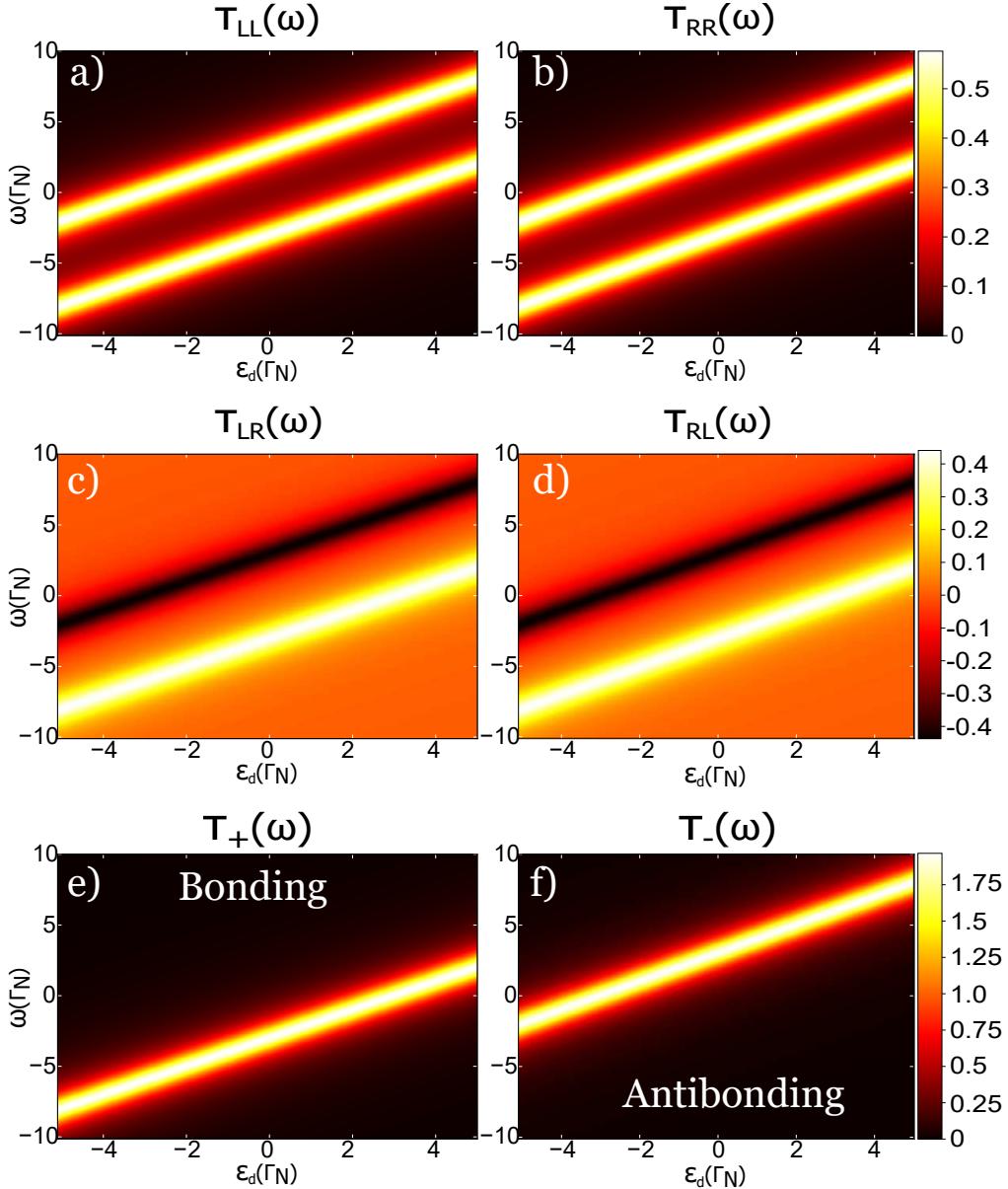


Figura 2.4: Densidades de estados para a formação molecular com *hopping* $t = 3.0\Gamma_N$, as grandezas físicas do sistema foram estimadas em unidades do parâmetro de Anderson Γ_N . Os painéis (a) e (b) representam as densidades de estados obtidas nos QDs da esquerda e direita; (c) e (d) apresentam os termos de interferência entre os QDs e expressam as antirressonâncias presentes no sistema que são fundamentais para caracterizar, por sua vez, os estados moleculares ligante e antiligante, painel (e) e (f), respectivamente.

A Fig. 2.4 possui basicamente informações idênticas àquelas apresentadas na Fig. 2.3 a menos das amplitudes dos valores. É possível reconhecer os

mesmos picos apresentados pela Fig. 2.3 na Fig. 2.4, onde se tem os mesmos dois picos nos painéis (a) e (b), que se referem as densidades dos QDs da esquerda (τ_{LL}) e direita (τ_{RR}), assim como os termos relativos a interferência entre os QDs, dados, no painel (a) da Fig. 2.3, pelos termos ρ_{12} e ρ_{21} e na Fig. 2.4 pelos painéis (c) e (d), em que as antirressonâncias são representadas por regiões escuras. No que diz respeito aos plots dos estados moleculares, ligante e anti-ligante, ambos são representados pelos painéis (e) e (f) da Fig. 2.4, τ_+ e τ_- , em que o estado molecular ligante é dado por $\tau_+ = \tau_{LL} + \tau_{RR} + (\tau_{LR} + \tau_{RL})$ e o estado molecular anti-ligante pode ser descrito como $\tau_- = \tau_{LL} + \tau_{RR} - (\tau_{LR} + \tau_{RL})$.

Capítulo 3

Modelo teórico

O sistema teórico proposto, muito semelhante ao apresentado pela Fig. 1.3, é composto por um nanofio semicondutor com forte acoplamento SO no qual se tem a criação da supercondutividade *p-wave* em determinada região. Porém, diferentemente da Fig. 1.3, dois QDs podem ser acoplados ao modelo. Como pode-se notar na Fig. 3.1, nas regiões remanescentes do fio, que não foram recobertas por material supercondutor, são formados os QDs, pelos quais a análise da DOS será realizada, e estes estão acoplados a terminais metálicos normais.

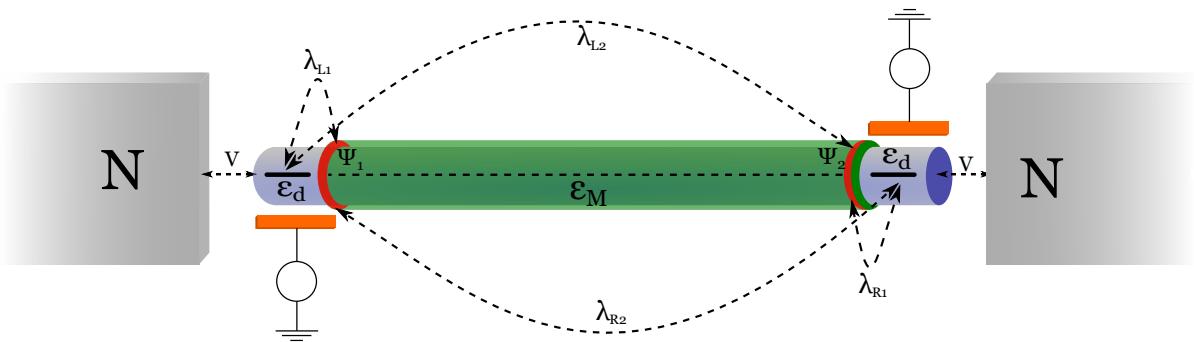


Figura 3.1: Esquema do modelo teórico proposto composto por um nanofio semicondutor (cilindro em azul) com seção recoberta pelo crescimento de supercondutor *s-wave* (região verde) que, quando submetido a um campo magnético específico, da origem a supercondutividade *p-wave* no nanofio. QDs (ε_d) nas bordas do nanofio semicondutor hibridizados por um fator V a terminais metálicos normais (N) e a representação dos fôrmions de Majorana nas bordas do nanofio semicondutor/supercondutor quando na fase topológica (regiões em vermelho, Ψ_1 e Ψ_2).

3.1 Hamiltoniano

O Hamiltoniano do sistema apresentado na Fig. 3.1 é caracterizado por

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_{host} + \mathcal{H}_{QD} + \mathcal{H}_{hop} + \mathcal{H}_{hib} + \mathcal{H}_{MFS}, \quad (3.1)$$

em que se tem

$$\mathcal{H}_{host} = \sum_{\alpha k} \tilde{\varepsilon}_{\alpha k} c_{\alpha k}^\dagger c_{\alpha k}, \quad (3.2)$$

sendo o Hamiltoniano que descreve os elétrons de condução no hospedeiro metálico, análogo ao apresentado pela Eq.(2.2). O termo $\alpha = L, R$ define o terminal da esquerda (L) e direita (R), $\tilde{\varepsilon}_{\alpha k} = \varepsilon_k - \mu_\alpha$ descreve a energia dos elétrons nos terminais, como função da energia ε_k dos elétrons com número de onda k e do potencial químico dos terminais μ_α . Os operadores $c_{\alpha k}^\dagger$ ($c_{\alpha k}$) representam a criação (aniquilação) de elétrons com número de onda k no terminal da esquerda ou direita.

O Hamiltoniano que caracteriza o QD

$$\mathcal{H}_{QD} = \sum_{\alpha} \varepsilon_{\alpha} d_{\alpha}^\dagger d_{\alpha} + U n_L n_R, \quad (3.3)$$

descreve a interação entre os elétrons na impureza (QD) com energia ε_α , já os termos d_α^\dagger (d_α) referem-se à criação (aniquilação) de elétrons na impureza da esquerda e direita ($\alpha = L, R$). O segundo termo à direita relaciona-se à repulsão coulombiana entre os estados das impurezas, e $U n_L n_R = U (d_L^\dagger d_L d_R^\dagger d_R)$.

Em um sistema de dois QDs há a possibilidade de que ambos interajam por meio da troca de elétrons, essa interação é demarcada por um termo *hopping*

$$\mathcal{H}_{hop} = t_c (d_L^\dagger d_R + \text{H.c.}), \quad (3.4)$$

no qual t_c descreve o *hopping* entre as impurezas, ou seja, a amplitude com a qual as duas se acoplam, e os termos $(d_L^\dagger d_R + \text{H.c.})$ representam a criação de um elétron no nível da impureza da esquerda (L) e destruição dessa partícula na

impureza da direita (R); H.c. é o Hermitiano conjugado e representa justamente o processo contrário $H.c. = d_R^\dagger d_L$.

Como já descrito e apresentado pela Fig. 3.1, no modelo se tem duas impurezas, os QDs, que se acoplam aos terminais metálicos com um fator de hibridização V , em consonância com o modelo de Anderson (Fig. 2.1), e o Hamiltoniano

$$\mathcal{H}_{hib} = V \sum_{\alpha k} \left(c_{\alpha k}^\dagger d_\alpha + H.c. \right), \quad (3.5)$$

relaciona a troca de elétrons entre o hospedeiro metálico e o QD, de modo que o termo $c_{\alpha k}^\dagger (d_\alpha)$ representa, respectivamente, a criação de um elétron em um dos terminais metálicos e a destruição de um elétron no nível de uma das impurezas; o H.c. representa o processo contrário ($d_\alpha^\dagger c_{\alpha k}$).

O último Hamiltoniano que compõe a Eq. (3.1), \mathcal{H}_{MFs} , diz respeito ao Hamiltoniano que descreve os férmiões de Majorana e seus respectivos acoplamentos. Como pode-se notar, esse Hamiltoniano

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{MFs} = & i\varepsilon_M \Psi_1 \Psi_2 + \lambda_{L1} \left(d_L - d_L^\dagger \right) \Psi_1 + \lambda_{R2} \left(d_R - d_R^\dagger \right) \Psi_1 \\ & + i\lambda_{R1} \left(d_R + d_R^\dagger \right) \Psi_2 + i\lambda_{L2} \left(d_L + d_L^\dagger \right) \Psi_2 \end{aligned} \quad (3.6)$$

descreve os dois férmiões de Majorana, Ψ_1 e Ψ_2 , presentes no fio quando na fase topológica; o termo $\varepsilon_M \sim e^{-l/\xi}$, em que l é a distância entre os Majoranas (comprimento do nanofio) e ξ é o comprimento de coerência do supercondutor, de modo geral ε_M descreve basicamente a superposição dos férmiões de Majorana; os termos $\lambda_{R1}, \lambda_{R2}, \lambda_{L1}$ e λ_{L2} representam os acoplamentos entre os QDs e os férmiões de Majorana, vale ressaltar que os fatores 1 e 2 como índices dos acoplamentos referem-se aos primeiros e segundos vizinhos relativos a cada QD.

3.2 Transformação para a base molecular

O modelo de uma impureza de Anderson, como apresentado na seção 2.1, pode ser estendido para um modelo com duas impurezas, sistema este que basicamente descreve o modelo aqui proposto se diferindo no fato de haver, também, um nanofio híbrido acoplado ao sistema. Para abordar o modelo proposto,

optou-se por uma transformada em que os níveis do sistema fossem alterados para estados moleculares ligante e antiligante, análogo ao realizado pela Ref. [32], em que os autores abordam um sistema de dois QDs acoplados formando uma molécula artificial. Esta escolha se baseia no fato de que os dois QDs trocam informações entre si, configurando os processos de troca ou compartilhamento eletrônico realizados por átomos interagindo na formação molecular. Em função disso a mudança para a base molecular se mostra como uma ferramenta interessante para se estudar o comportamento do sistema.

Para a realização da mudança de base do Hamiltoniano do sistema, Eq. (3.1), para um Hamiltoniano escrito em termos dos estados moleculares, consideremos as definições:

$$d_L = (\cos \theta) d_{\uparrow} - (\sin \theta) d_{\downarrow}, \quad (3.7)$$

$$d_L^\dagger = (\cos \theta) d_{\uparrow}^\dagger - (\sin \theta) d_{\downarrow}^\dagger, \quad (3.8)$$

$$d_R = (\sin \theta) d_{\uparrow} + (\cos \theta) d_{\downarrow}, \quad (3.9)$$

$$d_R^\dagger = (\sin \theta) d_{\uparrow}^\dagger + (\cos \theta) d_{\downarrow}^\dagger, \quad (3.10)$$

$$c_{Lk} = (\cos \theta) c_{\uparrow k} - (\sin \theta) c_{\downarrow k}, \quad (3.11)$$

$$c_{Rk} = (\sin \theta) c_{\uparrow k} + (\cos \theta) c_{\downarrow k}. \quad (3.12)$$

Aqui vale a ressalva de que os operadores escritos em função de \uparrow devem ser lidos como sendo escritos em função do estado molecular ligante e os escritos em termos de \downarrow do estado molecular antiligante ($\uparrow \rightarrow$ ligante e $\downarrow \rightarrow$ antiligante), ou simplesmente como os pseudo-spins (\uparrow, \downarrow) do sistema. Estes termos serão importantes para se reescrever o Hamiltoniano na base de estados moleculares [32].

Desta forma, reescrevendo termo a termo a Eq. (3.1), a menos do Hamiltoniano Majorana que será abordado mais adiante, os Hamiltonianos \mathcal{H}_{host} , \mathcal{H}_{QD} , \mathcal{H}_{hop} e \mathcal{H}_{hib} , tornam-se

$$\begin{aligned}
\mathcal{H}_{host} &= \sum_{\mathbf{k}} \tilde{\varepsilon}_{L\mathbf{k}} c_{L\mathbf{k}}^\dagger c_{L\mathbf{k}} + \sum_{\mathbf{k}} \tilde{\varepsilon}_{R\mathbf{k}} c_{R\mathbf{k}}^\dagger c_{R\mathbf{k}} \\
&= \sum_{\mathbf{k}} \left\{ [\tilde{\varepsilon}_{L\mathbf{k}} (\cos^2 \theta) + \tilde{\varepsilon}_{R\mathbf{k}} (\sin^2 \theta)] c_{\uparrow\mathbf{k}} c_{\uparrow\mathbf{k}} + [\tilde{\varepsilon}_{L\mathbf{k}} (\sin^2 \theta) + \tilde{\varepsilon}_{R\mathbf{k}} (\cos^2 \theta)] c_{\downarrow\mathbf{k}} c_{\downarrow\mathbf{k}} \right. \\
&\quad \left. + (\tilde{\varepsilon}_{R\mathbf{k}} - \tilde{\varepsilon}_{L\mathbf{k}}) (\cos \theta) (\sin \theta) c_{\uparrow\mathbf{k}} c_{\downarrow\mathbf{k}} + (\tilde{\varepsilon}_{R\mathbf{k}} - \tilde{\varepsilon}_{L\mathbf{k}}) (\sin \theta) (\cos \theta) c_{\downarrow\mathbf{k}} c_{\uparrow\mathbf{k}} \right\}, \quad (3.13)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\mathcal{H}_{QD} &= \varepsilon_L d_L^\dagger d_L + \varepsilon_R d_R^\dagger d_R + U n_L n_R \\
&= [\varepsilon_L (\cos^2 \theta) + \varepsilon_R (\sin^2 \theta)] d_\uparrow^\dagger d_\uparrow + [\varepsilon_L (\sin^2 \theta) + \varepsilon_R (\cos^2 \theta)] d_\downarrow^\dagger d_\downarrow \\
&\quad + (\varepsilon_R - \varepsilon_L) (\cos \theta) (\sin \theta) d_\uparrow^\dagger d_\downarrow + (\varepsilon_R - \varepsilon_L) (\cos \theta) (\sin \theta) d_\downarrow^\dagger d_\uparrow \\
&\quad + U n_L n_R, \quad (3.14)
\end{aligned}$$

sendo o termo de Coulomb:

$$\begin{aligned}
U n_L n_R &= U d_L^\dagger d_L (d_R^\dagger d_R) \\
&= U \left[(\cos^4 \theta) d_\uparrow^\dagger d_\uparrow d_\downarrow^\dagger d_\downarrow + (\cos^2 \theta) (\sin^2 \theta) d_\uparrow^\dagger d_\uparrow d_\uparrow^\dagger d_\uparrow + (\sin \theta) (\cos^3 \theta) d_\uparrow^\dagger d_\uparrow d_\uparrow^\dagger d_\downarrow \right. \\
&\quad + (\cos^3 \theta) (\sin \theta) d_\uparrow^\dagger d_\uparrow d_\downarrow^\dagger d_\uparrow + (\sin^4 \theta) d_\downarrow^\dagger d_\downarrow d_\uparrow^\dagger d_\uparrow + (\sin^2 \theta) (\cos^2 \theta) d_\downarrow^\dagger d_\downarrow d_\downarrow^\dagger d_\downarrow \\
&\quad + (\sin^3 \theta) (\cos \theta) d_\downarrow^\dagger d_\downarrow d_\uparrow^\dagger d_\downarrow + (\cos \theta) (\sin^3 \theta) d_\downarrow^\dagger d_\downarrow d_\downarrow^\dagger d_\uparrow - (\cos \theta) (\sin^3 \theta) d_\uparrow^\dagger d_\downarrow d_\uparrow^\dagger d_\uparrow \\
&\quad - (\cos^3 \theta) (\sin \theta) d_\uparrow^\dagger d_\downarrow d_\downarrow^\dagger d_\downarrow - (\cos^2 \theta) (\sin^2 \theta) d_\uparrow^\dagger d_\downarrow d_\uparrow^\dagger d_\downarrow - (\sin^2 \theta) (\cos^2 \theta) d_\uparrow^\dagger d_\downarrow d_\downarrow^\dagger d_\uparrow \\
&\quad - (\sin^3 \theta) (\cos \theta) d_\downarrow^\dagger d_\uparrow d_\uparrow^\dagger d_\uparrow - (\sin \theta) (\cos^3 \theta) d_\downarrow^\dagger d_\uparrow d_\downarrow^\dagger d_\downarrow - (\sin^2 \theta) (\cos^2 \theta) d_\downarrow^\dagger d_\uparrow d_\uparrow^\dagger d_\downarrow \\
&\quad \left. - (\sin^2 \theta) (\cos^2 \theta) d_\downarrow^\dagger d_\uparrow d_\downarrow^\dagger d_\uparrow \right]. \quad (3.15)
\end{aligned}$$

Para o termo de *hopping*:

$$\begin{aligned}
\mathcal{H}_{hop} &= t_c (d_L^\dagger d_R + d_R^\dagger d_L) \\
&= t_c \left\{ [(\cos^2 \theta) - (\sin^2 \theta)] d_\uparrow^\dagger d_\downarrow + [(\cos^2 \theta) - (\sin^2 \theta)] d_\downarrow^\dagger d_\uparrow \right. \\
&\quad \left. + 2 (\cos \theta) (\sin \theta) d_\uparrow^\dagger d_\uparrow - 2 (\cos \theta) (\sin \theta) d_\downarrow^\dagger d_\downarrow \right\} \quad (3.16)
\end{aligned}$$

e, o termo de hibridização

$$\begin{aligned}
\mathcal{H}_{hub} &= V \sum_{\mathbf{k}} \left(c_{L\mathbf{k}}^\dagger d_L + d_L^\dagger c_{L\mathbf{k}} \right) + V \sum_{\mathbf{k}} \left(c_{R\mathbf{k}}^\dagger d_R + d_R^\dagger c_{R\mathbf{k}} \right) \\
&= V \sum_{\mathbf{k}} \left(c_{\uparrow\mathbf{k}}^\dagger d_\uparrow + d_\uparrow^\dagger c_{\uparrow\mathbf{k}} + c_{\downarrow\mathbf{k}}^\dagger d_\downarrow + d_\downarrow^\dagger c_{\downarrow\mathbf{k}} \right) \\
&= V \sum_{\mathbf{k}\sigma} \left(c_{\sigma\mathbf{k}}^\dagger d_\sigma + d_\sigma^\dagger c_{\sigma\mathbf{k}} \right).
\end{aligned} \tag{3.17}$$

Nota-se que praticamente todos os Hamiltonianos (\mathcal{H}_{host} , \mathcal{H}_{QD} , \mathcal{H}_{hop}) são compostos por funções trigonométricas. Assim sendo, com o intuito de dar continuidade ao cálculo e simplificá-lo é necessário fazer algumas considerações [32]. Seja $\varepsilon_{R\mathbf{k}} = \varepsilon_{L\mathbf{k}} = \epsilon$ e o *detuning* $\Delta\epsilon = \varepsilon_L - \varepsilon_R$, bem como as relações

$$\tan(2\theta) = \frac{2t_c}{\Delta\epsilon}, \tag{3.18}$$

$$\sin(2\theta) = -\frac{2t_c}{\sqrt{4(t_c)^2 + (\Delta\epsilon)^2}} = 2 \sin(\theta) \cos(\theta) \tag{3.19}$$

e

$$\cos(2\theta) = -\frac{\Delta\epsilon}{\sqrt{4(t_c)^2 + (\Delta\epsilon)^2}} = \cos^2(\theta) - \sin^2(\theta). \tag{3.20}$$

Aplicando as relações (3.19) e (3.20) nas equações obtidas para o Hamiltoniano de Anderson, a Eq.(3.13) torna-se

$$\begin{aligned}
\mathcal{H}_{host} &= \sum_{\mathbf{k}} \tilde{\varepsilon}_{L\mathbf{k}} c_{L\mathbf{k}}^\dagger c_{L\mathbf{k}} + \sum_{\mathbf{k}} \tilde{\varepsilon}_{R\mathbf{k}} c_{R\mathbf{k}}^\dagger c_{R\mathbf{k}} \\
&= \sum_{\mathbf{k}} \left[\epsilon c_{\uparrow\mathbf{k}}^\dagger c_{\uparrow\mathbf{k}} + \epsilon c_{\downarrow\mathbf{k}}^\dagger c_{\downarrow\mathbf{k}} \right] \\
&= \sum_{\mathbf{k}\sigma} \epsilon c_{\sigma\mathbf{k}}^\dagger c_{\sigma\mathbf{k}}.
\end{aligned} \tag{3.21}$$

O termo do QD, \mathcal{H}_{QD} , pode ser abordado juntamente com o termo de hopping, dessa forma

$$\begin{aligned}\mathcal{H}_{QD} + \mathcal{H}_{hop} &= \varepsilon_L d_L^\dagger d_L + \varepsilon_R d_R^\dagger d_R + t_c (d_L^\dagger d_R + d_R^\dagger d_L) + U n_L n_R \\ &= \sum_{\sigma} \left[\frac{(\varepsilon_R + \varepsilon_L)}{2} - \frac{\sigma}{2} \sqrt{4(t_c)^2 + (\Delta\epsilon)^2} \right] d_{\sigma}^\dagger d_{\sigma} + U n_L n_R,\end{aligned}\quad (3.22)$$

e, o termo de interação coulombiana torna-se:

$$U n_L n_R = U (d_{\uparrow}^\dagger d_{\uparrow} d_{\downarrow}^\dagger d_{\downarrow}), \quad (3.23)$$

logo a Eq. (3.22) assume a forma

$$\mathcal{H}_{QD} + \mathcal{H}_{hop} = \sum_{\sigma} \left[\frac{(\varepsilon_R + \varepsilon_L)}{2} - \frac{\sigma}{2} \sqrt{4(t_c)^2 + (\Delta\epsilon)^2} \right] d_{\sigma}^\dagger d_{\sigma} + U (d_{\uparrow}^\dagger d_{\uparrow} d_{\downarrow}^\dagger d_{\downarrow}), \quad (3.24)$$

onde é válido interpretar

$$\epsilon_{d,\sigma} = \left[\frac{(\varepsilon_R + \varepsilon_L)}{2} - \frac{\sigma}{2} \sqrt{4(t_c)^2 + (\Delta\epsilon)^2} \right] \quad (3.25)$$

como sendo a energia que descreve os níveis do QD no mapeamento realizado. Uma análise inicial interessante seria considerar $U = 0$ e os QDs iguais, ou seja, uma situação em que $\varepsilon_R = \varepsilon_L = \varepsilon_d$, e reescrever o Hamiltoniano dos QDs de modo a evidenciar os estados moleculares, dessa forma pode-se obter, a partir da Eq. (3.24), que

$$\begin{aligned}\mathcal{H}_{QD} + \mathcal{H}_{hop} &= \sum_{\sigma} [\varepsilon_d - \sigma t_c] d_{\sigma}^\dagger d_{\sigma} \\ &= (\varepsilon_d - t_c) d_{\uparrow}^\dagger d_{\uparrow} + (\varepsilon_d + t_c) d_{\downarrow}^\dagger d_{\downarrow},\end{aligned}\quad (3.26)$$

sendo assim, o sistema composto apenas pelos dois QDs pode ser nitidamente lido em função dos dois estados moleculares, ligante ($\varepsilon_d - t_c$) e antiligante ($\varepsilon_d + t_c$).

Retomando a reescrita do Hamiltoniano, agora que já se tem os termos escritos na base de estados moleculares, o Hamiltoniano de Anderson para o sistema teórico proposto assume a forma

$$\mathcal{H}_{AM} = \sum_{k\sigma} \epsilon c_{\sigma k}^\dagger c_{\sigma k} + \sum_{\sigma} \epsilon_{d,\sigma} d_\sigma^\dagger d_\sigma + U \left(d_\uparrow^\dagger d_\uparrow d_\downarrow^\dagger d_\downarrow \right) + V \sum_{k\sigma} \left(c_{\sigma k}^\dagger d_\sigma + d_\sigma^\dagger c_{\sigma k} \right). \quad (3.27)$$

O \mathcal{H}_{AM} descreve o sistema composto pelos terminais metálicos e os dois QDs, um modelo de Anderson de duas impurezas, porém para que se tenha o sistema como um todo na nova base, a transformada precisa ser realizada também para o Hamiltoniano dos majoranas. Com este propósito, o próximo tópico será dedicado à abordagem do sistema referente aos férmons de Majorana e suas interações.

3.3 Transformação para o Hamiltoniano Majorana

Como apresentado pelo Hamiltoniano Majorana, Eq. (3.6), e pela Fig. 3.1, os férnios de Majorana presentes nas bordas do nanofio na fase topológica se acoplam a ambos os QDs. Dessa forma é necessário aplicar a transformação unitária que leva o sistema para uma base molecular, como realizado no modelo de Anderson na seção 3.2.

O Hamiltoniano Majorana, como já apresentado, é

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{MFs} = & i\varepsilon_M \Psi_1 \Psi_2 + \lambda_{L1} \left(d_L - d_L^\dagger \right) \Psi_1 + \lambda_{R2} \left(d_R - d_R^\dagger \right) \Psi_1 \\ & + i\lambda_{R1} \left(d_R + d_R^\dagger \right) \Psi_2 + i\lambda_{L2} \left(d_L + d_L^\dagger \right) \Psi_2. \end{aligned} \quad (3.28)$$

Antes de substituir os operadores d_L e d_R é necessário escrever os operadores Majorana Ψ_1 e Ψ_2 em termos de um férnion usual não local f . Para tal, considera-se os operadores

$$\Psi_1 = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(f_\uparrow^\dagger + f_\uparrow \right) \quad (3.29)$$

e

$$\Psi_2 = i \frac{1}{\sqrt{2}} \left(f_\uparrow^\dagger - f_\uparrow \right), \quad (3.30)$$

em que $f_\uparrow \neq f_\uparrow^\dagger$ e $[f_\uparrow, f_\uparrow^\dagger]_+ = 1$.

Reescrevendo os operadores Majorana na notação de férmons usuais, o primeiro termo da direita da Eq. (3.28) assume a configuração

$$i\varepsilon_M \Psi_1 \Psi_2 = \varepsilon_M \left(f_\uparrow^\dagger f_\uparrow - \frac{1}{2} \right), \quad (3.31)$$

em que se tem o análogo a um QD, porém supercondutor e que descreve a formação de um férnion usual não local, sendo agora ε_M um fator que representa a energia do nível desse novo QD.

Os dois termos que descrevem o acoplamento dos QDs, L e R , com o férnion de Majorana Ψ_1 são reescritos na notação de férmons usuais, bem como na base de estados moleculares pela substituição dos operadores d_L e d_R .

$$\begin{aligned} \lambda_{L1} (d_L - d_L^\dagger) \Psi_1 + \lambda_{R2} (d_R - d_R^\dagger) \Psi_1 &= \left[\frac{\lambda_{R2}}{\sqrt{2}} (\sin \theta) + \frac{\lambda_{L1}}{\sqrt{2}} (\cos \theta) \right] [d_\uparrow f_\uparrow^\dagger - d_\uparrow^\dagger f_\uparrow] \\ &+ \left[\frac{\lambda_{R2}}{\sqrt{2}} (\sin \theta) + \frac{\lambda_{L1}}{\sqrt{2}} (\cos \theta) \right] [d_\uparrow f_\uparrow - d_\uparrow^\dagger f_\uparrow^\dagger] \\ &+ \left[\frac{\lambda_{R2}}{\sqrt{2}} (\cos \theta) - \frac{\lambda_{L1}}{\sqrt{2}} (\sin \theta) \right] [d_\downarrow f_\uparrow^\dagger - d_\downarrow^\dagger f_\uparrow] \\ &+ \left[\frac{\lambda_{R2}}{\sqrt{2}} (\cos \theta) - \frac{\lambda_{L1}}{\sqrt{2}} (\sin \theta) \right] [d_\downarrow f_\uparrow - d_\downarrow^\dagger f_\uparrow^\dagger]. \end{aligned} \quad (3.32)$$

Fazendo-se o mesmo para os acoplamento com o operador Ψ_2 , obtém-se

$$\begin{aligned} i\lambda_{R1} (d_R + d_R^\dagger) \Psi_2 + i\lambda_{L2} (d_L + d_L^\dagger) \Psi_2 &= - \left[\frac{\lambda_{R1}}{\sqrt{2}} (\sin \theta) + \frac{\lambda_{L2}}{\sqrt{2}} (\cos \theta) \right] [d_\uparrow f_\uparrow^\dagger - d_\uparrow^\dagger f_\uparrow] \\ &+ \left[\frac{\lambda_{R1}}{\sqrt{2}} (\sin \theta) + \frac{\lambda_{L2}}{\sqrt{2}} (\cos \theta) \right] [d_\uparrow f_\uparrow - d_\uparrow^\dagger f_\uparrow^\dagger] \\ &+ \left[\frac{\lambda_{L2}}{\sqrt{2}} (\sin \theta) - \frac{\lambda_{R1}}{\sqrt{2}} (\cos \theta) \right] [d_\downarrow f_\uparrow^\dagger - d_\downarrow^\dagger f_\uparrow] \\ &+ \left[-\frac{\lambda_{L2}}{\sqrt{2}} (\sin \theta) + \frac{\lambda_{R1}}{\sqrt{2}} (\cos \theta) \right] [d_\downarrow f_\uparrow - d_\downarrow^\dagger f_\uparrow^\dagger]. \end{aligned} \quad (3.33)$$

Com o intuito de facilitar os cálculos, pode-se realizar as simplificações

$$\lambda_{\uparrow 1} = \left[\frac{\lambda_{R2}}{\sqrt{2}} (\sin \theta) + \frac{\lambda_{L1}}{\sqrt{2}} (\cos \theta) \right], \quad (3.34)$$

$$\lambda_{\downarrow 1} = \left[\frac{\lambda_{R2}}{\sqrt{2}} (\cos \theta) - \frac{\lambda_{L1}}{\sqrt{2}} (\sin \theta) \right], \quad (3.35)$$

$$\lambda_{\uparrow 2} = \left[\frac{\lambda_{R1}}{\sqrt{2}} (\sin \theta) + \frac{\lambda_{L2}}{\sqrt{2}} (\cos \theta) \right], \quad (3.36)$$

$$\lambda_{\downarrow 2} = \left[\frac{\lambda_{R1}}{\sqrt{2}} (\cos \theta) - \frac{\lambda_{L2}}{\sqrt{2}} (\sin \theta) \right], \quad (3.37)$$

desta forma o Hamiltoniano para o sistema Majorana torna-se:

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{Mfs} &= \varepsilon_M \left(f_{\uparrow}^{\dagger} f_{\uparrow} - \frac{1}{2} \right) \\ &+ \lambda_{\uparrow 1} \left[(d_{\uparrow} f_{\uparrow}^{\dagger} - d_{\uparrow}^{\dagger} f_{\uparrow}) + (d_{\uparrow} f_{\uparrow} - d_{\uparrow}^{\dagger} f_{\uparrow}^{\dagger}) \right] \\ &+ \lambda_{\downarrow 1} \left[(d_{\downarrow} f_{\uparrow}^{\dagger} - d_{\downarrow}^{\dagger} f_{\uparrow}) + (d_{\downarrow} f_{\uparrow} - d_{\downarrow}^{\dagger} f_{\uparrow}^{\dagger}) \right] \\ &+ \lambda_{\uparrow 2} \left[(d_{\uparrow} f_{\uparrow} - d_{\uparrow}^{\dagger} f_{\uparrow}^{\dagger}) - (d_{\uparrow} f_{\uparrow}^{\dagger} - d_{\uparrow}^{\dagger} f_{\uparrow}) \right] \\ &+ \lambda_{\downarrow 2} \left[(d_{\downarrow} f_{\uparrow} - d_{\downarrow}^{\dagger} f_{\uparrow}^{\dagger}) - (d_{\downarrow} f_{\uparrow}^{\dagger} - d_{\downarrow}^{\dagger} f_{\uparrow}) \right]. \end{aligned} \quad (3.38)$$

Considerando $\sigma = \uparrow, \downarrow$, tem-se

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{Mfs} &= \varepsilon_M \left(f_{\uparrow}^{\dagger} f_{\uparrow} - \frac{1}{2} \right) + \sum_{\sigma} \lambda_{\sigma 1} \left[(d_{\sigma} f_{\uparrow}^{\dagger} + f_{\uparrow} d_{\sigma}^{\dagger}) + (d_{\sigma} f_{\uparrow} + f_{\uparrow}^{\dagger} d_{\sigma}) \right] \\ &+ \sum_{\sigma} \lambda_{\sigma 2} \left[(d_{\sigma} f_{\uparrow} + f_{\uparrow}^{\dagger} d_{\sigma}^{\dagger}) - (d_{\sigma} f_{\uparrow}^{\dagger} + f_{\uparrow} d_{\sigma}) \right] \end{aligned} \quad (3.39)$$

ou

$$\begin{aligned}\mathcal{H}_{MFs} &= \varepsilon_M \left(f_{\uparrow}^{\dagger} f_{\uparrow} - \frac{1}{2} \right) \\ &+ \sum_{\sigma} \left[(\lambda_{\sigma 1} - \lambda_{\sigma 2}) \left(d_{\sigma} f_{\uparrow}^{\dagger} + f_{\uparrow} d_{\sigma}^{\dagger} \right) + (\lambda_{\sigma 1} + \lambda_{\sigma 2}) \left(d_{\sigma} f_{\uparrow} + f_{\uparrow}^{\dagger} d_{\sigma}^{\dagger} \right) \right].\end{aligned}\quad (3.40)$$

Por meio da Eq. (3.40) pode-se reconhecer $(\lambda_{\sigma 1} - \lambda_{\sigma 2})$ como o termo de *hopping* t_{σ} e os acoplamentos $(\lambda_{\sigma 1} + \lambda_{\sigma 2})$ podem ser reconhecidos como a energia de emparelhamento supercondutor, Δ_{σ} . Sendo assim, o Hamiltoniano 3.40 se modifica para

$$\mathcal{H}_{MFs} = \varepsilon_M \left(f_{\uparrow}^{\dagger} f_{\uparrow} - \frac{1}{2} \right) + \sum_{\sigma} \left[t_{\sigma} \left(d_{\sigma} f_{\uparrow}^{\dagger} + f_{\uparrow} d_{\sigma}^{\dagger} \right) + \Delta_{\sigma} \left(d_{\sigma} f_{\uparrow} + f_{\uparrow}^{\dagger} d_{\sigma}^{\dagger} \right) \right].\quad (3.41)$$

Os termos t_{σ} e Δ_{σ} podem ser melhor entendidos analisando os fatores que os sucedem, como $(d_{\sigma} f_{\uparrow}^{\dagger} + f_{\uparrow} d_{\sigma}^{\dagger})$ que descreve uma troca de partículas entre o QD e o sítio de nível f descrito pela combinação dos MBSs, de modo que se tem a destruição de uma partícula no nível d do QD seguida por sua criação no nível f ($d_{\sigma} f_{\uparrow}^{\dagger}$), o processo contrário também ocorre ($f_{\uparrow} d_{\sigma}^{\dagger}$), é justamente esse processo que tem o *hopping* descrevendo sua amplitude. Para o caso em que se tem a energia de emparelhamento supercondutor (Δ_{σ}), nota-se que o termo $(d_{\sigma} f_{\uparrow} + f_{\uparrow}^{\dagger} d_{\sigma}^{\dagger})$ descreve a formação de um par de Cooper delocalizado, ou seja, um elétron (ou buraco) está presente na impureza e o outro no nível f .

Tendo os termos do Hamiltoniano (3.1) na nova base, Eq. (3.27) e (3.41), pode-se escrever então o Hamiltoniano completo do sistema, na forma $\mathcal{H} = \mathcal{H}_{AM} + \mathcal{H}_{MF}$,

$$\begin{aligned}\mathcal{H} &= \sum_{\mathbf{k}\sigma} \epsilon c_{\sigma\mathbf{k}}^{\dagger} c_{\sigma\mathbf{k}} + \sum_{\sigma} \epsilon_{d,\sigma} d_{\sigma}^{\dagger} d_{\sigma} + U \left(d_{\uparrow}^{\dagger} d_{\uparrow} d_{\downarrow}^{\dagger} d_{\downarrow} \right) + V \sum_{\mathbf{k}\sigma} \left(c_{\sigma\mathbf{k}}^{\dagger} d_{\sigma} + d_{\sigma}^{\dagger} c_{\sigma\mathbf{k}} \right) \\ &+ \varepsilon_M \left(f_{\uparrow}^{\dagger} f_{\uparrow} - \frac{1}{2} \right) + \sum_{\sigma} \left[t_{\sigma} \left(d_{\sigma} f_{\uparrow}^{\dagger} + f_{\uparrow} d_{\sigma}^{\dagger} \right) + \Delta_{\sigma} \left(d_{\sigma} f_{\uparrow} + f_{\uparrow}^{\dagger} d_{\sigma}^{\dagger} \right) \right].\end{aligned}\quad (3.42)$$

A partir deste Hamiltoniano, as funções de Green do sistema podem ser determinadas por meio da técnica da EOM, abordagem esta que será apresentada a seguir.

3.4 Função de Green dos pontos quânticos

Com o objetivo de obter a DOS do sistema proposto, esta seção será dedicada à apresentação do cálculo de funções de Green retardadas, válidas no chamado limite de banda larga, por meio da técnica da EOM, que será abordado fazendo-se uso da notação de Zubarev.

Em um primeiro momento, para uma análise geral, o sistema foi determinado em função do regime de bloqueio de Coulomb do QD acoplado ao superconductor, no qual a física de interesse pode ser capturada por meio de uma aproximação de campo médio auto-consistente do tipo Hartree-Fock. Dessa forma, o termo de interação pode ser escrito como

$$U n_{d\uparrow} n_{d\downarrow} \approx U (n_{d\uparrow} \langle n_{d\downarrow} \rangle + \langle n_{d\uparrow} \rangle n_{d\downarrow} - \langle n_{d\uparrow} \rangle \langle n_{d\downarrow} \rangle) \quad (3.43)$$

e então, o Hamiltoniano do QD deve ser reescrito como

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{QD} &= \sum_{\sigma} \epsilon_{d\sigma} d_{\sigma}^{\dagger} d_{\sigma} + U \left(d_{\uparrow}^{\dagger} d_{\uparrow} d_{\downarrow}^{\dagger} d_{\downarrow} \right) \\ &\approx \sum_{\sigma} \tilde{\epsilon}_{d\sigma} d_{\sigma}^{\dagger} d_{\sigma} - U \langle n_{d\uparrow} \rangle \langle n_{d\downarrow} \rangle, \end{aligned} \quad (3.44)$$

em que $\tilde{\epsilon}_{d\sigma} = \epsilon_{d\sigma} + U \langle n_{d\bar{\sigma}} \rangle$ e $\bar{\sigma}$ é o oposto de σ (se $\sigma = \uparrow \Rightarrow \bar{\sigma} = \downarrow$).

Para determinar a DOS é preciso calcular a função de Green retardada no domínio da energia, como apresenta a Eq.(2.4),

$$\omega^+ \langle \langle d_{\sigma}; d_{\sigma}^{\dagger} \rangle \rangle = \langle [d_{\sigma}, d_{\sigma}^{\dagger}]_+ \rangle + \langle \langle [d_{\sigma}, \mathcal{H}]; d_{\sigma}^{\dagger} \rangle \rangle. \quad (3.45)$$

É necessário evocar a técnica da EOM para se dar continuidade ao cálculo da função de Green. Por meio dessa técnica, obtém-se a partir da Eq. (3.45),

$$\omega^+ \langle \langle d_{\sigma}; d_{\sigma}^{\dagger} \rangle \rangle = 1 + \tilde{\epsilon}_{d\sigma} \langle \langle d_{\sigma}; d_{\sigma}^{\dagger} \rangle \rangle + V \sum_{\mathbf{k}} \langle \langle c_{\sigma\mathbf{k}}; d_{\sigma}^{\dagger} \rangle \rangle + \langle \langle [d_{\sigma}, \mathcal{H}_{MFS}]; d_{\sigma}^{\dagger} \rangle \rangle. \quad (3.46)$$

Como pode-se notar pela Eq. (3.46), novas funções de Green surgiram, $\langle \langle c_{\sigma\mathbf{k}}; d_{\sigma}^{\dagger} \rangle \rangle$ e $\langle \langle [d_{\sigma}, \mathcal{H}_{MFS}]; d_{\sigma}^{\dagger} \rangle \rangle$. Desta forma dá-se continuidade analisando tais no-

vas funções. Assim

$$\omega^+ \langle\langle c_{\sigma k}; d_\sigma^\dagger \rangle\rangle = \langle [d_\sigma, d_\sigma^\dagger]_+ \rangle + \langle\langle [d_\sigma, \mathcal{H}] ; d_\sigma^\dagger \rangle\rangle, \quad (3.47)$$

aplicando a técnica EOM, tem-se

$$\langle\langle c_{\sigma k}; d_\sigma^\dagger \rangle\rangle = \frac{V}{(\omega^+ - \epsilon)} \langle\langle d_\sigma; d_\sigma^\dagger \rangle\rangle. \quad (3.48)$$

A Eq. (3.46) é então reescrita como:

$$\left(\omega^+ - \tilde{\varepsilon}_{d\sigma} - \sum_k \frac{V^2}{(\omega^+ - \epsilon)} \right) \langle\langle d_\sigma; d_\sigma^\dagger \rangle\rangle = 1 + \langle\langle [d_\sigma, \mathcal{H}_{MFS}] ; d_\sigma^\dagger \rangle\rangle, \quad (3.49)$$

em que o termo $\sum_k \frac{V^2}{(\omega^+ - \epsilon)} = -i\Gamma_{N\sigma}$, sendo $\Gamma_{N\sigma}$ o chamado parâmetro de Anderson.

Aplicando o mesmo método para a função de Green $\langle\langle [d_\sigma, \mathcal{H}_{MFS}] ; d_\sigma^\dagger \rangle\rangle$.

$$\langle\langle [d_\sigma, \mathcal{H}_{MFS}] ; d_\sigma^\dagger \rangle\rangle = -t_\sigma \langle\langle f_\uparrow; d_\sigma^\dagger \rangle\rangle - \Delta_\sigma \langle\langle f_\uparrow^\dagger; d_\sigma^\dagger \rangle\rangle, \quad (3.50)$$

desta forma,

$$(\omega^+ - \tilde{\varepsilon}_{d\sigma} + i\Gamma_{N\sigma}) \langle\langle d_\sigma; d_\sigma^\dagger \rangle\rangle = 1 - t_\sigma \langle\langle f_\uparrow; d_\sigma^\dagger \rangle\rangle - \Delta_\sigma \langle\langle f_\uparrow^\dagger; d_\sigma^\dagger \rangle\rangle, \quad (3.51)$$

em que as funções $\langle\langle f_\uparrow; d_\sigma^\dagger \rangle\rangle$ e $\langle\langle f_\uparrow^\dagger; d_\sigma^\dagger \rangle\rangle$, resultam em

$$\langle\langle f_\uparrow; d_\sigma^\dagger \rangle\rangle = - \sum_{\sigma'} \frac{t_{\sigma'}}{(\omega^+ - \varepsilon_M)} \langle\langle d_{\sigma'}; d_\sigma^\dagger \rangle\rangle + \sum_{\sigma'} \frac{\Delta_{\sigma'}}{(\omega^+ - \varepsilon_M)} \langle\langle d_{\sigma'}^\dagger; d_\sigma^\dagger \rangle\rangle \quad (3.52)$$

e

$$\langle\langle f_\uparrow^\dagger; d_\sigma^\dagger \rangle\rangle = \sum_{\sigma'} \frac{t_{\sigma'}}{(\omega^+ + \varepsilon_M)} \langle\langle d_{\sigma'}^\dagger; d_\sigma^\dagger \rangle\rangle - \sum_{\sigma'} \frac{\Delta_{\sigma'}}{(\omega^+ + \varepsilon_M)} \langle\langle d_{\sigma'}; d_\sigma^\dagger \rangle\rangle. \quad (3.53)$$

A Eq. (3.51) pode ser redefinida para um valor genérico σ' que pode assumir valores de σ e $\bar{\sigma}$.

$$(\omega^+ - \tilde{\varepsilon}_{d\sigma'} + i\Gamma_{N\sigma'}) \langle\langle d_{\sigma'}; d_\sigma^\dagger \rangle\rangle = \delta_{\sigma\sigma'} - t_{\sigma'} \langle\langle f_\uparrow; d_\sigma^\dagger \rangle\rangle - \Delta_{\sigma'} \langle\langle f_\uparrow^\dagger; d_\sigma^\dagger \rangle\rangle. \quad (3.54)$$

Substituindo a Eq. (3.52) e Eq. (3.53) na Eq. (3.54):

$$\begin{aligned} (\omega^+ - \tilde{\varepsilon}_{d\sigma'} - k_2^{\sigma'\sigma'}(\omega) + i\Gamma_{N\sigma'}) \langle\langle d_{\sigma'}; d_\sigma^\dagger \rangle\rangle &= \delta_{\sigma\sigma'} + k_2^{\sigma'\bar{\sigma}'}(\omega) \langle\langle d_{\bar{\sigma}'}; d_\sigma^\dagger \rangle\rangle - k_1^{\sigma'\sigma'}(\omega) \langle\langle d_{\sigma'}^\dagger; d_\sigma^\dagger \rangle\rangle \\ &\quad - k_1^{\sigma'\bar{\sigma}'}(\omega) \langle\langle d_{\bar{\sigma}'}^\dagger; d_\sigma^\dagger \rangle\rangle, \end{aligned} \quad (3.55)$$

em que os fatores

$$k_1^{\sigma'\sigma'}(\omega) = \frac{t_{\sigma'}\Delta_{\sigma'}}{(\omega^+ - \varepsilon_M)} + \frac{\Delta_{\sigma'}t_{\sigma'}}{(\omega^+ + \varepsilon_M)}, \quad (3.56)$$

$$k_1^{\sigma'\bar{\sigma}'}(\omega) = \frac{t_{\sigma'}\Delta_{\bar{\sigma}'}}{(\omega^+ - \varepsilon_M)} + \frac{\Delta_{\sigma'}t_{\bar{\sigma}'}}{(\omega^+ + \varepsilon_M)}, \quad (3.57)$$

$$k_2^{\sigma'\sigma'}(\omega) = \frac{t_{\sigma'}t_{\sigma'}}{(\omega^+ - \varepsilon_M)} + \frac{\Delta_{\sigma'}\Delta_{\sigma'}}{(\omega^+ + \varepsilon_M)}, \quad (3.58)$$

$$k_2^{\sigma'\bar{\sigma}'}(\omega) = \frac{t_{\sigma'}t_{\bar{\sigma}'}}{(\omega^+ - \varepsilon_M)} + \frac{\Delta_{\sigma'}\Delta_{\bar{\sigma}'}}{(\omega^+ + \varepsilon_M)}. \quad (3.59)$$

Como se pode notar pela Eq. (3.55) é preciso calcular também as funções de Green anômalas que se relacionam à formação dos pares de Cooper. Com este intuito, é fundamental o desenvolvimento das funções $\langle\langle d_{\sigma'}^\dagger; d_\sigma^\dagger \rangle\rangle$ e $\langle\langle d_{\bar{\sigma}'}^\dagger; d_\sigma^\dagger \rangle\rangle$. Aplicando-se o mesmo método, da equação de movimento, se obtém:

$$\begin{aligned} (\omega^+ + \tilde{\varepsilon}_{d\sigma'} - \bar{k}_2^{\sigma'\sigma'}(\omega) + i\Gamma_{N\sigma'}) \langle\langle d_{\sigma'}^\dagger; d_\sigma^\dagger \rangle\rangle &= \bar{k}_2^{\sigma'\bar{\sigma}'}(\omega) \langle\langle d_{\bar{\sigma}'}^\dagger; d_\sigma^\dagger \rangle\rangle - \bar{k}_1^{\sigma'\sigma'}(\omega) \langle\langle d_{\sigma'}^\dagger; d_\sigma^\dagger \rangle\rangle \\ &\quad - \bar{k}_1^{\sigma'\bar{\sigma}'}(\omega) \langle\langle d_{\bar{\sigma}'}^\dagger; d_\sigma^\dagger \rangle\rangle, \end{aligned} \quad (3.60)$$

no qual, novamente alguns fatores foram definidos para simplificar a equação, sendo eles:

$$\bar{k}_1^{\sigma'\sigma'}(\omega) = \frac{t_{\sigma'}\Delta_{\sigma'}}{(\omega^+ + \varepsilon_M)} + \frac{\Delta_{\sigma'}t_{\sigma'}}{(\omega^+ - \varepsilon_M)}, \quad (3.61)$$

$$\bar{k}_1^{\sigma'\bar{\sigma}'}(\omega) = \frac{t_{\sigma'}\Delta_{\bar{\sigma}'}}{(\omega^+ + \varepsilon_M)} + \frac{\Delta_{\sigma'}t_{\bar{\sigma}'}}{(\omega^+ - \varepsilon_M)}, \quad (3.62)$$

$$\bar{k}_2^{\sigma'\sigma'}(\omega) = \frac{t_{\sigma'}t_{\sigma'}}{(\omega^+ + \varepsilon_M)} + \frac{\Delta_{\sigma'}\Delta_{\sigma'}}{(\omega^+ - \varepsilon_M)}, \quad (3.63)$$

$$\bar{k}_2^{\sigma'\bar{\sigma}'}(\omega) = \frac{t_{\sigma'}t_{\bar{\sigma}'}}{(\omega^+ + \varepsilon_M)} + \frac{\Delta_{\sigma'}\Delta_{\bar{\sigma}'}}{(\omega^+ - \varepsilon_M)}. \quad (3.64)$$

Por meio das funções de Green normal e anômala, Eq. (3.55) e (3.60), definidas em componentes de σ torna-se possível analisar separadamente para $\sigma = \uparrow$ e $\sigma = \downarrow$.

Em um primeiro momento, para se analisar as funções de Green em componentes do estado molecular ligante, considere $\sigma = \sigma' = \uparrow$ ($\bar{\sigma} = \bar{\sigma}' = \downarrow$) e, considere também o parâmetro de Anderson como independente de σ , pois se relaciona com os terminais metálicos e ambos são idênticos no sistema estudado, ou seja, $\Gamma_{N\uparrow} = \Gamma_{N\downarrow} = \Gamma_N$. Desta forma, obtém-se, por meio da Eq. (3.55) e (3.60), um sistema de equações do tipo

$$a_{\uparrow}(\omega) \langle\langle d_{\uparrow}; d_{\uparrow}^{\dagger} \rangle\rangle - k_2^{\uparrow\downarrow}(\omega) \langle\langle d_{\downarrow}; d_{\uparrow}^{\dagger} \rangle\rangle + k_1^{\uparrow\uparrow}(\omega) \langle\langle d_{\uparrow}^{\dagger}; d_{\uparrow}^{\dagger} \rangle\rangle + k_1^{\uparrow\downarrow}(\omega) \langle\langle d_{\downarrow}^{\dagger}; d_{\uparrow}^{\dagger} \rangle\rangle = 1, \quad (3.65)$$

$$-k_2^{\downarrow\uparrow}(\omega) \langle\langle d_{\uparrow}; d_{\uparrow}^{\dagger} \rangle\rangle + a_{\downarrow}(\omega) \langle\langle d_{\downarrow}; d_{\uparrow}^{\dagger} \rangle\rangle + k_1^{\downarrow\uparrow}(\omega) \langle\langle d_{\uparrow}^{\dagger}; d_{\uparrow}^{\dagger} \rangle\rangle + k_1^{\downarrow\downarrow}(\omega) \langle\langle d_{\downarrow}^{\dagger}; d_{\uparrow}^{\dagger} \rangle\rangle = 0, \quad (3.66)$$

$$\bar{k}_1^{\uparrow\uparrow}(\omega) \langle\langle d_{\uparrow}; d_{\uparrow}^{\dagger} \rangle\rangle + \bar{k}_1^{\uparrow\downarrow}(\omega) \langle\langle d_{\downarrow}; d_{\uparrow}^{\dagger} \rangle\rangle + b_{\uparrow}(\omega) \langle\langle d_{\uparrow}^{\dagger}; d_{\uparrow}^{\dagger} \rangle\rangle - \bar{k}_2^{\uparrow\downarrow}(\omega) \langle\langle d_{\downarrow}^{\dagger}; d_{\uparrow}^{\dagger} \rangle\rangle = 0, \quad (3.67)$$

$$\bar{k}_1^{\downarrow\uparrow}(\omega) \langle\langle d_{\uparrow}; d_{\uparrow}^{\dagger} \rangle\rangle + \bar{k}_1^{\downarrow\downarrow}(\omega) \langle\langle d_{\downarrow}; d_{\uparrow}^{\dagger} \rangle\rangle - \bar{k}_2^{\downarrow\uparrow}(\omega) \langle\langle d_{\uparrow}; d_{\uparrow}^{\dagger} \rangle\rangle + b_{\downarrow}(\omega) \langle\langle d_{\downarrow}^{\dagger}; d_{\uparrow}^{\dagger} \rangle\rangle = 0, \quad (3.68)$$

no qual $a_{\sigma}(\omega) = \omega^+ - \tilde{\varepsilon}_{d\sigma} - k_2^{\sigma\sigma} + i\Gamma_N$ e $b_{\sigma}(\omega) = \omega^+ + \tilde{\varepsilon}_{d\sigma} - \bar{k}_2^{\sigma\sigma} + i\Gamma_N$.

Em um segundo momento, ao se considerar o estado molecular antiliante $\sigma = \sigma' = \downarrow$ ($\bar{\sigma} = \bar{\sigma}' = \uparrow$), utilizando novamente a Eq. (3.55) e (3.60), chega-se a um segundo sistema de equações:

$$a_{\downarrow}(\omega) \langle\langle d_{\downarrow}; d_{\downarrow}^{\dagger} \rangle\rangle - k_2^{\downarrow\uparrow}(\omega) \langle\langle d_{\uparrow}; d_{\downarrow}^{\dagger} \rangle\rangle + k_1^{\downarrow\downarrow}(\omega) \langle\langle d_{\downarrow}^{\dagger}; d_{\downarrow}^{\dagger} \rangle\rangle + k_1^{\downarrow\uparrow}(\omega) \langle\langle d_{\uparrow}^{\dagger}; d_{\downarrow}^{\dagger} \rangle\rangle = 1, \quad (3.69)$$

$$-k_2^{\uparrow\downarrow}(\omega) \langle\langle d_{\downarrow}; d_{\downarrow}^{\dagger} \rangle\rangle + a_{\uparrow}(\omega) \langle\langle d_{\uparrow}; d_{\downarrow}^{\dagger} \rangle\rangle + k_1^{\uparrow\downarrow}(\omega) \langle\langle d_{\downarrow}^{\dagger}; d_{\downarrow}^{\dagger} \rangle\rangle + k_1^{\uparrow\uparrow}(\omega) \langle\langle d_{\uparrow}^{\dagger}; d_{\downarrow}^{\dagger} \rangle\rangle = 0, \quad (3.70)$$

$$\bar{k}_1^{\downarrow\downarrow}(\omega) \langle\langle d_{\downarrow}; d_{\downarrow}^{\dagger} \rangle\rangle + \bar{k}_1^{\downarrow\uparrow}(\omega) \langle\langle d_{\uparrow}; d_{\downarrow}^{\dagger} \rangle\rangle + b_{\downarrow}(\omega) \langle\langle d_{\downarrow}^{\dagger}; d_{\downarrow}^{\dagger} \rangle\rangle - \bar{k}_2^{\downarrow\uparrow}(\omega) \langle\langle d_{\uparrow}; d_{\downarrow}^{\dagger} \rangle\rangle = 0, \quad (3.71)$$

$$\bar{k}_1^{\uparrow\downarrow}(\omega) \langle\langle d_{\downarrow}; d_{\downarrow}^{\dagger} \rangle\rangle + \bar{k}_1^{\uparrow\uparrow}(\omega) \langle\langle d_{\uparrow}; d_{\downarrow}^{\dagger} \rangle\rangle - \bar{k}_2^{\uparrow\downarrow}(\omega) \langle\langle d_{\downarrow}^{\dagger}; d_{\downarrow}^{\dagger} \rangle\rangle + b_{\uparrow}(\omega) \langle\langle d_{\uparrow}^{\dagger}; d_{\downarrow}^{\dagger} \rangle\rangle = 0. \quad (3.72)$$

Ambos os sistemas de equações, tanto para $\sigma = \uparrow$ quanto para $\sigma = \downarrow$, podem ser escritos na forma matricial. Assim sendo, para $\sigma = \uparrow$, tem-se

$$\begin{bmatrix} a_{\uparrow}(\omega) & -k_2^{\uparrow\downarrow}(\omega) & k_1^{\uparrow\uparrow}(\omega) & k_1^{\uparrow\downarrow}(\omega) \\ -k_2^{\downarrow\uparrow}(\omega) & a_{\downarrow}(\omega) & k_1^{\downarrow\uparrow}(\omega) & k_1^{\downarrow\downarrow}(\omega) \\ \bar{k}_1^{\uparrow\downarrow}(\omega) & \bar{k}_1^{\uparrow\uparrow}(\omega) & b_{\uparrow}(\omega) & -\bar{k}_2^{\uparrow\downarrow}(\omega) \\ \bar{k}_1^{\downarrow\uparrow}(\omega) & \bar{k}_1^{\downarrow\downarrow}(\omega) & -\bar{k}_2^{\downarrow\uparrow}(\omega) & b_{\downarrow}(\omega) \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} \langle\langle d_{\uparrow}; d_{\uparrow}^{\dagger} \rangle\rangle \\ \langle\langle d_{\downarrow}; d_{\uparrow}^{\dagger} \rangle\rangle \\ \langle\langle d_{\uparrow}^{\dagger}; d_{\uparrow}^{\dagger} \rangle\rangle \\ \langle\langle d_{\downarrow}^{\dagger}; d_{\uparrow}^{\dagger} \rangle\rangle \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad (3.73)$$

e, para $\sigma = \downarrow$,

$$\begin{bmatrix} a_{\downarrow}(\omega) & -k_2^{\downarrow\uparrow}(\omega) & k_1^{\downarrow\downarrow}(\omega) & k_1^{\downarrow\uparrow}(\omega) \\ -k_2^{\uparrow\downarrow}(\omega) & a_{\uparrow}(\omega) & k_1^{\uparrow\downarrow}(\omega) & k_1^{\uparrow\uparrow}(\omega) \\ \bar{k}_1^{\downarrow\downarrow}(\omega) & \bar{k}_1^{\downarrow\uparrow}(\omega) & b_{\downarrow}(\omega) & -\bar{k}_2^{\downarrow\uparrow}(\omega) \\ \bar{k}_1^{\uparrow\downarrow}(\omega) & \bar{k}_1^{\uparrow\uparrow}(\omega) & -\bar{k}_2^{\uparrow\downarrow}(\omega) & b_{\uparrow}(\omega) \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} \langle\langle d_{\downarrow}; d_{\downarrow}^{\dagger} \rangle\rangle \\ \langle\langle d_{\uparrow}; d_{\downarrow}^{\dagger} \rangle\rangle \\ \langle\langle d_{\downarrow}^{\dagger}; d_{\downarrow}^{\dagger} \rangle\rangle \\ \langle\langle d_{\uparrow}^{\dagger}; d_{\downarrow}^{\dagger} \rangle\rangle \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}. \quad (3.74)$$

Por meio da análise das matrizes é possível determinar as funções de Green, segundo elemento ao lado esquerdo das Eqs. (3.73) e (3.74). Tais funções são o cerne do problema em estudo, pois descrevem informações relacionadas às densidades de estados do sistema, por meio das funções de Green normais ($\langle\langle d_{\sigma'}; d_{\sigma}^{\dagger} \rangle\rangle$) e das anômalas ($\langle\langle d_{\sigma'}^{\dagger}; d_{\sigma}^{\dagger} \rangle\rangle$) que descrevem a formação de pares de Cooper que, por sua vez, são os elementos básicos para o transporte eletrônico em materiais supercondutores.

Com o intuito de se escrever um sistema contendo todas as funções de Green que compõe as matrizes, é adequado se definir a matriz coluna

$$\mathbf{G}^{\sigma}(\omega) = \begin{bmatrix} \langle\langle d_{\sigma}; d_{\sigma}^{\dagger} \rangle\rangle \\ \langle\langle d_{\bar{\sigma}}; d_{\sigma}^{\dagger} \rangle\rangle \\ \langle\langle d_{\sigma}^{\dagger}; d_{\sigma}^{\dagger} \rangle\rangle \\ \langle\langle d_{\bar{\sigma}}^{\dagger}; d_{\sigma}^{\dagger} \rangle\rangle \end{bmatrix}. \quad (3.75)$$

Sendo que a densidade eletrônica por estado molecular é dada por:

$$\rho^{\sigma}(\omega) = -\frac{1}{\pi} \text{Im} [\mathbf{G}_{11}^{\sigma}(\omega)], \quad (3.76)$$

com $\mathbf{G}_{11}^{\sigma}(\omega) = \langle\langle d_{\sigma}; d_{\sigma}^{\dagger} \rangle\rangle$. Os elementos de $\mathbf{G}^{\sigma}(\omega)$ podem ser obtidos numericamente considerando

$$\mathbf{A}^{\sigma}(\omega) \mathbf{G}^{\sigma}(\omega) = \mathbf{R} \Rightarrow$$

$$\mathbf{G}^{\sigma}(\omega) = [\mathbf{A}^{\sigma}(\omega)]^{-1} \mathbf{R}, \quad (3.77)$$

em que $\mathbf{A}^{\sigma}(\omega)$ representa o primeiro elemento das Eqs. (3.73) e (3.74), ou seja,

$$\mathbf{A}^\sigma(\omega) = \begin{bmatrix} a_\sigma(\omega) & -k_2^{\sigma\bar{\sigma}}(\omega) & k_1^{\sigma\sigma}(\omega) & k_1^{\sigma\bar{\sigma}}(\omega) \\ -k_2^{\bar{\sigma}\sigma}(\omega) & a_{\bar{\sigma}}(\omega) & k_1^{\bar{\sigma}\sigma}(\omega) & k_1^{\bar{\sigma}\bar{\sigma}}(\omega) \\ \bar{k}_1^{\sigma\sigma}(\omega) & \bar{k}_1^{\sigma\bar{\sigma}}(\omega) & b_\sigma(\omega) & -\bar{k}_2^{\sigma\bar{\sigma}}(\omega) \\ \bar{k}_1^{\bar{\sigma}\sigma}(\omega) & \bar{k}_1^{\bar{\sigma}\bar{\sigma}}(\omega) & -\bar{k}_2^{\bar{\sigma}\sigma}(\omega) & b_{\bar{\sigma}}(\omega) \end{bmatrix}, \quad (3.78)$$

e \mathbf{R} é a matriz coluna 4×1 ,

$$\mathbf{R} = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}. \quad (3.79)$$

Desta forma, as funções de Green do sistema podem ser extraídas por meio da análise numérica.

Por fim, é de suma importância a determinação das densidades de estados nos QDs e entre eles. De modo geral pode-se definir

$$\rho_{QD}(\omega) = -\frac{1}{\pi} \text{Im} [\langle\langle d_\alpha; d_\alpha^\dagger \rangle\rangle], \quad (3.80)$$

assim, as densidades $\rho_{LL}(\omega)$, $\rho_{RR}(\omega)$, $\rho_{RL}(\omega)$ e $\rho_{LR}(\omega)$ podem ser determinadas substituindo as Eqs. (3.7-3.12) na Eq. (3.80) e, trabalhando algebraicamente com os termos no anticomutador, obtém-se as seguintes relações:

$$\begin{aligned} \rho_{LL}(\omega) = & -\frac{1}{\pi} \Im \left[(\cos \phi)^2 \langle\langle d_\uparrow; d_\uparrow^\dagger \rangle\rangle + (\sin \phi)^2 \langle\langle d_\downarrow; d_\downarrow^\dagger \rangle\rangle \right. \\ & \left. - (\cos \phi)(\sin \phi) \left(\langle\langle d_\uparrow; d_\downarrow^\dagger \rangle\rangle + \langle\langle d_\downarrow; d_\uparrow^\dagger \rangle\rangle \right) \right], \end{aligned} \quad (3.81)$$

$$\begin{aligned} \rho_{RR}(\omega) = & -\frac{1}{\pi} \Im \left[(\cos \phi)^2 \langle\langle d_\downarrow; d_\downarrow^\dagger \rangle\rangle + (\sin \phi)^2 \langle\langle d_\uparrow; d_\uparrow^\dagger \rangle\rangle \right. \\ & \left. + (\sin \phi)(\cos \phi) \left(\langle\langle d_\uparrow; d_\downarrow^\dagger \rangle\rangle + \langle\langle d_\downarrow; d_\uparrow^\dagger \rangle\rangle \right) \right], \end{aligned} \quad (3.82)$$

$$\begin{aligned}\rho_{RL}(\omega) = & -\frac{1}{\pi} \Im \left[(\cos \phi)^2 \langle\langle d_\downarrow; d_\uparrow^\dagger \rangle\rangle - (\sin \phi)^2 \langle\langle d_\downarrow; d_\downarrow^\dagger \rangle\rangle \right. \\ & \left. + (\sin \phi) (\cos \phi) \left(\langle\langle d_\uparrow; d_\uparrow^\dagger \rangle\rangle - \langle\langle d_\downarrow^\dagger; d_\downarrow \rangle\rangle \right) \right],\end{aligned}\quad (3.83)$$

$$\begin{aligned}\rho_{LR}(\omega) = & -\frac{1}{\pi} \Im \left[(\cos \phi)^2 \langle\langle d_\uparrow; d_\downarrow^\dagger \rangle\rangle - (\sin \phi)^2 \langle\langle d_\downarrow; d_\uparrow^\dagger \rangle\rangle \right. \\ & \left. + (\cos \phi) (\sin \phi) \left(\langle\langle d_\uparrow; d_\uparrow^\dagger \rangle\rangle - \langle\langle d_\downarrow; d_\downarrow^\dagger \rangle\rangle \right) \right].\end{aligned}\quad (3.84)$$

As densidades de estado dependem de funções trigonométricas, oriundas da mudança de base realizada na seção 3.2. Tais DOS revelam informações da interação entre os QDs como fenômenos de interferência devido à troca de partículas. Informações como esta são relevantes para se entender o comportamento do sistema, tanto para o caso em que se tem o *hopping* direto entre os QDs quanto para situações em que a troca de elétrons ocorre por intermédio do nanofio supercondutor. Este último caso, em que o transporte eletrônico ocorre através do nanofio supercondutor, ou seja, é mediado por férmiões de Majorana, será uma abordagem de foco neste trabalho, pois resultados interessantes emergem desta condição. Na próxima seção essa situação será explicitada, assim como alguns resultados bem conhecidos na literatura que são recuperados pelo sistema proposto neste trabalho.

As plotagens presentes no próximo tópico serão apresentados com as legendas τ_{ij} , em que $i = L, R$ e $j = R, L$, podendo se obter os termos $\tau_{LL}, \tau_{RR}, \tau_{LR}$ e τ_{RL} , que retratam a leitura da DOS dos QDs. Estes termos são escritos em função das densidades de estados ρ_{ij} , como

$$\tau_{ij} = \pi \Gamma_N \rho_{ij}, \quad (3.85)$$

em que $\pi \Gamma_N$ são termos de normalização para a DOS. E, as quatro equações obtidas para τ , podem ser analisadas como,

$$\tau_{ij} = \tau_{\uparrow\uparrow} + \tau_{\downarrow\downarrow} + \tau_{\uparrow\downarrow} + \tau_{\downarrow\uparrow}, \quad (3.86)$$

função dos estados moleculares ligante e antiligante, descritos por $\tau_{\uparrow\uparrow}$ e $\tau_{\downarrow\downarrow}$, bem como os estados moleculares mistos, $\tau_{\uparrow\downarrow}$ e $\tau_{\downarrow\uparrow}$.

Capítulo 4

Resultados e discussão

Com base nas relações algébricas obtidas na seção 3.4, elucidam-se agora as características obtidas por meio das DOS, Eqs. (3.81-3.84), que podem, para o caso de realizações experimentais, ser obtidas por meio de medidas de condutância.

Considerou-se, inicialmente, alguns casos já presentes na literatura em que se tem o acoplamento de um único QD aos férmiões de Majorana presentes no nanofio. Note que quando se acopla apenas um QD ao resto do sistema os resultados obtidos não estarão em função dos estados moleculares, até porque não existe molécula nesta configuração. Os três primeiros casos abordados são já conhecidos na literatura e estão relacionados com a não localidade dos férmiões de Majorana [33]. Vale ressaltar que, os parâmetros do sistema, ε_M , ε_d e os acoplamentos λ são estimados em unidades do parâmetro de Anderson Γ_N . É importante destacar que no processo de obtenção dos resultados não se considerou a repulsão coulombiana nos níveis e nem entre os QDs, $U = 0$.

Na sequência estão representados dois casos obtidos neste trabalho. O primeiro deles resgata valores já conhecidos tanto na literatura teórica quanto em reproduções experimentais, como os perfis *bowtie* e *diamond*, caso este que pode ser encarado com uma forma de validação do trabalho teórico proposto. O segundo caso traz uma abordagem um pouco diferente da literatura, uma possível formação molecular mediada pelos férmiões de Majorana.

4.1 Caso 1: QDs isolados

As figuras que compõem este tópico possuem painéis rotulados com τ_{LL} e τ_{RR} que são designações referentes aos QDs da esquerda e direita, respecti-

vamente. Não existem perfis de interferência, pois neste caso foram analisados apenas acoplamentos em que os QDs estão isolados nas bordas do sistema, ou seja, eles não interagem entre si dando origem a perfis moleculares, como será visto no caso dois.

A Fig. 4.1 apresenta dois gráficos da densidade de estados em função da frequência espectral $\omega(\Gamma_N)$ e da energia do QD ε_d . O painel (a) apresenta, por meio do dispositivo proposto, os acoplamentos entre os QDs e os férmiuns de Majorana em cada borda do nanofio (os vizinhos mais próximos). Ajustou-se, para este caso os acoplamentos dos QDs aos MBSs com amplitudes iguais, $\lambda_{L1} = 3.0\Gamma_N$ e $\lambda_{R1} = 3.0\Gamma_N$. Nesta situação não existe superposição entre os férmiuns de Majorana, ou seja, $\varepsilon_M = 0$ e os MBSs são férmiuns não locais nas bordas do fio que emergem na leitura de cada QD como ZBAs.

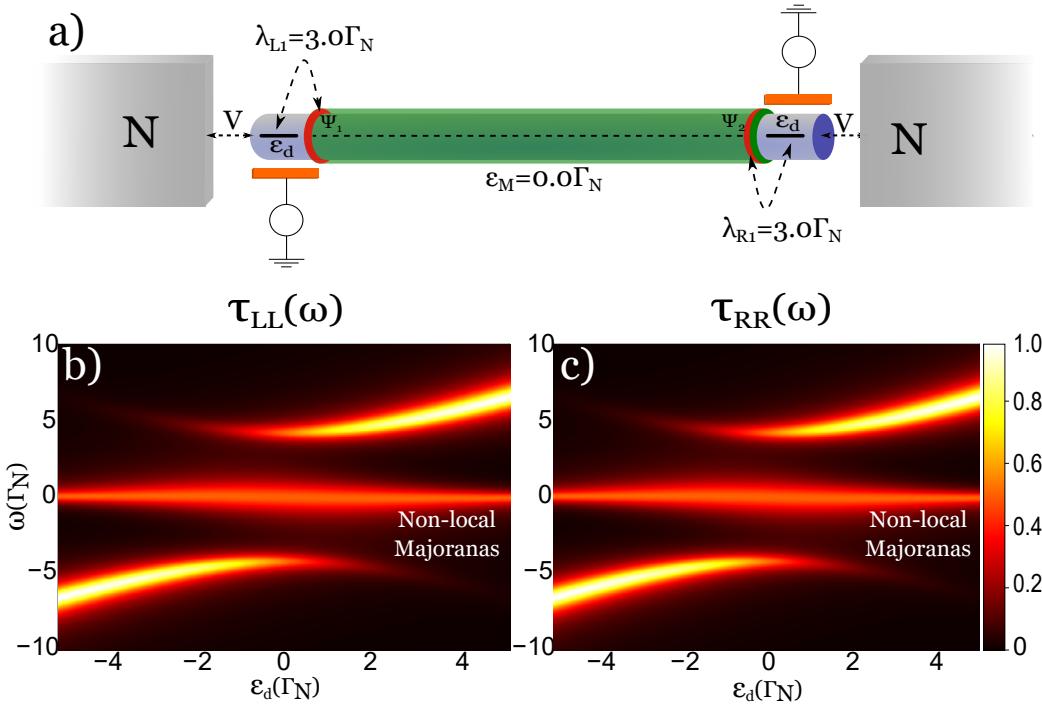


Figura 4.1: (a) Representação esquemática do modelo proposto com os acoplamentos $\lambda_{L1} = \lambda_{R1} = 3.0\Gamma_N$, superposição entre os majoranas $\varepsilon_M = 0.0\Gamma_N$, não havendo assim acoplamentos nem entre os QDs nem entre os férmiuns de Majorana; os painéis (b) e (c) apresentam a assinatura dos férmiuns de Majorana nos QDs, uma ZBA, que tem sua origem em zero de energia do QD em função do efeito de vazamento do férmiun de Majorana da borda do fio para o QD, bem como a renormalização do estado do QD em estados com formato de semiarco devido ao acoplamento com o MBS.

Os painéis (b) e (c) da Fig. 4.1 apresentam as densidades de estados

referentes a cada QD. Ambos os painéis são iguais devido aos valores de λ serem idênticos, neles nota-se a manifestação de um modo zero de energia (no nível de Fermi do sistema) que não se modifica com a variação da energia dos QDs [20, 33]. Estas assinaturas no zero de energia caracterizam o vazamento dos férmiões de Majorana de cada borda do nanofio para os QDs e a manifestação se dá sempre em zero devido ao fato de que estes férmiões não possuem carga. Vale notar também que os níveis do QD são renormalizados e desdobrados devido ao acoplamento com o MBS, tornando-se dois semiarcos, uma abaixo e outra acima do nível de Fermi, $\omega < 0$ e $\omega > 0$, respectivamente.

Quando há uma superposição finita entre os férmiões de Majorana, $\varepsilon_M \neq 0$, sua energia se afasta do zero dando origem a duas ressonâncias que são denominadas de estados ligados de Andreev (do inglês, ABS - Andreev bound states), podendo assumir dois diferentes perfis que são definidos pela configuração do sistema, seus acoplamentos, sendo esses perfis: *bowtie* ou *diamond* [33]. A configuração apresentada pelo painel (a), na Fig. 4.2, representa o sistema para o perfil *bowtie*, porém como pode-se notar apenas o QD da esquerda está acoplado com esta configuração e o da direita está isolado do sistema Majorana, estando apenas acoplado ao terminal metálico, porém esse acoplamento confere apenas largura à ressonância que sem ele seria uma delta de Dirac. Como pode-se notar, o acoplamento do QD da esquerda com o segundo MBS ($\lambda_{L2} = 0.001\Gamma_N$) é bem menor que a superposição entre os próprios MBSs ($\varepsilon_M = 2.0\Gamma_N$), já o acoplamento com o primeiro Majorana é sempre de maior intensidade ($\lambda_{L1} = 3.0\Gamma_N$). A configuração $\lambda_{L1}, \varepsilon_M \gg \lambda_{L2}$ representa justamente o tipo de acoplamento que caracteriza o perfil *bowtie* presente no painel (b). Nota-se que os dois ABSs se cruzam, no nível de Fermi, em torno da energia zero para o QD, $\varepsilon_d = 0\Gamma$. Desta forma, o ABS que possui inicialmente maior energia passa a ser menos energético e o que possuía menor energia cruza o nível de Fermi e passa a ser mais energético.

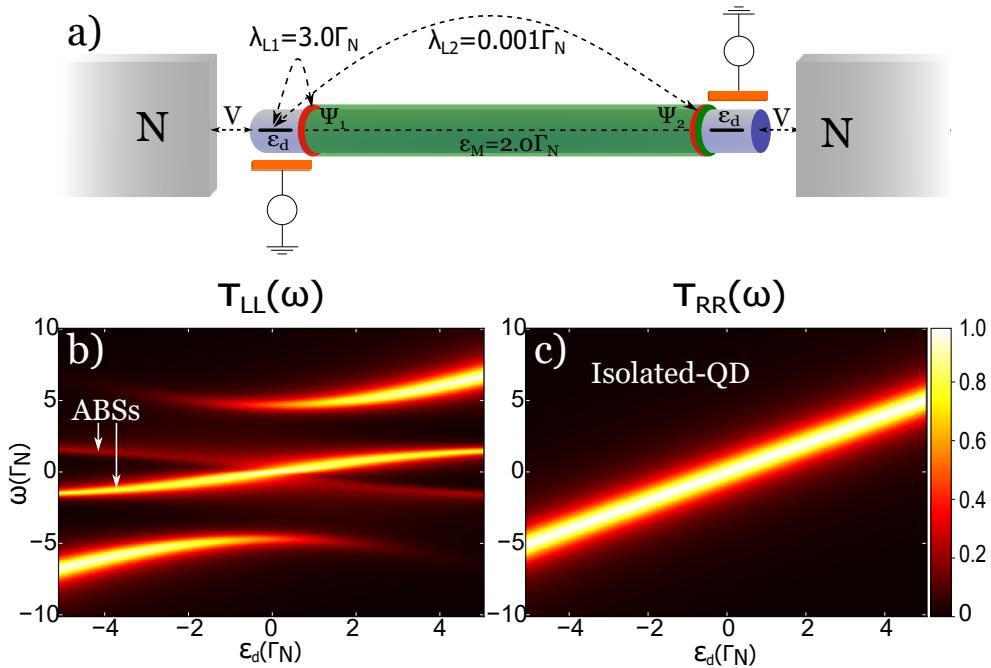


Figura 4.2: (a) Modelo representado os acoplamentos do sistema, onde se tem o QD da esquerda acoplado a ambos os MBSs com amplitudes $\lambda_{L1} = 3.0\Gamma_N$ e $\lambda_{L2} = 0.001\Gamma_N$, bem como uma superposição Majorana $\varepsilon_M = 2.0\Gamma_N$; o QD da direita se encontra desacoplado do restante do sistema. O painel (b) expressa o comportamento do nível do QD e dos ABSs gerados pela superposição ε_M , onde se tem os ABSs próximo da energia zero e que se cruzam em $\varepsilon_d \sim 0.0\Gamma_N$, caracterizando o perfil *bowtie*; o painel (c) apresenta a leitura da DOS do QD da direita desacoplado sendo apenas uma linha diagonal crescente com o aumento de ε_d .

O painel (c), da Fig. 4.2, por sua vez representa a assinatura de um QD isolado, denotando apenas sua densidade de estados com a variação de ω e ε_d . Analisando os painéis (b) e (c) é evidente a modificação do que seria o nível do QD quando este se acopla ao majorana, pois quando isolado a assinatura do QD é uma linha diagonal ascendente com o aumento da energia ε_d e, quando acoplado ao MBS, seu perfil se modifica para dois níveis em formato semicircular, um abaixo e outro acima do nível de Fermi (painedel (b)).

Uma outra configuração em que se tem a superposição dos estados de Majorana dando origem aos ABSs resulta no chamado perfil *diamond*. Neste caso os acoplamentos $\lambda_{L1}, \lambda_{L2} \gg \varepsilon_M$, como apresentado pelo painel (a) da Fig. 4.3, em que o acoplamento entre o QD da esquerda e os MBSs Ψ_1 e Ψ_2 , $\lambda_{L1} = 3.0\Gamma_N$ e $\lambda_{L2} = 1.5\Gamma_N$, respectivamente, são muito maiores que a superposição dos Majoranas, $\varepsilon_M = 0.05\Gamma_N$. No perfil *diamond* a emergência dos ABSs também ocorre em torno da energia zero, porém, diferentemente do perfil *bowtie* os ABSs

não cruzam essa região de energia (nível de Fermi), como apresentado pelo painel (b). Padrões similares ao *diamond* aqui obtidos foram recentemente observados experimentalmente [20]. No painel (c) da Fig. 4.3, assim como para a Fig. 4.2, está representado o caso do QD da direita isolado do sistema e o comparando com o painel (b) nota-se novamente a modificação no perfil do nível do QD em semiarcos, igualmente ao acontecido para o caso *bowtie*.

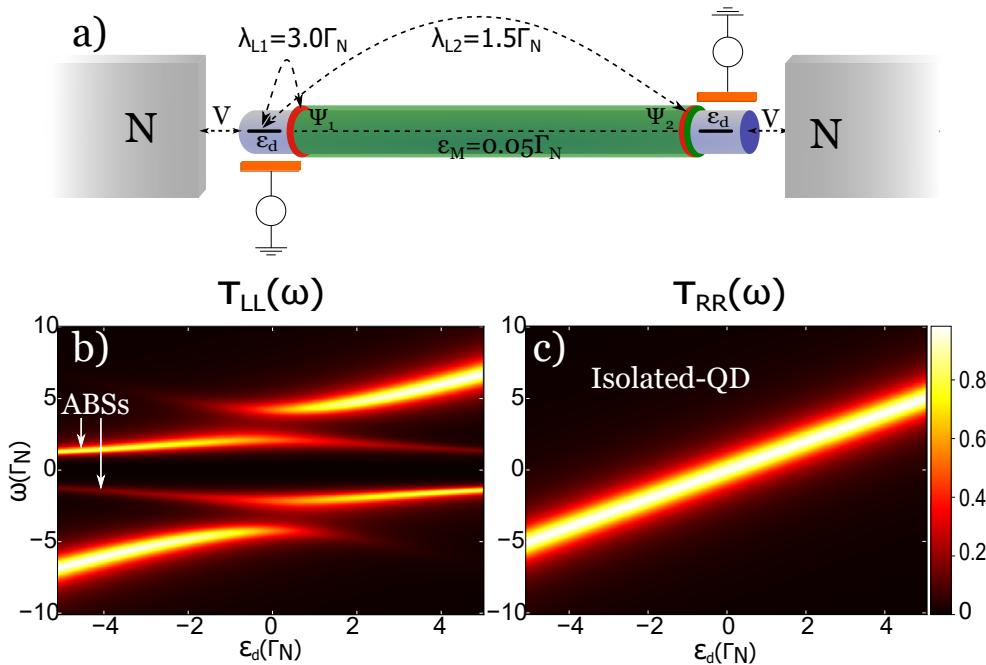


Figura 4.3: (a) Representação esquemática com os acoplamentos do sistema, o QD da esquerda se acopla a ambos os MBSs com amplitudes $\lambda_{L1} = 3.0\Gamma_N$ e $\lambda_{L2} = 1.5\Gamma_N$, já a superposição Majorana $\varepsilon_M = 0.05\Gamma_N$; o QD da direita se encontra desacoplado do restante do sistema. O comportamento do nível do QD e dos ABSs é expresso pelo painel (b), as duas ressonâncias tem maior separação entre si em $\varepsilon_d \sim 0$; o painel (c) novamente apresenta a leitura da DOS do QD isolado a direita, uma linha diagonal crescente com o aumento de ε_d .

Até agora foram apresentados casos em que não se tem, essencialmente, a formação molecular. O primeiro caso representa o acoplamento de cada QD com o MBS mais próximo, situação em que se tem os férmons de Majorana não locais. Os dois outros casos, *bowtie* e *diamond*, estão relacionados não somente ao acoplamento entre os QD-MBS, mas também ao quão superpostos os Majoranas estão, característica essa que atribui a separação do estado zero, a ZBA da (Fig. 4.1), em dois ABSs e seus respectivos perfis.

Os perfis *bowtie* e *diamond* obtidos e apresentados nas Figs. 4.2 e 4.3 já

foram verificados experimentalmente como mostrado na Ref. [20], e são apresentados pela Fig. 4.4. O painel (a) apresenta a plotagem da condutância diferencial com o espectro do modelo, descrevendo o comportamento do nível do QD e dos ABSs do fio com um campo magnético aplicado equivalente a $B = 0.5$ T. O perfil é mais notório para valores próximos a $V_{dot} \sim 1.75$ V. Com um ajuste na escala de cores e uma representação esquemática em linhas vermelhas para destacar os níveis do QD e os ABSs, o painel (b) reforça o que pode ser entendido como perfil *bowtie* e também expressa, experimentalmente, certo grau de não localidade do sistema, que se relaciona com a superposição dos férmons de Majorana.

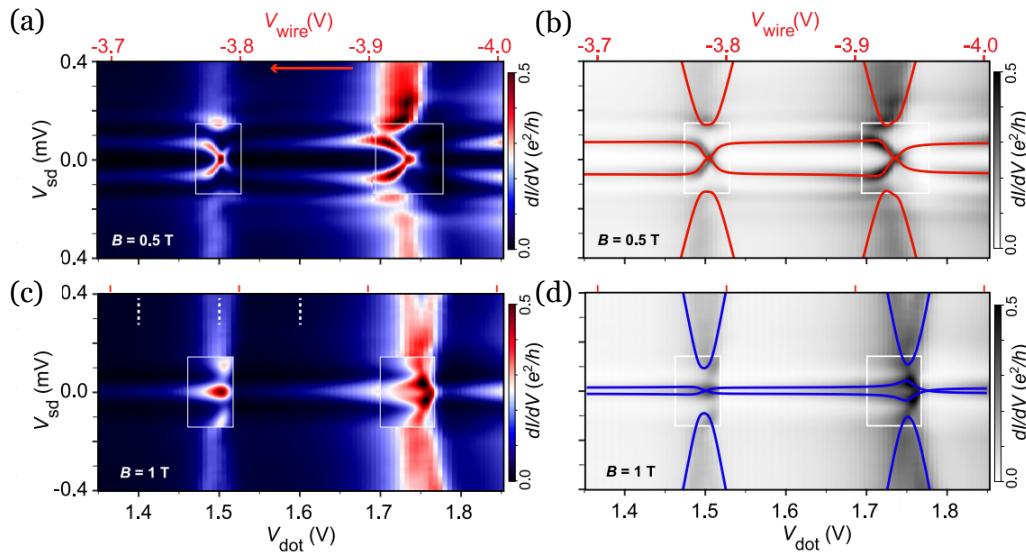


Figura 4.4: (a) Condutância diferencial para $B = 0.5$ T, caracteriza o desdobramento da ZBA em dois ABSs com padrões característicos do perfil *bowtie*, próximo da energia zero do sistema. (c) Mesma análise que a apresentada pelo painel (a), porém com $B = 1.0$ T, o comportamento dos ABSs próximos da energia zero do sistema expressam características referentes ao perfil *diamond* (as caixas representam medidas realizadas em resolução mais alta). Os painéis (b) e (d) expressão os mesmos comportamentos dos apresentados em (a) e (c), porém com um ajuste na escala de cores e um delineamento mais bem definido dos perfis (linhas azul e vermelha) [20].

Na situação em que $B = 1.0$ T, painel (c), tem-se o surgimento de ressonâncias próximas à energia zero, mais evidentes para $V_{dot} \sim 1.75$ V, que, para o sistema dessa dissertação, aparecem como um desdobramento da ZBA e caracterizam o perfil *diamond*. Perfil este que é destacado pelo painel (d), em que se faz uma releitura, modificando as cores para uma escala de cinza e com os níveis do QD e os ABSs representados por linhas em azul, o que facilita a visualização do

sistema [20]. Vale ressaltar que o aparato experimental para a realização destas análises é apresentado pela Fig. 1.3. O sistema experimental, cujos resultados foram apresentados na Fig. 4.4, não reproduz o caso de vazamento Majorana para o QD, a ZBA, pois sempre há uma superposição entre os férmiões de Majorana como resultado do tamanho do fio, que não é grande o suficiente para isolá-los em suas bordas.

No tópico seguinte, a formação molecular será explorada, pois ambos os QDs estarão acoplados a ambos os MBSs e dessa forma emergirão os estados moleculares ligante e antiligante.

4.2 Caso 2: Proposta de Formação molecular

Nesta seção será abordada a formação molecular. O sistema aqui abordado possui os férmons de Majorana como mediadores da interação molecular, diferentemente do caso apresentado na seção 2.4, em que a comunicação entre os elementos que compõem a molécula, os QDs, é realizada por um termo de *hopping* usual.

O sistema aqui apresentado foi denominado de *double diamond*, pois ambos os QDs estão acoplados aos férmons de Majorana na configuração correspondente ao perfil *diamond*. Desta forma, $QD_1 \rightarrow \lambda_{L1}, \lambda_{L2} \gg \varepsilon_M$ e $QD_2 \rightarrow \lambda_{R1}, \lambda_{R2} \gg \varepsilon_M$. Como apresentado pela Fig. 4.5, os acoplamentos entre os QDs e seus primeiros vizinhos são $\lambda_{L1} = \lambda_{R1} = 3.0\Gamma_N$, já o acoplamento com os segundos vizinhos $\lambda_{L2} = \lambda_{R2} = 1.5\Gamma_N$, sendo que a superposição entre os férmons de Majorana Ψ_1 e Ψ_2 é dada por $\varepsilon_M = 0.05\Gamma_N$. Vale lembrar que o parâmetro de Anderson Γ_N é uma relação que leva em consideração o acoplamento com os terminais metálicos, logo a amplitude de hibridização V está inserida neste termo.

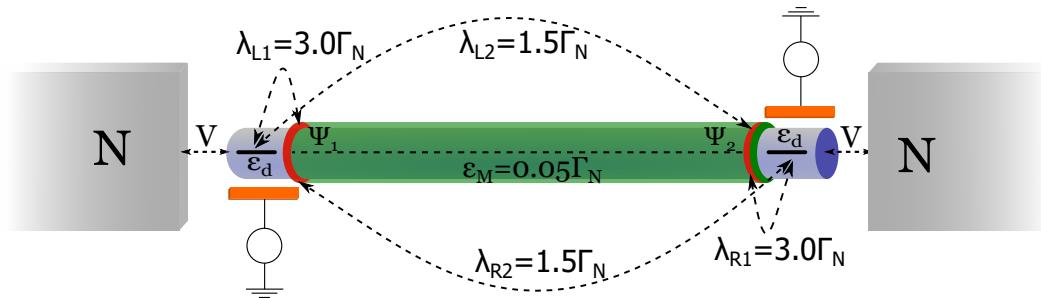


Figura 4.5: Representação esquemática dos acoplamentos para o aqui denominado perfil *double diamond*. Em que os QDs e os férmons de Majorana Ψ_1 e Ψ_2 , tidos como primeiros e segundos vizinhos são iguais, ou seja, as amplitudes de acoplamento dos QDs são simétricas e a superposição dos MBSs é $\varepsilon_M = 0.05\Gamma_N$.

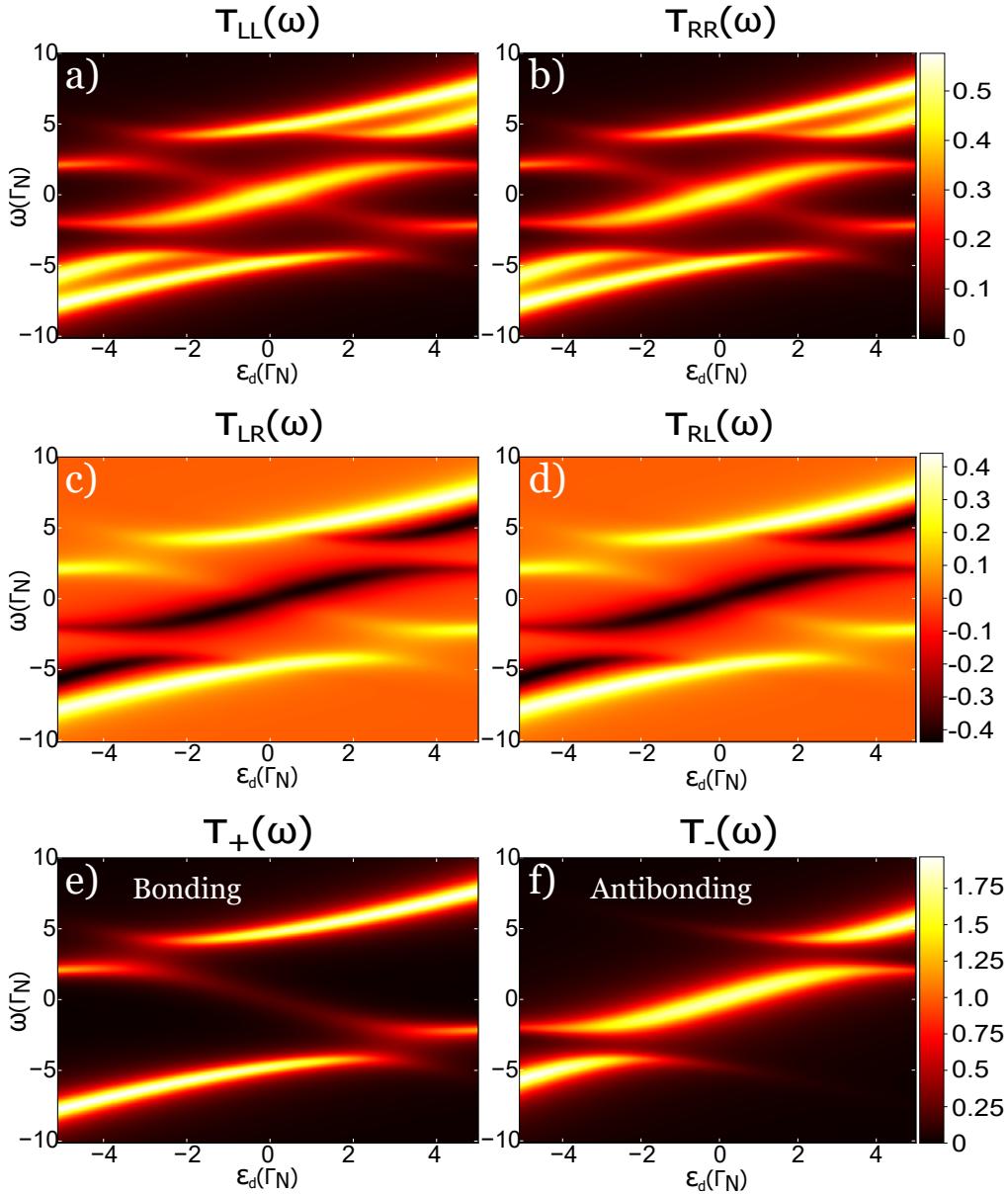


Figura 4.6: Gráfico da DOS em função da frequência espectral ω e da energia do QD ε_d . Os painéis (a) e (b) são as leituras feitas para os QDs da esquerda e direita no regime molecular com os acoplamentos apresentados pela Fig. 4.5, onde nota-se o desdobramento dos níveis dos QDs e a interferência entre os ABSs. Os painéis (c) e (d) apresentam os termos de interferência entre o QD da esquerda e direita, τ_{LR} e τ_{RL} , em que se tem perfis antirresonantes e ressonantes. Os perfis dos QDs isolados (a) e (b) ao serem combinados com os padrões de interferência (c) e (d), dão origem aos chamados estados moleculares ligante e antiligante, painéis (e) e (f).

Os painéis (a) e (b) da Fig. 4.6, apresentam a DOS para os terminais da esquerda τ_{LL} e da direita τ_{RR} . Nota-se que os níveis dos QDs (semiarcos) são

desdobrados em dois novos níveis, como no caso apresentado para a molécula usual presente na Fig. 2.4, em que os níveis dos QDs dão origem a dois novos níveis e, estes desdobramentos somados a perfis de interferência, resultam na formação dos estados moleculares ligante e antiligante.

Como se pode notar nos painéis (a) e (b), por mais que seja contraintuitivo, não há o desdobramento dos ABSs em quatro picos, como seria esperado quando há formação molecular. Como apresenta a Fig. 4.3, os mesmos dois estados presentes em torno de zero para o caso *diamond* isolado permanecem após o processo de formação da molécula, porém estes ABSs interferem entre si dando origem a um perfil que se assemelha ao *bowtie*, até mesmo no ponto de cruzamento dos estados, que se dá próximo de $\varepsilon_d \approx 0.0\Gamma_N$, mas não se desdobram originando quatro picos como seria esperado e previsto pelo processo de formação molecular usual. Os estados relacionados aos QDs, como comentado, desdobram normalmente no processo de formação da molécula resultando em dois semiarcos acima e dois abaixo do nível de Fermi. As plotagens presentes nos painéis (c) e (d), τ_{LR} e τ_{RL} , representam os perfis de interferências entre os QDs e são compostos por ressonâncias e antirressonâncias, como é de se esperar para um sistema em que se tem a troca de partículas entre os átomos que formam a molécula. Ambos os painéis são idênticos devido ao fato de que os átomos possuem os mesmos acoplamentos e a mesma energia ε_d .

Os painéis (e) e (f) da Fig. 4.6, τ_+ e τ_- , apresentam os perfilamentos dos estados moleculares ligante e antiligante do sistema molecular formado pelo acoplamento dos QDs aos férmons de Majorana. Tais estados moleculares podem ser obtidos por meio da relação simétrica, onde $\tau_+ = \tau_{LL} + \tau_{RR} + (\tau_{LR} + \tau_{RL})$ descreve o estados molecular ligante, e da relação antissimétrica, em que $\tau_- = \tau_{LL} + \tau_{RR} - (\tau_{LR} + \tau_{RL})$ descreve o estado molecular antiligante.

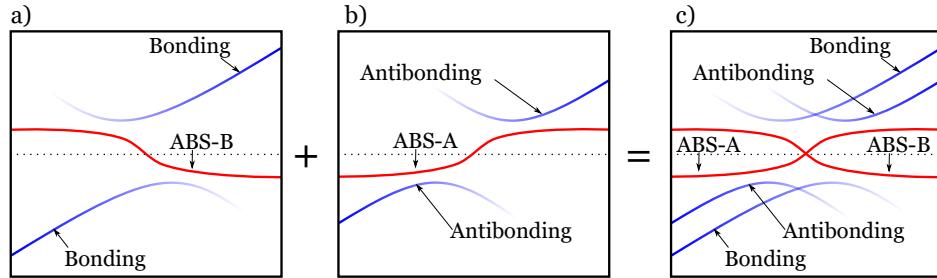


Figura 4.7: Representação ilustrativa dos (a) estados moleculares ligantes para os ABSs (ABS-B, em linha vermelha) e para os níveis desdobrados dos QDs (linhas azuis); (b) estados moleculares antiligantes relativos aos ABSs (ABS-A, linha vermelha) e aos níveis dos QDs (linhas azuis). O painel (c) traz a junção dos painéis (a) e (b), resultando nos perfis moleculares lidos em cada QD, τ_{LL} e τ_{RR} , da Fig. 4.6.

É interessante observar que não somente os estados dos QDs assumem os perfis ligante e antiligante, como também os ABSs se modificam ao ponto de que cada um deles representa um estado molecular, mesmo não sofrendo desdobramento. A Fig. 4.7 apresenta um esquema ilustrativo onde se tem somente as combinações ligante e antiligante, painéis (a) e (b). Nota-se que não somente os níveis dos QDs (linhas azuis) como também os ABSs assumem características de estado molecular ligante (ABS-B) e antiligante (ABS-A), tendo seus perfis demarcados por linhas vermelhas. A soma dos painéis (a) e (b) da Fig. 4.7, resulta na leitura da DOS para os QDs da esquerda e direita, representados pelos painéis (a) e (b) ou τ_{LL} e τ_{RR} presentes na Fig. 4.6.

A Fig. 4.8 apresenta o desmembramento da leitura para o QD da esquerda e direita, painéis (a) e (b) da Fig. 4.6, nas bases moleculares ligante $\tau_{\uparrow\uparrow}$ (a) e antiligante $\tau_{\downarrow\downarrow}$ (b), assim como nos termos de interferência que se mostram presentes $\tau_{\downarrow\uparrow}$ e $\tau_{\uparrow\downarrow}$, painéis (c) e (d).

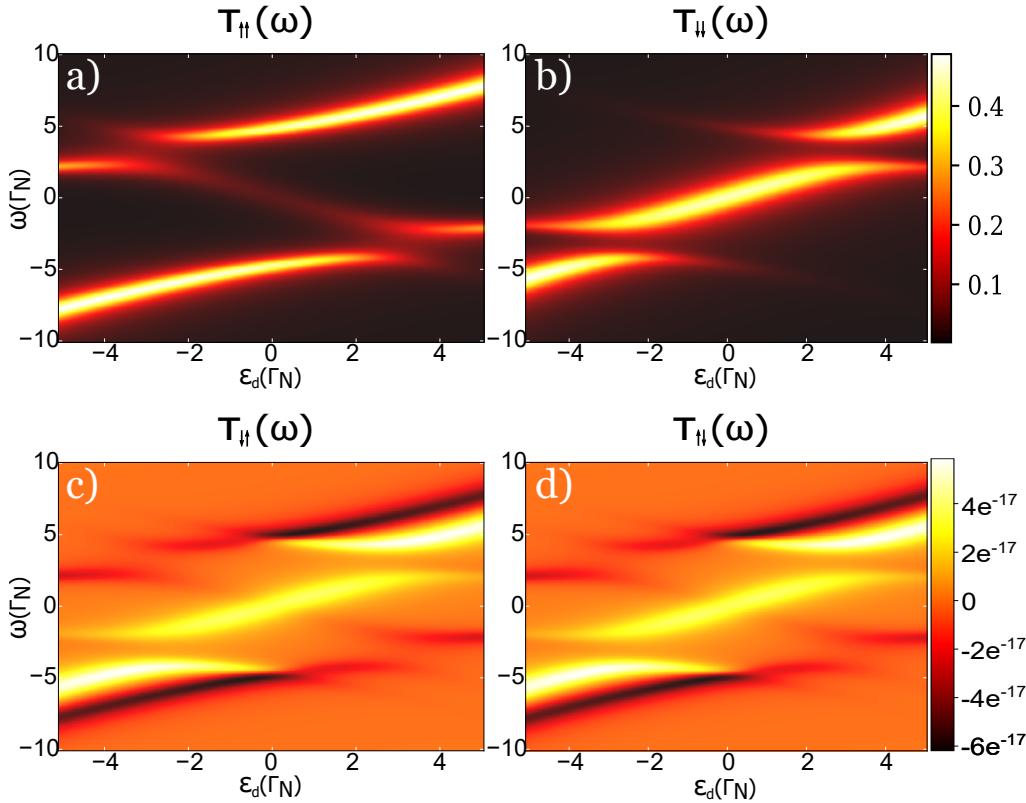


Figura 4.8: Assinaturas dos QDs da esquerda e direita separados em plotagens relativas aos estados moleculares ligante e antiligante, $\tau_{\uparrow\uparrow}$ e $\tau_{\downarrow\downarrow}$, que são iguais devido ao fato possuírem a mesma energia e os mesmos acoplamentos. Os painéis (c) e (d), por sua vez, representam os termos mistos para os estados ligante e antiligante ($\tau_{\uparrow\downarrow}$ e $\tau_{\downarrow\uparrow}$) e suas amplitudes podem ser negligenciadas, pois escalam com 10^{-17} .

Nota-se que os estados moleculares ligante e antiligante são os mesmos reapresentados pelo esquema na Fig. 4.7, em que não há perfis mistos. Desta forma, é possível afirmar, com base na Fig. 4.8, que não existe contribuição oriunda de perfis moleculares mistos, pois estes escalam com DOS na ordem de 10^{-17} . A Fig. 4.9, por sua vez representa o desmembramento dos termos cruzados τ_{LR} e τ_{RL} , painéis (c) e (d) apresentados na Fig. 4.6, nos estados moleculares. Como se pode notar nestes termos cruzados, o estado molecular ligante $\tau_{\uparrow\uparrow}$ permanece como ressonâncias, tanto no nível dos QDs quanto para o ABS-B. Já para o estado molecular antiligante $\tau_{\downarrow\downarrow}$, painel (b), os níveis do QD e o ABS-A são as antirressonâncias responsáveis pela aniquilação dos estados moleculares antiligantes quando o perfil molecular plotado for ligante, $\tau_+ = \tau_{LL} + \tau_{RR} + (\tau_{LR} + \tau_{RL})$, painel (e) da Fig. 4.6. Ao se considerar o estado molecular antiligante que é expresso em função da relação $\tau_- = \tau_{LL} + \tau_{RR} - (\tau_{LR} + \tau_{RL})$, as ressonâncias e

antirressonâncias na Fig. 4.9, alteram entre os perfis, ou seja, $\tau_{\uparrow\uparrow}$ passa a ser uma antirressonância e $\tau_{\downarrow\downarrow}$ torna-se a ressonância, resultando na combinação presente no painel (f) da Fig. 4.6.

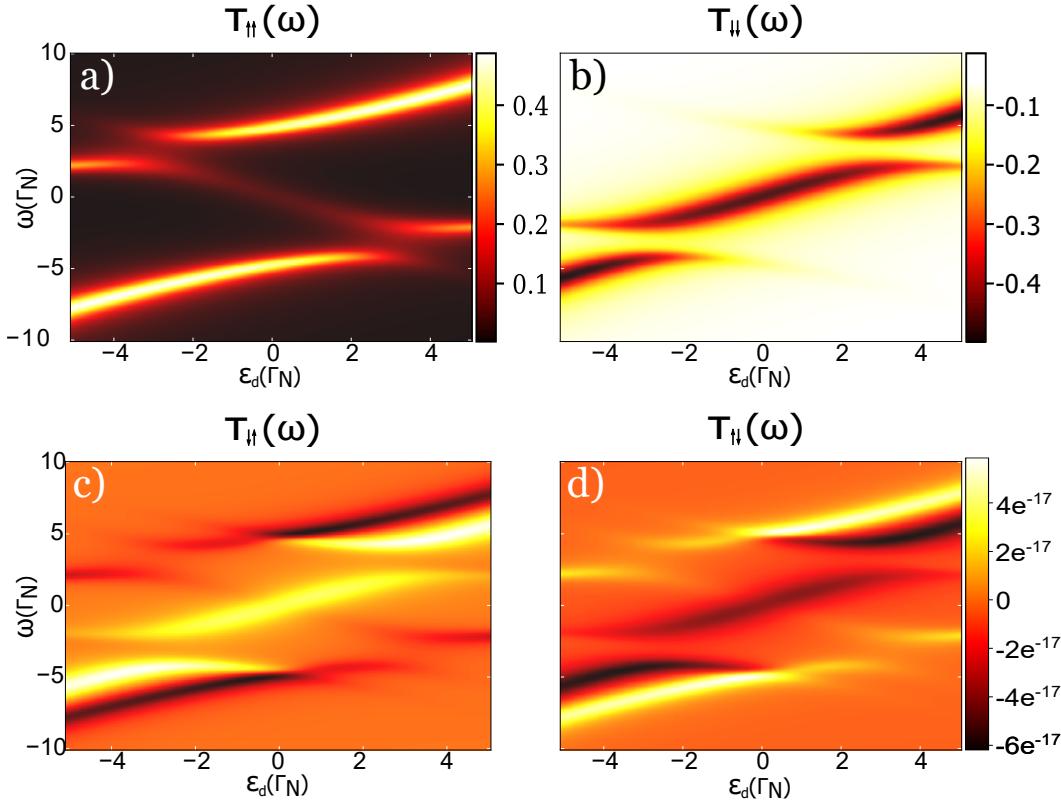


Figura 4.9: Assinaturas dos termos de interferência entre os QDs da esquerda e direita, τ_{LR} e τ_{RL} , separados em plotagens relativas aos estados moleculares ligante e antiligante, $\tau_{\uparrow\uparrow}$ e $\tau_{\downarrow\downarrow}$, que quando combinados dão origem aos painéis (c) e (d), da Fig. 4.6. Os painéis (c) e (d), por sua vez, representam os termos interferência entre os estados ligante e antiligante ($\tau_{\uparrow\downarrow}$ e $\tau_{\downarrow\uparrow}$) e suas amplitudes são negligenciáveis.

Em ambas as figuras, 4.8 e 4.9, os termos cruzados dos estados moleculares representados nos painéis (c) e (d) são desprezíveis. Este fato reforça a noção de que estados moleculares são independentes entre si, como apresentado na seção 2.4. Vale destacar que estes estudos são relevantes para que se tenha maior entendimento da formação molecular de Andreev, em sistema topológicos, por meio de férmiões de Majorana.

Capítulo 5

Conclusão

Em consonância com as propostas teóricas e experimentais para estudo, detecção e elaboração de dispositivos com férmons de Majorana, este trabalho propôs um modelo teórico composto por um nanofio de Kitaev na fase topológica em que dois QDs podem ser acoplados ao nanofio, um em cada extremidade. Partindo da premissa de acoplamento com dois QDs, o Hamiltoniano do sistema passou por uma transformação no intuito de ser reescrito em uma base molecular, para possibilitar o estudo da formação de moléculas mediadas por férmons de Majorana. Porém, mesmo o sistema passando por uma transformação para a base molecular, quando se considera o acoplamento dos Majoranas com apenas um QD o sistema é capaz de recuperar os resultados já sabidos. Desta forma este trabalho buscou estudar dois casos, sendo que o primeiro deles é composto por acoplamentos QD-MBS isolados na borda do sistema, onde não há superposição Majorana nem comunicação entre os QDs, para que se verificasse se os perfis obtidos eram compatíveis com os já bem estabelecidos na literatura. O segundo caso, por sua vez, se baseou no sistema com todos os possíveis acoplamentos, logo, com a formação molecular, porém o termo de *hopping* t_c , fundamental na formação usual de moléculas, não exerce papel algum nos resultados, sendo relevante somente a troca de informações entre os QDs realizadas pelos acoplamentos com os MBSs.

Para o primeiro caso, analisou-se analisou o sistema isolado QD-MBS com o intuito de se verificar perfis já conhecidos na literatura e, também, consolidados por trabalhos experimentais. Assim, os perfis *bowtie* e *diamond* foram verificados. É importante destacar que não é relevante se o acoplamento analisado é feito com o QD da esquerda ou direita, em ambos os casos, os mesmos perfis são obtidos. Quando somente os MBSs mais próximos estão acoplados

aos QDs e não há superposição ($\varepsilon_M = 0$), tem-se o surgimento de uma assinatura ZBA, que descreve o vazamento do MBS para o estado do QD. Nos demais casos em que se tem uma superposição finita ($\varepsilon_M \neq 0$) dos férmiões de Majorana, a ZBA se desdobra em dois ABSs que se afastam do zero. É sob estas condições que os perfis *bowtie* e *diamond* têm sua origem, porém são definidos pelas amplitudes $\lambda_{L1}, \varepsilon_M \gg \lambda_{L2}$ e $\lambda_{L1}, \lambda_{L2} \gg \varepsilon_M$, respectivamente.

No segundo caso abordado, em que se tem o acoplamento dos dois MBSs com ambos os QDs, o sistema assume perfis moleculares ligantes e antiligantes, como apresentado nas figuras da seção 4.2. O nível atômico de cada QD é desdobrado dando origem a dois perfis moleculares, abaixo e acima do nível de Fermi (semiarcos), como é de se esperar com base na formação molecular usual. Porém, o interessante é que aqui o mecanismo de troca eletrônica entre os QDs é realizado pela mediação dos férmiões de Majorana, diferentemente do caso mais comum em que se tem um termo de *hopping*. No que tange aos ABSs oriundos da superposição dos majoranas e dos acoplamentos, estes não sofrem desdobramentos, dando origem a quatro picos, porém interferem entre si alterando seus perfis iniciais de acoplamentos (*double diamond*) para um perfil que se assemelha ao *bowtie*, mas é composto por estados cuja configuração eletrônica é molecular, ou seja, um nível ligante (ABS-B) e outro antiligante (ABS-A). Moléculas como essas podem ser denominadas de moléculas de Andreev devido ao fato de serem formadas pela interferência de ABSs e exibirem configurações moleculares.

É importante destacar a importância destes estudos no contexto da Física da Matéria Condensada, valendo-se do fato que não se tem o surgimento de efeitos, como os aqui relatados, em sistema moleculares usuais.

Referências Bibliográficas

- [1] Jason Alicea. [Rep. Prog. Phys.](#) **75**, 076501, (2012).
- [2] Stevan Nadj-Perge, Ilya K. Drozdov, Jian Li, Hua Chen, Sangjun Joen, Jung-pil Seo, Allan H. MacDonald, B. Andrei Bernevig, Ali Yazdani. [Science](#) **346** (6209): 602-607 (2014).
- [3] Jonathan Engel, Petr Vogel. [Physics](#) **11** (2018).
- [4] Roman M. Lutchyn, Jay D. Sau, S. Das Sarma. [Phys. Rev. Lett.](#) **105**, 077001 (2010).
- [5] Martin Leijnse, Karsten Flensberg. [Phys. Rev. Lett.](#) **107**, 210502 (2011).
- [6] Martin Leijnse, Karsten Flensberg. [Phys. Rev. B](#) **86**, 134528 (2012).
- [7] Karsten Flensberg. [Phys. Rev. Lett.](#) **106**, 090503 (2011).
- [8] Yunshan Cao, Peiyue Wang, Gang Xiong, Ming Gong, Xin-Qi Li. [Phys. Rev. B](#) **86**, 115311 (2012).
- [9] L. S. Ricco, V. L. Campo, Jr., I. A. Shelykh, and A. C. Seridonio. [Phys. Rev. B](#) **98**, 085142 (2018).
- [10] L. S. Ricco, M. de Souza, M. S. Figueira, I. A. Shelykh, and A. C. Seridonio. [Phys. Rev. B](#) **99**, 155159 (2019).
- [11] A Yu Kitaev. [Phys.-Usp.](#) **44**, 131 (2001).
- [12] John Bardeen, Leon N. Cooper, J. Robert Schrieffer. [Phys. Rev.](#) **106**, 162 (1957).
- [13] V. Mourik, K. Zuo, S. M. Frolov, S. R. Plissard, E. P. A. M. Bakkers, L. P. Kouwenhoven. [Science](#) **336**, 6084:1003-1007 (2012).

- [14] Denis Chevallier, Paweł Szumniak, Silas Hoffman, Daniel Loss, Jelena Klinovaja. *Phys. Rev. B* **97**, 045404 (2018).
- [15] Marko J. Rančić, Silas Hoffman, Constantin Schrade, Jelena Klinovaja, and Daniel Loss. *Phys. Rev. B* **99**, 165306 (2019).
- [16] T. I. Ivanov. *Phys. Rev. B* **96**, 035417 (2017).
- [17] Eduardo J. H. Lee, Xiaocheng Jiang, Ramón Aguado, Georgios Katsaros, Charles M. Lieber, and Silvano De Franceschi. *Phys. Rev. Lett.* **109**, 186802 (2012).
- [18] Dong E. Liu, Harold U. Baranger. *Phys. Rev. B* **84**, 201308 (2011).
- [19] Rámon Aguado. *Riv. Nuovo Cimento.* **40**: 523-593 (2017).
- [20] M. T. Denge, S. Vaitiekėnas, E. Prada, P. San-Jose, J. Nygård, P. Krogstrup, R. Aguado, C. M. Marcus. *Phys. Rev. B* **98**, 085125 (2018).
- [21] Martin Leijnse, Karsten Flensberg. *Phys. Rev. B* **86**, 104511 (2012).
- [22] William Callister Júnior, David Rethwisch. *Ciência e Engenharia de Materiais: Uma Introdução*. ISBN: 9788521631033
- [23] Ivan S. Oliveira, Victor L. B. de Jesus. *Introdução à Física do Estado Sólido*. Livraria da Física, 2017. ISBN: 9788578614874.
- [24] Jie Liu, Jian Wang, and Fu-Chun Zhang. *Phys. Rev. B* **90**, 035307 (2014).
- [25] P. W. Anderson. *Phys. Rev.* **124**, 41 (1961).
- [26] P. Phillips. *Advanced Solid State Physics*. 2nd edition, Cambridge University Press, 2012. ISBN: 9781139031066
- [27] Mariana M. Odashima , Beatriz G. Prado , E. Vernek. *Rev. Bras. Ensino Fís.* **39** (2017).
- [28] H. Bruus and K. Flensberg. *Many-body Quantum Theory in Condensed Matter Physics: An Introduction*. Oxford Graduate Texts, 2004. ISBN-13: 978-0198566335.
- [29] J. Hubbard. *Proc. R. Soc. A* **276**: 238-257 (1963).
- [30] C. Lacroix. *J. Phys. F: Metal Phys.* **11**, 2389 (1981).

- [31] D. N. Zubarev. Sov. Phys. Usp. 3, 320 (1960).
- [32] Haizhou Lu, Rong Lü, Bang-fen Zhu. Phys. Rev. B 71, 235320 (2005).
- [33] E. Prada, R. Aguado, P. San-Jose. Phys. Rev. B 96, 085418 (2017).

APÊNDICE

Apêndice A

Cálculos realizados para obtenção da DOS.

A.1 Hamiltonian

A.1.1 The full Hamiltonian

The Hamiltonian of the system present in Fig. (3.1)

$$\mathcal{H} = \sum_{\alpha k} \tilde{\varepsilon}_{\alpha k} c_{\alpha k}^\dagger c_{\alpha k} + \sum_{\alpha} \varepsilon_{\alpha} d_{\alpha}^\dagger d_{\alpha} + U n_L n_R + t_C (d_L^\dagger d_R + H.c.) + V \sum_{\alpha k} (c_{\alpha k}^\dagger d_{\alpha} + H.c.) + H_{MFs}, \quad (\text{A.1})$$

where $\alpha = L/R$ and define the lead (dot) left or right. Energy $\tilde{\varepsilon}_{\alpha k} = \varepsilon_k - \mu_{\alpha}$. The number operator is given by $n_L (n_R) = d_L^\dagger d_L (d_R^\dagger d_R)$ and the Majorana's term is given by:

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{MFs} &= i\varepsilon_M \Psi_1 \Psi_2 + \lambda_{RT} (d_R - d_R^\dagger) \Psi_1 + \lambda_{LT} (d_L - d_L^\dagger) \Psi_1 \\ &+ i\lambda_{RB} (d_R + d_R^\dagger) \Psi_2 + i\lambda_{LB} (d_L + d_L^\dagger) \Psi_2, \end{aligned} \quad (\text{A.2})$$

Ψ_1 and Ψ_2 described the Majorana Bound States (MBSs) located at the edges of the wire with energy ε_M .

A.1.2 Anderson model transformation

Goal: Transform the Hamiltonian that describe a double quantum dots without spin in a pseudo-spin (molecular states) dependent Anderson model.

$$d_L = (\cos \phi) d_\uparrow - (\sin \phi) d_\downarrow, \quad (\text{A.3})$$

$$d_L^\dagger = (\cos \phi) d_\uparrow^\dagger - (\sin \phi) d_\downarrow^\dagger, \quad (\text{A.4})$$

$$d_R = (\sin \phi) d_\uparrow + (\cos \phi) d_\downarrow, \quad (\text{A.5})$$

$$d_R^\dagger = (\sin \phi) d_\uparrow^\dagger + (\cos \phi) d_\downarrow^\dagger, \quad (\text{A.6})$$

$$c_{Lk} = (\cos \phi) c_{\uparrow k} - (\sin \phi) c_{\downarrow k}, \quad (\text{A.7})$$

$$c_{Rk} = (\sin \phi) c_{\uparrow k} + (\cos \phi) c_{\downarrow k}. \quad (\text{A.8})$$

Let's do

$$\begin{aligned} \sum_k \tilde{\varepsilon}_{Lk} c_{Lk}^\dagger c_{Lk} &= \sum_k \tilde{\varepsilon}_{Lk} \left[(\cos \phi) c_{\uparrow k}^\dagger - (\sin \phi) c_{\downarrow k}^\dagger \right] \left[(\cos \phi) c_{\uparrow k} - (\sin \phi) c_{\downarrow k} \right] \\ &= \sum_k \tilde{\varepsilon}_{Lk} \{ (\cos \phi)^2 c_{\uparrow k}^\dagger c_{\uparrow k} + (\sin \phi)^2 c_{\downarrow k}^\dagger c_{\downarrow k} \} \\ &\quad - (\cos \phi) (\sin \phi) c_{\uparrow k}^\dagger c_{\downarrow k} - (\sin \phi) (\cos \phi) c_{\downarrow k}^\dagger c_{\uparrow k} \} \end{aligned} \quad (\text{A.9})$$

$$\begin{aligned} \sum_k \tilde{\varepsilon}_{Rk} c_{Rk}^\dagger c_{Rk} &= \sum_k \tilde{\varepsilon}_{Rk} \left[(\sin \phi) c_{\uparrow k}^\dagger + (\cos \phi) c_{\downarrow k}^\dagger \right] \left[(\sin \phi) c_{\uparrow k} + (\cos \phi) c_{\downarrow k} \right] \\ &= \sum_k \tilde{\varepsilon}_{Rk} \{ (\sin \phi)^2 c_{\uparrow k}^\dagger c_{\uparrow k} + (\cos \phi)^2 c_{\downarrow k}^\dagger c_{\downarrow k} \} \\ &\quad + (\sin \phi) (\cos \phi) c_{\uparrow k}^\dagger c_{\downarrow k} + (\cos \phi) (\sin \phi) c_{\downarrow k}^\dagger c_{\uparrow k} \} \end{aligned} \quad (\text{A.10})$$

$$\begin{aligned}
\varepsilon_L d_L^\dagger d_L &= \varepsilon_L \left[(\cos \phi) d_\uparrow^\dagger - (\sin \phi) d_\downarrow^\dagger \right] \left[(\cos \phi) d_\uparrow - (\sin \phi) d_\downarrow \right] \\
&= \varepsilon_L \{ (\cos \phi)^2 d_\uparrow^\dagger d_\uparrow + (\sin \phi)^2 d_\downarrow^\dagger d_\downarrow \\
&\quad - (\cos \phi) (\sin \phi) d_\uparrow^\dagger d_\downarrow - (\sin \phi) (\cos \phi) d_\downarrow^\dagger d_\uparrow \}
\end{aligned} \tag{A.11}$$

$$\begin{aligned}
\varepsilon_R d_R^\dagger d_R &= \varepsilon_R \left[(\sin \phi) d_\uparrow^\dagger + (\cos \phi) d_\downarrow^\dagger \right] \left[(\sin \phi) d_\uparrow + (\cos \phi) d_\downarrow \right] \\
&= \varepsilon_R \{ (\sin \phi)^2 d_\uparrow^\dagger d_\uparrow + (\cos \phi)^2 d_\downarrow^\dagger d_\downarrow \\
&\quad + (\sin \phi) (\cos \phi) d_\uparrow^\dagger d_\downarrow + (\cos \phi) (\sin \phi) d_\downarrow^\dagger d_\uparrow \}
\end{aligned} \tag{A.12}$$

$$\begin{aligned}
V \sum_k (c_{Lk}^\dagger d_L + d_L^\dagger c_{Lk}) &= V \sum_k \{ \left[(\cos \phi) c_{\uparrow k}^\dagger - (\sin \phi) c_{\downarrow k}^\dagger \right] \left[(\cos \phi) d_\uparrow - (\sin \phi) d_\downarrow \right] \\
&\quad + \left[(\cos \phi) d_\uparrow^\dagger - (\sin \phi) d_\downarrow^\dagger \right] \left[(\cos \phi) c_{\uparrow k} - (\sin \phi) c_{\downarrow k} \right] \} \\
&= V \sum_k \{ (\cos \phi)^2 c_{\uparrow k}^\dagger d_\uparrow + (\sin \phi)^2 c_{\downarrow k}^\dagger d_\downarrow \\
&\quad - (\cos \phi) (\sin \phi) c_{\uparrow k}^\dagger d_\downarrow - (\sin \phi) (\cos \phi) c_{\downarrow k}^\dagger d_\uparrow \\
&\quad + (\cos \phi)^2 d_\uparrow^\dagger c_{\uparrow k} + (\sin \phi)^2 d_\downarrow^\dagger c_{\downarrow k} \\
&\quad - (\cos \phi) (\sin \phi) d_\uparrow^\dagger c_{\downarrow k} - (\sin \phi) (\cos \phi) d_\downarrow^\dagger c_{\uparrow k} \\
&= V \sum_k \{ (\cos \phi)^2 c_{\uparrow k}^\dagger d_\uparrow + (\cos \phi)^2 d_\uparrow^\dagger c_{\uparrow k} \\
&\quad - (\cos \phi) (\sin \phi) c_{\uparrow k}^\dagger d_\downarrow - (\sin \phi) (\cos \phi) c_{\downarrow k}^\dagger d_\uparrow \\
&\quad - (\cos \phi) (\sin \phi) d_\uparrow^\dagger c_{\downarrow k} - (\sin \phi) (\cos \phi) d_\downarrow^\dagger c_{\uparrow k} \\
&\quad + (\sin \phi)^2 c_{\downarrow k}^\dagger d_\downarrow + (\sin \phi)^2 d_\downarrow^\dagger c_{\downarrow k} \}
\end{aligned} \tag{A.13}$$

$$\begin{aligned}
V \sum_k \left(c_{Rk}^\dagger d_R + d_R^\dagger c_{Rk} \right) &= V \sum_k \left\{ \left[(\sin \phi) c_{\uparrow k}^\dagger + (\cos \phi) c_{\downarrow k}^\dagger \right] \left[(\sin \phi) d_\uparrow + (\cos \phi) d_\downarrow \right] \right. \\
&\quad \left. + \left[(\sin \phi) d_\uparrow^\dagger + (\cos \phi) d_\downarrow^\dagger \right] \left[(\sin \phi) c_{\uparrow k} + (\cos \phi) c_{\downarrow k} \right] \right\} \\
&= V \sum_k \left\{ (\sin \phi)^2 c_{\uparrow k}^\dagger d_\uparrow + (\cos \phi)^2 c_{\downarrow k}^\dagger d_\downarrow \right. \\
&\quad + (\sin \phi) (\cos \phi) c_{\uparrow k}^\dagger d_\downarrow + (\cos \phi) (\sin \phi) c_{\downarrow k}^\dagger d_\uparrow \\
&\quad + (\sin \phi)^2 d_\uparrow^\dagger c_{\uparrow k} + (\cos \phi)^2 d_\downarrow^\dagger c_{\downarrow k} \\
&\quad \left. + (\sin \phi) (\cos \phi) d_\uparrow^\dagger c_{\downarrow k} + (\cos \phi) (\sin \phi) d_\downarrow^\dagger c_{\uparrow k} \right\} \\
&= V \sum_k \left\{ (\cos \phi)^2 c_{\downarrow k}^\dagger d_\downarrow + (\cos \phi)^2 d_\downarrow^\dagger c_{\downarrow k} \right. \\
&\quad + (\sin \phi) (\cos \phi) c_{\uparrow k}^\dagger d_\downarrow + (\cos \phi) (\sin \phi) c_{\downarrow k}^\dagger d_\uparrow \\
&\quad + (\sin \phi) (\cos \phi) d_\uparrow^\dagger c_{\downarrow k} + (\cos \phi) (\sin \phi) d_\downarrow^\dagger c_{\uparrow k} \\
&\quad \left. + (\sin \phi)^2 c_{\uparrow k}^\dagger d_\uparrow + (\sin \phi)^2 d_\uparrow^\dagger c_{\uparrow k} \right\} \tag{A.14}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
t_C \left(d_L^\dagger d_R + d_R^\dagger d_L \right) &= t_C \left\{ \left[(\cos \phi) d_\uparrow^\dagger - (\sin \phi) d_\downarrow^\dagger \right] \left[(\sin \phi) d_\uparrow + (\cos \phi) d_\downarrow \right] \right. \\
&\quad \left. + \left[(\sin \phi) d_\uparrow^\dagger + (\cos \phi) d_\downarrow^\dagger \right] \left[(\cos \phi) d_\uparrow - (\sin \phi) d_\downarrow \right] \right\} \\
&= t_C \left\{ (\cos \phi)^2 d_\uparrow^\dagger d_\downarrow - (\sin \phi)^2 d_\downarrow^\dagger d_\uparrow \right. \\
&\quad + (\cos \phi) (\sin \phi) d_\uparrow^\dagger d_\uparrow - (\sin \phi) (\cos \phi) d_\downarrow^\dagger d_\downarrow \\
&\quad + (\cos \phi)^2 d_\downarrow^\dagger d_\uparrow - (\sin \phi)^2 d_\uparrow^\dagger d_\downarrow \\
&\quad \left. + (\sin \phi) (\cos \phi) d_\uparrow^\dagger d_\uparrow - (\cos \phi) (\sin \phi) d_\downarrow^\dagger d_\downarrow \right\} \\
&= t_C \left\{ \left[(\cos \phi)^2 - (\sin \phi)^2 \right] d_\uparrow^\dagger d_\downarrow + \left[(\cos \phi)^2 - (\sin \phi)^2 \right] d_\downarrow^\dagger d_\uparrow \right. \\
&\quad \left. + 2 (\cos \phi) (\sin \phi) d_\uparrow^\dagger d_\uparrow - 2 (\cos \phi) (\sin \phi) d_\downarrow^\dagger d_\downarrow \right\} \tag{A.15}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
Un_L n_R &= Ud_L^\dagger d_L \left(d_R^\dagger d_R \right) \\
&= U \left[(\cos \phi) d_\uparrow^\dagger - (\sin \phi) d_\downarrow^\dagger \right] \left[(\cos \phi) d_\uparrow - (\sin \phi) d_\downarrow \right] \times \\
&\quad \times \left[(\sin \phi) d_\uparrow^\dagger + (\cos \phi) d_\downarrow^\dagger \right] \left[(\sin \phi) d_\uparrow + (\cos \phi) d_\downarrow \right] \\
&= U \left[(\cos \phi)^2 d_\uparrow^\dagger d_\uparrow + (\sin \phi)^2 d_\downarrow^\dagger d_\downarrow - (\cos \phi) (\sin \phi) d_\uparrow^\dagger d_\downarrow - (\sin \phi) (\cos \phi) d_\downarrow^\dagger d_\uparrow \right] \times \\
&\quad \times \left[(\sin \phi)^2 d_\uparrow^\dagger d_\uparrow + (\cos \phi)^2 d_\downarrow^\dagger d_\downarrow + (\sin \phi) (\cos \phi) d_\uparrow^\dagger d_\downarrow + (\cos \phi) (\sin \phi) d_\downarrow^\dagger d_\uparrow \right] \\
&= U \left[(\cos \phi)^4 d_\uparrow^\dagger d_\uparrow d_\downarrow^\dagger d_\downarrow + (\cos \phi)^2 (\sin \phi)^2 d_\uparrow^\dagger d_\uparrow d_\uparrow^\dagger d_\uparrow + (\sin \phi) (\cos \phi)^3 d_\uparrow^\dagger d_\uparrow d_\uparrow^\dagger d_\downarrow + (\cos \phi)^3 (\sin \phi) d_\uparrow^\dagger d_\uparrow d_\downarrow^\dagger d_\uparrow \right] \\
&+ U \left[(\sin \phi)^4 d_\downarrow^\dagger d_\downarrow d_\uparrow^\dagger d_\uparrow + (\sin \phi)^2 (\cos \phi)^2 d_\downarrow^\dagger d_\downarrow d_\downarrow^\dagger d_\downarrow + (\sin \phi)^3 (\cos \phi) d_\downarrow^\dagger d_\downarrow d_\uparrow^\dagger d_\downarrow + (\cos \phi) (\sin \phi)^3 d_\downarrow^\dagger d_\downarrow d_\downarrow^\dagger d_\uparrow \right] \\
&+ U[-(\cos \phi) (\sin \phi)^3 d_\uparrow^\dagger d_\downarrow d_\uparrow^\dagger d_\uparrow - (\cos \phi)^3 (\sin \phi) d_\uparrow^\dagger d_\downarrow d_\downarrow^\dagger d_\downarrow - (\cos \phi)^2 (\sin \phi)^2 d_\uparrow^\dagger d_\downarrow d_\uparrow^\dagger d_\downarrow \\
&- (\sin \phi)^2 (\cos \phi)^2 d_\uparrow^\dagger d_\downarrow d_\downarrow^\dagger d_\uparrow] \\
&+ U[-(\sin \phi)^3 (\cos \phi) d_\downarrow^\dagger d_\uparrow d_\uparrow^\dagger d_\uparrow - (\sin \phi) (\cos \phi)^3 d_\downarrow^\dagger d_\uparrow d_\downarrow^\dagger d_\downarrow - (\sin \phi)^2 (\cos \phi)^2 d_\downarrow^\dagger d_\uparrow d_\uparrow^\dagger d_\downarrow \\
&- (\sin \phi)^2 (\cos \phi)^2 d_\downarrow^\dagger d_\uparrow d_\downarrow^\dagger d_\uparrow]
\end{aligned} \tag{A.16}$$

Adding Eq.(A.9) and Eq.(A.10)

$$\sum_k \tilde{\varepsilon}_{Lk} c_{Lk}^\dagger c_{Lk} + \sum_k \tilde{\varepsilon}_{Rk} c_{Rk}^\dagger c_{Rk} =$$

$$\begin{aligned}
&= \sum_k \tilde{\varepsilon}_{Lk} \{ (\cos \phi)^2 c_{\uparrow k}^\dagger c_{\uparrow k} + (\sin \phi)^2 c_{\downarrow k}^\dagger c_{\downarrow k} \\
&- (\cos \phi) (\sin \phi) c_{\uparrow k}^\dagger c_{\downarrow k} - (\sin \phi) (\cos \phi) c_{\downarrow k}^\dagger c_{\uparrow k} \} \\
&+ \sum_k \tilde{\varepsilon}_{Rk} \{ (\sin \phi)^2 c_{\uparrow k}^\dagger c_{\uparrow k} + (\cos \phi)^2 c_{\downarrow k}^\dagger c_{\downarrow k} \\
&+ (\sin \phi) (\cos \phi) c_{\uparrow k}^\dagger c_{\downarrow k} + (\cos \phi) (\sin \phi) c_{\downarrow k}^\dagger c_{\uparrow k} \} \\
\\
&= \sum_k \{ [\tilde{\varepsilon}_{Lk} (\cos \phi)^2 c_{\uparrow k}^\dagger c_{\uparrow k} + \tilde{\varepsilon}_{Lk} (\sin \phi)^2 c_{\downarrow k}^\dagger c_{\downarrow k} \\
&- \tilde{\varepsilon}_{Lk} (\cos \phi) (\sin \phi) c_{\uparrow k}^\dagger c_{\downarrow k} - \tilde{\varepsilon}_{Lk} (\sin \phi) (\cos \phi) c_{\downarrow k}^\dagger c_{\uparrow k}] \\
&+ [\tilde{\varepsilon}_{Rk} (\sin \phi)^2 c_{\uparrow k}^\dagger c_{\uparrow k} + \tilde{\varepsilon}_{Rk} (\cos \phi)^2 c_{\downarrow k}^\dagger c_{\downarrow k} \\
&+ \tilde{\varepsilon}_{Rk} (\sin \phi) (\cos \phi) c_{\uparrow k}^\dagger c_{\downarrow k} + \tilde{\varepsilon}_{Rk} (\cos \phi) (\sin \phi) c_{\downarrow k}^\dagger c_{\uparrow k}] \} \\
\\
&= \sum_k \{ [\tilde{\varepsilon}_{Lk} (\cos \phi)^2 + \tilde{\varepsilon}_{Rk} (\sin \phi)^2] c_{\uparrow k}^\dagger c_{\uparrow k} + [\tilde{\varepsilon}_{Lk} (\sin \phi)^2 + \tilde{\varepsilon}_{Rk} (\cos \phi)^2] c_{\downarrow k}^\dagger c_{\downarrow k} \\
&+ (\tilde{\varepsilon}_{Rk} - \tilde{\varepsilon}_{Lk}) (\cos \phi) (\sin \phi) c_{\uparrow k}^\dagger c_{\downarrow k} + (\tilde{\varepsilon}_{Rk} - \tilde{\varepsilon}_{Lk}) (\sin \phi) (\cos \phi) c_{\downarrow k}^\dagger c_{\uparrow k} \} \tag{A.17}
\end{aligned}$$

And Eq. (A.11) and (A.12)

$$\begin{aligned}
\varepsilon_L d_L^\dagger d_L + \varepsilon_R d_R^\dagger d_R &= \varepsilon_L \{ (\cos \phi)^2 d_\uparrow^\dagger d_\uparrow + (\sin \phi)^2 d_\downarrow^\dagger d_\downarrow \\
&- (\cos \phi) (\sin \phi) d_\uparrow^\dagger d_\downarrow - (\sin \phi) (\cos \phi) d_\downarrow^\dagger d_\uparrow \} \\
&+ \varepsilon_R \{ (\sin \phi)^2 d_\uparrow^\dagger d_\uparrow + (\cos \phi)^2 d_\downarrow^\dagger d_\downarrow \\
&+ (\sin \phi) (\cos \phi) d_\uparrow^\dagger d_\downarrow + (\cos \phi) (\sin \phi) d_\downarrow^\dagger d_\uparrow \} \\
\\
&= [\varepsilon_L (\cos \phi)^2 + \varepsilon_R (\sin \phi)^2] d_\uparrow^\dagger d_\uparrow + [\varepsilon_L (\sin \phi)^2 + \varepsilon_R (\cos \phi)^2] d_\downarrow^\dagger d_\downarrow \\
&+ (\varepsilon_R - \varepsilon_L) (\cos \phi) (\sin \phi) d_\uparrow^\dagger d_\downarrow + (\varepsilon_R - \varepsilon_L) (\cos \phi) (\sin \phi) d_\downarrow^\dagger d_\uparrow \tag{A.18}
\end{aligned}$$

With the hybridization terms, we get

$$\begin{aligned}
& V \sum_k \left(c_{Lk}^\dagger d_L + d_L^\dagger c_{Lk} \right) + V \sum_k \left(c_{Rk}^\dagger d_R + d_R^\dagger c_{Rk} \right) = \\
& = V \sum_k \{ (\cos \phi)^2 c_{\uparrow k}^\dagger d_\uparrow + (\cos \phi)^2 d_\uparrow^\dagger c_{\uparrow k} \\
& - (\cos \phi) (\sin \phi) c_{\uparrow k}^\dagger d_\downarrow - (\sin \phi) (\cos \phi) c_{\downarrow k}^\dagger d_\uparrow \\
& - (\cos \phi) (\sin \phi) d_\uparrow^\dagger c_{\downarrow k} - (\sin \phi) (\cos \phi) d_\downarrow^\dagger c_{\uparrow k} \\
& + (\sin \phi)^2 c_{\downarrow k}^\dagger d_\downarrow + (\sin \phi)^2 d_\downarrow^\dagger c_{\downarrow k} \} \\
& + V \sum_k \{ (\cos \phi)^2 c_{\downarrow k}^\dagger d_\downarrow + (\cos \phi)^2 d_\downarrow^\dagger c_{\downarrow k} \\
& + (\sin \phi) (\cos \phi) c_{\uparrow k}^\dagger d_\downarrow + (\cos \phi) (\sin \phi) c_{\downarrow k}^\dagger d_\uparrow \\
& + (\sin \phi) (\cos \phi) d_\uparrow^\dagger c_{\downarrow k} + (\cos \phi) (\sin \phi) d_\downarrow^\dagger c_{\uparrow k} \\
& + (\sin \phi)^2 c_{\uparrow k}^\dagger d_\uparrow + (\sin \phi)^2 d_\uparrow^\dagger c_{\uparrow k} \} \\
& = V \sum_k \{ [(\cos \phi)^2 + (\sin \phi)^2] c_{\uparrow k}^\dagger d_\uparrow + [(\cos \phi)^2 + (\sin \phi)^2] d_\uparrow^\dagger c_{\uparrow k} \\
& + [(\sin \phi)^2 + (\cos \phi)^2] c_{\downarrow k}^\dagger d_\downarrow + [(\sin \phi)^2 + (\cos \phi)^2] d_\downarrow^\dagger c_{\downarrow k} \} \\
& = V \sum_k \left(c_{\uparrow k}^\dagger d_\uparrow + d_\uparrow^\dagger c_{\uparrow k} + c_{\downarrow k}^\dagger d_\downarrow + d_\downarrow^\dagger c_{\downarrow k} \right) \\
& = V \sum_{k,\sigma} \left(c_{\sigma k}^\dagger d_\sigma + d_\sigma^\dagger c_{\sigma k} \right) \tag{A.19}
\end{aligned}$$

(A.20)

Let's consider, $\varepsilon_{Rk} = \varepsilon_{Lk} = \epsilon$ and the angle

$$\tan(2\phi) = \frac{2t_C}{\Delta\epsilon}, \tag{A.21}$$

$$\sin(2\phi) = -\frac{2t_C}{\sqrt{4(t_C)^2 + (\Delta\epsilon)^2}} = 2 \sin(\phi) \cos(\phi), \tag{A.22}$$

and

$$\cos(2\phi) = -\frac{\Delta\epsilon}{\sqrt{4(t_C)^2 + (\Delta\epsilon)^2}} = \cos^2(\phi) - \sin^2(\phi) \quad (\text{A.23})$$

In the Eq. (A.17), we get

$$\begin{aligned} & \sum_k \tilde{\varepsilon}_{Lk} c_{Lk}^\dagger c_{Lk} + \sum_k \tilde{\varepsilon}_{Rk} c_{Rk}^\dagger c_{Rk} = \\ &= \sum_k \left\{ [\tilde{\varepsilon}_{Lk} (\cos \phi)^2 + \tilde{\varepsilon}_{Rk} (\sin \phi)^2] c_{\uparrow k}^\dagger c_{\uparrow k} + [\tilde{\varepsilon}_{Lk} (\sin \phi)^2 + \tilde{\varepsilon}_{Rk} (\cos \phi)^2] c_{\downarrow k}^\dagger c_{\downarrow k} \right. \\ & \quad \left. - (\tilde{\varepsilon}_{Rk} - \tilde{\varepsilon}_{Lk}) (\cos \phi) (\sin \phi) c_{\uparrow k}^\dagger c_{\downarrow k} + (\tilde{\varepsilon}_{Rk} - \tilde{\varepsilon}_{Lk}) (\sin \phi) (\cos \phi) c_{\downarrow k}^\dagger c_{\uparrow k} \right\} \\ &= \sum_k \left\{ \epsilon [(\cos \phi)^2 + (\sin \phi)^2] c_{\uparrow k}^\dagger c_{\uparrow k} + \epsilon [(\cos \phi)^2 + (\sin \phi)^2] c_{\downarrow k}^\dagger c_{\downarrow k} \right\} \\ &= \sum_k \left\{ \epsilon c_{\uparrow k}^\dagger c_{\uparrow k} + \epsilon c_{\downarrow k}^\dagger c_{\downarrow k} \right\} \\ &= \sum_k \epsilon \left\{ c_{\uparrow k}^\dagger c_{\uparrow k} + c_{\downarrow k}^\dagger c_{\downarrow k} \right\} \\ &= \sum_{k,\sigma} \epsilon c_{\sigma k}^\dagger c_{\sigma k} \quad (\text{A.24}) \end{aligned}$$

In Eq. (A.18) and (A.15)

$$\varepsilon_L d_L^\dagger d_L + \varepsilon_R d_R^\dagger d_R + t_C (d_L^\dagger d_R + d_R^\dagger d_L) =$$

$$\begin{aligned}
&= [\varepsilon_L (\cos \phi)^2 + \varepsilon_R (\sin \phi)^2] d_{\uparrow}^{\dagger} d_{\uparrow} + [\varepsilon_L (\sin \phi)^2 + \varepsilon_R (\cos \phi)^2] d_{\downarrow}^{\dagger} d_{\downarrow} \\
&+ (\varepsilon_R - \varepsilon_L) (\cos \phi) (\sin \phi) d_{\uparrow}^{\dagger} d_{\downarrow} + (\varepsilon_R - \varepsilon_L) (\cos \phi) (\sin \phi) d_{\downarrow}^{\dagger} d_{\uparrow} \\
&+ t_C [(\cos \phi)^2 - (\sin \phi)^2] d_{\uparrow}^{\dagger} d_{\downarrow} + t_C [(\cos \phi)^2 - (\sin \phi)^2] d_{\downarrow}^{\dagger} d_{\uparrow} \\
&+ 2t_C (\cos \phi) (\sin \phi) d_{\uparrow}^{\dagger} d_{\uparrow} - 2t_C (\cos \phi) (\sin \phi) d_{\downarrow}^{\dagger} d_{\downarrow} \\
\\
&= [\varepsilon_L (\cos \phi)^2 + \varepsilon_R (\sin \phi)^2] d_{\uparrow}^{\dagger} d_{\uparrow} + [\varepsilon_L (\sin \phi)^2 + \varepsilon_R (\cos \phi)^2] d_{\downarrow}^{\dagger} d_{\downarrow} \\
&- \Delta\epsilon (\cos \phi) (\sin \phi) d_{\uparrow}^{\dagger} d_{\downarrow} - \Delta\epsilon (\cos \phi) (\sin \phi) d_{\downarrow}^{\dagger} d_{\uparrow} \\
&+ t_C [(\cos \phi)^2 - (\sin \phi)^2] d_{\uparrow}^{\dagger} d_{\downarrow} + t_C [(\cos \phi)^2 - (\sin \phi)^2] d_{\downarrow}^{\dagger} d_{\uparrow} \\
&+ 2t_C (\cos \phi) (\sin \phi) d_{\uparrow}^{\dagger} d_{\uparrow} - 2t_C (\cos \phi) (\sin \phi) d_{\downarrow}^{\dagger} d_{\downarrow} \\
&= [\varepsilon_L (\cos \phi)^2 + \varepsilon_R (\sin \phi)^2] d_{\uparrow}^{\dagger} d_{\uparrow} + [\varepsilon_L (\sin \phi)^2 + \varepsilon_R (\cos \phi)^2] d_{\downarrow}^{\dagger} d_{\downarrow} \\
&+ \Delta\epsilon \frac{t_C}{\sqrt{4(t_C)^2 + (\Delta\epsilon)^2}} d_{\uparrow}^{\dagger} d_{\downarrow} + \Delta\epsilon \frac{t_C}{\sqrt{4(t_C)^2 + (\Delta\epsilon)^2}} d_{\downarrow}^{\dagger} d_{\uparrow} \\
&- t_C \frac{\Delta\epsilon}{\sqrt{4(t_C)^2 + (\Delta\epsilon)^2}} d_{\uparrow}^{\dagger} d_{\downarrow} - t_C \frac{\Delta\epsilon}{\sqrt{4(t_C)^2 + (\Delta\epsilon)^2}} d_{\downarrow}^{\dagger} d_{\uparrow} \\
&- t_C \frac{2t_C}{\sqrt{4(t_C)^2 + (\Delta\epsilon)^2}} d_{\uparrow}^{\dagger} d_{\uparrow} + t_C \frac{2t_C}{\sqrt{4(t_C)^2 + (\Delta\epsilon)^2}} d_{\downarrow}^{\dagger} d_{\downarrow}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \left\{ [\varepsilon_L (\cos \phi)^2 + \varepsilon_R (\sin \phi)^2] - \left[\frac{2(t_C)^2}{\sqrt{4(t_C)^2 + (\Delta\epsilon)^2}} \right] \right\} d_{\uparrow}^{\dagger} d_{\uparrow} \\
&+ \left\{ [\varepsilon_L (\sin \phi)^2 + \varepsilon_R (\cos \phi)^2] + \left[t_C \frac{2t_C}{\sqrt{4(t_C)^2 + (\Delta\epsilon)^2}} \right] \right\} d_{\downarrow}^{\dagger} d_{\downarrow} \\
&+ \left\{ \left[-t_C \frac{\Delta\epsilon}{\sqrt{4(t_C)^2 + (\Delta\epsilon)^2}} \right] + \left[\Delta\epsilon \frac{t_C}{\sqrt{4(t_C)^2 + (\Delta\epsilon)^2}} \right] \right\} d_{\uparrow}^{\dagger} d_{\downarrow} \\
&+ \left\{ \left[-t_C \frac{\Delta\epsilon}{\sqrt{4(t_C)^2 + (\Delta\epsilon)^2}} \right] + \left[\Delta\epsilon \frac{t_C}{\sqrt{4(t_C)^2 + (\Delta\epsilon)^2}} \right] \right\} d_{\downarrow}^{\dagger} d_{\uparrow} \\
&= \left\{ [\varepsilon_L (\cos \phi)^2 + \varepsilon_R (\sin \phi)^2] - \left[\frac{2(t_C)^2}{\sqrt{4(t_C)^2 + (\Delta\epsilon)^2}} \right] \right\} d_{\uparrow}^{\dagger} d_{\uparrow} \\
&+ \left\{ [\varepsilon_L (\sin \phi)^2 + \varepsilon_R (\cos \phi)^2] + \left[t_C \frac{2t_C}{\sqrt{4(t_C)^2 + (\Delta\epsilon)^2}} \right] \right\} d_{\downarrow}^{\dagger} d_{\downarrow} \\
&= \left\{ \left[-\frac{\varepsilon_L \Delta\epsilon}{\sqrt{4(t_C)^2 + (\Delta\epsilon)^2}} + (\varepsilon_R + \varepsilon_L) (\sin \phi)^2 \right] - \left[\frac{2(t_C)^2}{\sqrt{4(t_C)^2 + (\Delta\epsilon)^2}} \right] \right\} d_{\uparrow}^{\dagger} d_{\uparrow} \\
&+ \left\{ \left[-\frac{\varepsilon_R \Delta\epsilon}{\sqrt{4(t_C)^2 + (\Delta\epsilon)^2}} + (\varepsilon_R + \varepsilon_L) (\sin \phi)^2 \right] + \left[t_C \frac{2t_C}{\sqrt{4(t_C)^2 + (\Delta\epsilon)^2}} \right] \right\} d_{\downarrow}^{\dagger} d_{\downarrow} \\
&= \left\{ \left[-\frac{\varepsilon_L \Delta\epsilon}{\sqrt{4(t_C)^2 + (\Delta\epsilon)^2}} + (\varepsilon_R + \varepsilon_L) \left(\frac{1 - \cos(2\phi)}{2} \right) \right] - \left[\frac{2(t_C)^2}{\sqrt{4(t_C)^2 + (\Delta\epsilon)^2}} \right] \right\} d_{\uparrow}^{\dagger} d_{\uparrow} \\
&+ \left\{ \left[-\frac{\varepsilon_R \Delta\epsilon}{\sqrt{4(t_C)^2 + (\Delta\epsilon)^2}} + (\varepsilon_R + \varepsilon_L) \left(\frac{1 - \cos(2\phi)}{2} \right) \right] + \left[\frac{2(t_C)^2}{\sqrt{4(t_C)^2 + (\Delta\epsilon)^2}} \right] \right\} d_{\downarrow}^{\dagger} d_{\downarrow} \\
&= \left\{ -\frac{\varepsilon_L \Delta\epsilon}{\sqrt{4(t_C)^2 + (\Delta\epsilon)^2}} + \frac{(\varepsilon_R + \varepsilon_L) \Delta\epsilon}{2} + \frac{(\varepsilon_R + \varepsilon_L) \Delta\epsilon}{2\sqrt{4(t_C)^2 + (\Delta\epsilon)^2}} - \frac{2(t_C)^2}{\sqrt{4(t_C)^2 + (\Delta\epsilon)^2}} \right\} d_{\uparrow}^{\dagger} d_{\uparrow} \\
&+ \left\{ -\frac{\varepsilon_R \Delta\epsilon}{\sqrt{4(t_C)^2 + (\Delta\epsilon)^2}} + \frac{(\varepsilon_R + \varepsilon_L) \Delta\epsilon}{2} + \frac{(\varepsilon_R + \varepsilon_L) \Delta\epsilon}{2\sqrt{4(t_C)^2 + (\Delta\epsilon)^2}} + \frac{2(t_C)^2}{\sqrt{4(t_C)^2 + (\Delta\epsilon)^2}} \right\} d_{\downarrow}^{\dagger} d_{\downarrow}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \left\{ \frac{(\varepsilon_R + \varepsilon_L)}{2} - \frac{1}{2} \left[\frac{2\varepsilon_L \Delta\epsilon}{\sqrt{4(t_C)^2 + (\Delta\epsilon)^2}} - \frac{(\varepsilon_R + \varepsilon_L) \Delta\epsilon}{\sqrt{4(t_C)^2 + (\Delta\epsilon)^2}} + \frac{4(t_C)^2}{\sqrt{4(t_C)^2 + (\Delta\epsilon)^2}} \right] \right\} d_{\uparrow}^{\dagger} d_{\uparrow} \\
&+ \left\{ \frac{(\varepsilon_R + \varepsilon_L)}{2} - \frac{1}{2} \left[\frac{2\varepsilon_R \Delta\epsilon}{\sqrt{4(t_C)^2 + (\Delta\epsilon)^2}} - \frac{(\varepsilon_R + \varepsilon_L) \Delta\epsilon}{\sqrt{4(t_C)^2 + (\Delta\epsilon)^2}} - \frac{4(t_C)^2}{\sqrt{4(t_C)^2 + (\Delta\epsilon)^2}} \right] \right\} d_{\downarrow}^{\dagger} d_{\downarrow} \\
&= \left\{ \frac{(\varepsilon_R + \varepsilon_L)}{2} - \frac{1}{2} \left[\frac{2\varepsilon_L \Delta\epsilon - \varepsilon_R \Delta\epsilon - \varepsilon_L \Delta\epsilon + 4(t_C)^2}{\sqrt{4(t_C)^2 + (\Delta\epsilon)^2}} \right] \right\} d_{\uparrow}^{\dagger} d_{\uparrow} \\
&+ \left\{ \frac{(\varepsilon_R + \varepsilon_L)}{2} - \frac{1}{2} \left[\frac{2\varepsilon_R \Delta\epsilon - \varepsilon_R \Delta\epsilon - \varepsilon_L \Delta\epsilon - 4(t_C)^2}{\sqrt{4(t_C)^2 + (\Delta\epsilon)^2}} \right] \right\} d_{\downarrow}^{\dagger} d_{\downarrow} \\
&= \left\{ \frac{(\varepsilon_R + \varepsilon_L)}{2} - \frac{1}{2} \left[\frac{\varepsilon_L \Delta\epsilon - \varepsilon_R \Delta\epsilon + 4(t_C)^2}{\sqrt{4(t_C)^2 + (\Delta\epsilon)^2}} \right] \right\} d_{\uparrow}^{\dagger} d_{\uparrow} \\
&+ \left\{ \frac{(\varepsilon_R + \varepsilon_L)}{2} - \frac{1}{2} \left[\frac{\varepsilon_R \Delta\epsilon - \varepsilon_L \Delta\epsilon - 4(t_C)^2}{\sqrt{4(t_C)^2 + (\Delta\epsilon)^2}} \right] \right\} d_{\downarrow}^{\dagger} d_{\downarrow} \\
&= \left\{ \frac{(\varepsilon_R + \varepsilon_L)}{2} - \frac{1}{2} \left[\frac{(\varepsilon_L - \varepsilon_R) \Delta\epsilon + 4(t_C)^2}{\sqrt{4(t_C)^2 + (\Delta\epsilon)^2}} \right] \right\} d_{\uparrow}^{\dagger} d_{\uparrow} \\
&+ \left\{ \frac{(\varepsilon_R + \varepsilon_L)}{2} + \frac{1}{2} \left[\frac{(\varepsilon_L - \varepsilon_R) \Delta\epsilon + 4(t_C)^2}{\sqrt{4(t_C)^2 + (\Delta\epsilon)^2}} \right] \right\} d_{\downarrow}^{\dagger} d_{\downarrow} \\
&= \left\{ \frac{(\varepsilon_R + \varepsilon_L)}{2} - \frac{1}{2} \left[\frac{\Delta\epsilon^2 + 4(t_C)^2}{\sqrt{4(t_C)^2 + (\Delta\epsilon)^2}} \right] \right\} d_{\uparrow}^{\dagger} d_{\uparrow} \\
&+ \left\{ \frac{(\varepsilon_R + \varepsilon_L)}{2} + \frac{1}{2} \left[\frac{\Delta\epsilon^2 + 4(t_C)^2}{\sqrt{4(t_C)^2 + (\Delta\epsilon)^2}} \right] \right\} d_{\downarrow}^{\dagger} d_{\downarrow},
\end{aligned}$$

finally, we have

$$\begin{aligned}
&= \left\{ \frac{(\varepsilon_R + \varepsilon_L)}{2} - \frac{1}{2} \sqrt{4(t_C)^2 + (\Delta\epsilon)^2} \right\} d_{\uparrow}^{\dagger} d_{\uparrow} \\
&+ \left\{ \frac{(\varepsilon_R + \varepsilon_L)}{2} + \frac{1}{2} \sqrt{4(t_C)^2 + (\Delta\epsilon)^2} \right\} d_{\downarrow}^{\dagger} d_{\downarrow} \\
&= \sum_{\sigma} \left[\frac{(\varepsilon_R + \varepsilon_L)}{2} - \frac{\sigma}{2} \sqrt{4(t_C)^2 + (\Delta\epsilon)^2} \right] \tilde{d}_{\sigma}^{\dagger} \tilde{d}_{\sigma}
\end{aligned} \tag{A.25}$$

And, Eq. (A.19)

$$V \sum_{\alpha k} \left(c_{\alpha k}^{\dagger} d_{\alpha} + H.c. \right) = V \sum_{k, \sigma} \left(\tilde{c}_{\sigma k}^{\dagger} \tilde{d}_{\sigma} + \tilde{d}_{\sigma}^{\dagger} \tilde{c}_{\sigma k} \right) \tag{A.26}$$

Now, for the Coulomb repulsion

$$\begin{aligned}
&U d_L^{\dagger} d_L \left(d_R^{\dagger} d_R \right) = \\
&= U \left((\cos \phi)^2 (\sin \phi)^2 d_{\uparrow}^{\dagger} d_{\uparrow} d_{\uparrow}^{\dagger} d_{\uparrow} + (\sin \phi)^2 (\cos \phi)^2 d_{\downarrow}^{\dagger} d_{\downarrow} d_{\downarrow}^{\dagger} d_{\downarrow} \right. \\
&+ (\cos \phi)^2 (\cos \phi) (\sin \phi) d_{\uparrow}^{\dagger} d_{\uparrow} d_{\uparrow}^{\dagger} d_{\downarrow} - (\cos \phi) (\sin \phi) (\sin \phi)^2 d_{\downarrow}^{\dagger} d_{\uparrow} d_{\uparrow}^{\dagger} d_{\uparrow} \\
&+ (\cos \phi)^2 (\cos \phi) (\sin \phi) d_{\uparrow}^{\dagger} d_{\uparrow} d_{\downarrow}^{\dagger} d_{\uparrow} - (\cos \phi) (\sin \phi) (\sin \phi)^2 d_{\uparrow}^{\dagger} d_{\downarrow} d_{\uparrow}^{\dagger} d_{\uparrow} \\
&- (\sin \phi) (\cos \phi) (\cos \phi)^2 d_{\uparrow}^{\dagger} d_{\downarrow} d_{\downarrow}^{\dagger} d_{\downarrow} + (\sin \phi)^2 (\sin \phi) (\cos \phi) d_{\downarrow}^{\dagger} d_{\downarrow} d_{\uparrow}^{\dagger} d_{\downarrow} \\
&+ (\sin \phi)^2 (\sin \phi) (\cos \phi) d_{\downarrow}^{\dagger} d_{\downarrow} d_{\downarrow}^{\dagger} d_{\uparrow} - (\sin \phi) (\cos \phi) (\cos \phi)^2 d_{\downarrow}^{\dagger} d_{\uparrow} d_{\uparrow}^{\dagger} d_{\downarrow} \\
&- (\sin \phi)^2 (\cos \phi)^2 d_{\downarrow}^{\dagger} d_{\uparrow} d_{\uparrow}^{\dagger} d_{\uparrow} - (\sin \phi)^2 (\cos \phi)^2 d_{\downarrow}^{\dagger} d_{\uparrow} d_{\uparrow}^{\dagger} d_{\downarrow} + (\sin \phi)^4 d_{\downarrow}^{\dagger} d_{\downarrow} d_{\uparrow}^{\dagger} d_{\uparrow} \\
&\left. + (\cos \phi)^4 d_{\uparrow}^{\dagger} d_{\uparrow} d_{\downarrow}^{\dagger} d_{\downarrow} - (\cos \phi)^2 (\sin \phi)^2 d_{\uparrow}^{\dagger} d_{\downarrow} d_{\downarrow}^{\dagger} d_{\uparrow} - (\cos \phi)^2 (\sin \phi)^2 d_{\uparrow}^{\dagger} d_{\downarrow} d_{\uparrow}^{\dagger} d_{\downarrow} \right)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= U \left((\cos \phi)^2 (\sin \phi)^2 d_{\uparrow}^{\dagger} d_{\uparrow} d_{\uparrow}^{\dagger} d_{\uparrow} + (\sin \phi)^2 (\cos \phi)^2 d_{\downarrow}^{\dagger} d_{\downarrow} d_{\downarrow}^{\dagger} d_{\downarrow} \right. \\
&\quad + (\cos \phi)^3 (\sin \phi) d_{\uparrow}^{\dagger} d_{\uparrow} d_{\uparrow}^{\dagger} d_{\downarrow} - (\cos \phi) (\sin \phi)^3 d_{\uparrow}^{\dagger} d_{\downarrow} \left(1 - d_{\uparrow} d_{\uparrow}^{\dagger} \right) \\
&\quad - (\cos \phi) (\sin \phi)^3 d_{\downarrow}^{\dagger} d_{\uparrow} d_{\uparrow}^{\dagger} d_{\uparrow} + (\cos \phi)^2 (\cos \phi) (\sin \phi) d_{\downarrow}^{\dagger} \left(1 - d_{\uparrow} d_{\uparrow}^{\dagger} \right) d_{\uparrow} \\
&\quad - (\sin \phi) (\cos \phi)^3 d_{\uparrow}^{\dagger} d_{\downarrow} d_{\downarrow}^{\dagger} d_{\downarrow} + (\sin \phi)^3 (\cos \phi) d_{\uparrow}^{\dagger} \left(1 - d_{\downarrow} d_{\downarrow}^{\dagger} \right) d_{\downarrow} \\
&\quad + (\sin \phi)^3 (\cos \phi) d_{\downarrow}^{\dagger} d_{\downarrow} d_{\uparrow}^{\dagger} d_{\uparrow} - (\sin \phi) (\cos \phi)^3 d_{\downarrow}^{\dagger} \left(1 - d_{\downarrow} d_{\downarrow}^{\dagger} \right) d_{\uparrow} \\
&\quad + (\sin \phi)^4 d_{\uparrow}^{\dagger} d_{\uparrow} d_{\downarrow}^{\dagger} d_{\downarrow} + (\cos \phi)^4 d_{\uparrow}^{\dagger} d_{\uparrow} d_{\downarrow}^{\dagger} d_{\downarrow} \\
&\quad - (\sin \phi)^2 (\cos \phi)^2 \left(1 - d_{\uparrow}^{\dagger} d_{\uparrow} \right) d_{\downarrow}^{\dagger} d_{\downarrow} - (\cos \phi)^2 (\sin \phi)^2 d_{\uparrow}^{\dagger} d_{\uparrow} \left(1 - d_{\downarrow}^{\dagger} d_{\downarrow} \right) \\
&\quad \left. - (\sin \phi)^2 (\cos \phi)^2 d_{\downarrow}^{\dagger} d_{\uparrow} d_{\uparrow}^{\dagger} d_{\uparrow} - (\cos \phi)^2 (\sin \phi)^2 d_{\uparrow}^{\dagger} d_{\downarrow} d_{\uparrow}^{\dagger} d_{\downarrow} \right) \\
&= U \left((\cos \phi)^2 (\sin \phi)^2 d_{\uparrow}^{\dagger} d_{\uparrow} d_{\uparrow}^{\dagger} d_{\uparrow} + (\sin \phi)^2 (\cos \phi)^2 d_{\downarrow}^{\dagger} d_{\downarrow} d_{\downarrow}^{\dagger} d_{\downarrow} \right. \\
&\quad + (\cos \phi)^3 (\sin \phi) d_{\uparrow}^{\dagger} d_{\uparrow} d_{\uparrow}^{\dagger} d_{\downarrow} - (\cos \phi) (\sin \phi)^3 d_{\uparrow}^{\dagger} d_{\downarrow} + (\cos \phi) (\sin \phi)^3 d_{\uparrow}^{\dagger} d_{\uparrow} d_{\uparrow}^{\dagger} d_{\downarrow} \\
&\quad - (\cos \phi) (\sin \phi)^3 d_{\downarrow}^{\dagger} d_{\uparrow} d_{\uparrow}^{\dagger} d_{\uparrow} + (\cos \phi)^3 (\sin \phi) d_{\downarrow}^{\dagger} d_{\uparrow} - (\cos \phi)^3 (\sin \phi) d_{\downarrow}^{\dagger} d_{\uparrow} d_{\uparrow}^{\dagger} d_{\uparrow} \\
&\quad - (\sin \phi) (\cos \phi)^3 d_{\uparrow}^{\dagger} d_{\downarrow} d_{\downarrow}^{\dagger} d_{\downarrow} + (\sin \phi)^3 (\cos \phi) d_{\uparrow}^{\dagger} d_{\downarrow} - (\sin \phi)^3 (\cos \phi) d_{\uparrow}^{\dagger} d_{\downarrow} d_{\downarrow}^{\dagger} d_{\downarrow} \\
&\quad + (\sin \phi)^3 (\cos \phi) d_{\downarrow}^{\dagger} d_{\downarrow} d_{\uparrow}^{\dagger} d_{\uparrow} - (\sin \phi) (\cos \phi)^3 d_{\downarrow}^{\dagger} d_{\uparrow} + (\sin \phi) (\cos \phi)^3 d_{\downarrow}^{\dagger} d_{\downarrow} d_{\uparrow}^{\dagger} d_{\uparrow} \\
&\quad + (\sin \phi)^4 d_{\uparrow}^{\dagger} d_{\uparrow} d_{\downarrow}^{\dagger} d_{\downarrow} + (\cos \phi)^4 d_{\uparrow}^{\dagger} d_{\uparrow} d_{\downarrow}^{\dagger} d_{\downarrow} \\
&\quad - (\sin \phi)^2 (\cos \phi)^2 d_{\downarrow}^{\dagger} d_{\downarrow} + (\sin \phi)^2 (\cos \phi)^2 d_{\uparrow}^{\dagger} d_{\uparrow} d_{\downarrow}^{\dagger} d_{\downarrow} - (\cos \phi)^2 (\sin \phi)^2 d_{\uparrow}^{\dagger} d_{\uparrow} \\
&\quad \left. + (\cos \phi)^2 (\sin \phi)^2 d_{\uparrow}^{\dagger} d_{\uparrow} d_{\downarrow}^{\dagger} d_{\downarrow} - (\sin \phi)^2 (\cos \phi)^2 d_{\downarrow}^{\dagger} d_{\uparrow} d_{\downarrow}^{\dagger} d_{\uparrow} - (\cos \phi)^2 (\sin \phi)^2 d_{\uparrow}^{\dagger} d_{\downarrow} d_{\uparrow}^{\dagger} d_{\downarrow} \right)
\end{aligned}$$

$$U d_L^{\dagger} d_L d_R^{\dagger} d_R =$$

$$\begin{aligned}
U d_L^\dagger d_L d_R^\dagger d_R &= U \left(d_\uparrow^\dagger d_\uparrow d_\downarrow^\dagger d_\downarrow + (\cos \phi) (\sin \phi) \left[-d_\downarrow d_\uparrow^\dagger d_\uparrow^\dagger d_\uparrow + d_\downarrow^\dagger d_\uparrow^\dagger d_\uparrow d_\uparrow \right] \right. \\
&\quad + (\cos \phi) (\sin \phi) \left[-d_\uparrow d_\downarrow^\dagger d_\downarrow^\dagger d_\downarrow + d_\uparrow^\dagger d_\downarrow^\dagger d_\downarrow d_\downarrow \right] \\
&\quad + (\sin \phi)^2 (\cos \phi)^2 d_\downarrow^\dagger d_\downarrow^\dagger d_\uparrow d_\uparrow + (\cos \phi)^2 (\sin \phi)^2 d_\uparrow^\dagger d_\uparrow^\dagger d_\downarrow d_\downarrow \\
&\quad + (\cos \phi)^2 (\sin \phi)^2 d_\uparrow^\dagger d_\uparrow + (\sin \phi)^2 (\cos \phi)^2 d_\downarrow^\dagger d_\downarrow \\
&\quad \left. - (\sin \phi)^2 (\cos \phi)^2 d_\downarrow^\dagger d_\downarrow - (\cos \phi)^2 (\sin \phi)^2 d_\uparrow^\dagger d_\uparrow \right) \\
&= U \left(d_\uparrow^\dagger d_\uparrow d_\downarrow^\dagger d_\downarrow + (\cos \phi) (\sin \phi) \left[-d_\downarrow d_\uparrow^\dagger d_\uparrow^\dagger d_\uparrow + d_\downarrow^\dagger d_\uparrow^\dagger d_\uparrow d_\uparrow \right] \right. \\
&\quad + (\cos \phi) (\sin \phi) \left[-d_\uparrow d_\downarrow^\dagger d_\downarrow^\dagger d_\downarrow + d_\uparrow^\dagger d_\downarrow^\dagger d_\downarrow d_\downarrow \right] \\
&\quad \left. + (\sin \phi)^2 (\cos \phi)^2 d_\downarrow^\dagger d_\downarrow^\dagger d_\uparrow d_\uparrow + (\cos \phi)^2 (\sin \phi)^2 d_\uparrow^\dagger d_\uparrow^\dagger d_\downarrow d_\downarrow \right) \\
&= U \left(d_\uparrow^\dagger d_\uparrow d_\downarrow^\dagger d_\downarrow \right) \tag{A.27}
\end{aligned}$$

where $d_\uparrow^\dagger d_\uparrow d_\uparrow^\dagger d_\uparrow = d_\uparrow^\dagger d_\uparrow$ and $d_\downarrow^\dagger d_\downarrow d_\downarrow^\dagger d_\downarrow = d_\downarrow^\dagger d_\downarrow$. The terms $d_\downarrow d_\uparrow^\dagger d_\uparrow^\dagger d_\uparrow$, $d_\downarrow^\dagger d_\uparrow^\dagger d_\uparrow d_\uparrow$, $d_\uparrow d_\downarrow^\dagger d_\downarrow^\dagger d_\downarrow$, $d_\uparrow^\dagger d_\downarrow^\dagger d_\downarrow d_\downarrow$, $d_\downarrow^\dagger d_\downarrow^\dagger d_\uparrow d_\uparrow$ and $d_\uparrow^\dagger d_\uparrow^\dagger d_\downarrow d_\downarrow$ are zero due the Pauli exclusion principle.

We obtain

$$\begin{aligned}
\mathcal{H}_{AM} &= \sum_{k,\sigma} \epsilon c_{\sigma k}^\dagger c_{\sigma k} + \sum_\sigma \left[\frac{(\varepsilon_R + \varepsilon_L)}{2} - \frac{\sigma}{2} \sqrt{4(t_C)^2 + (\Delta\epsilon)^2} \right] d_\sigma^\dagger d_\sigma + V \sum_{k,\sigma} \left(c_{\sigma k}^\dagger d_\sigma + d_\sigma^\dagger c_{\sigma k} \right) \\
&+ U \left(d_\uparrow^\dagger d_\uparrow d_\downarrow^\dagger d_\downarrow \right) \tag{A.28}
\end{aligned}$$

Let's do

$$\epsilon_{d,\sigma} = \left[\frac{(\varepsilon_R + \varepsilon_L)}{2} - \frac{\sigma}{2} \sqrt{4(t_C)^2 + (\Delta\epsilon)^2} \right] \tag{A.29}$$

so we have the Anderson Hamiltonian

$$\mathcal{H}_{AM} = \sum_{k,\sigma} \epsilon c_{\sigma k}^\dagger c_{\sigma k} + \sum_\sigma \epsilon_{d,\sigma} d_\sigma^\dagger d_\sigma + V \sum_{k,\sigma} \left(c_{\sigma k}^\dagger d_\sigma + d_\sigma^\dagger c_{\sigma k} \right) + U \left(d_\uparrow^\dagger d_\uparrow d_\downarrow^\dagger d_\downarrow \right) \tag{A.30}$$

A.1.3 Majorana Transformation

For representation of this system we need describe in Hamiltonian the coupling with two Majorana and a double dot.

The Hamiltonian is

$$\begin{aligned}\mathcal{H}_{MFs} = & i\varepsilon_M \Psi_1 \Psi_2 + \lambda_{R2} \left(d_R - d_R^\dagger \right) \Psi_1 + \lambda_{L1} \left(d_L - d_L^\dagger \right) \Psi_1 \\ & + i\lambda_{R1} \left(d_R + d_R^\dagger \right) \Psi_2 + i\lambda_{L2} \left(d_L + d_L^\dagger \right) \Psi_2\end{aligned}\quad (\text{A.31})$$

where ε_M is the energy of Majorana's coupling.

The Majorana terms Ψ_1 and Ψ_2 can be written as

$$\Psi_1 = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(f_\uparrow^\dagger + f_\uparrow \right), \quad (\text{A.32})$$

$$\Psi_2 = \frac{i}{\sqrt{2}} \left(f_\uparrow^\dagger - f_\uparrow \right). \quad (\text{A.33})$$

The terms d_L and d_R are:

$$d_L = [(\cos \phi) d_\uparrow - (\sin \phi) d_\downarrow],$$

$$d_L^\dagger = \left[(\cos \phi) d_\uparrow^\dagger - (\sin \phi) d_\downarrow^\dagger \right],$$

$$d_R = [(\sin \phi) d_\uparrow + (\cos \phi) d_\downarrow],$$

$$d_R^\dagger = \left[(\sin \phi) d_\uparrow^\dagger + (\cos \phi) d_\downarrow^\dagger \right].$$

Substituting terms in Hamiltonian.

$$\begin{aligned}
 i\varepsilon_M \Psi_1 \Psi_2 &= i\varepsilon_M \left[\frac{1}{\sqrt{2}} (f_\uparrow^\dagger + f_\uparrow) \right] \left[\frac{i}{\sqrt{2}} (f_\uparrow^\dagger - f_\uparrow) \right] \\
 &= -\frac{\varepsilon_M}{2} (f_\uparrow^\dagger + f_\uparrow) (f_\uparrow^\dagger - f_\uparrow) \\
 &= -\frac{\varepsilon_M}{2} (f_\uparrow^\dagger f_\uparrow^\dagger - f_\uparrow^\dagger f_\uparrow + f_\uparrow f_\uparrow^\dagger - f_\uparrow f_\uparrow) \\
 &= -\frac{\varepsilon_M}{2} (-f_\uparrow^\dagger f_\uparrow + f_\uparrow f_\uparrow^\dagger) \\
 &= -\frac{\varepsilon_M}{2} (-f_\uparrow^\dagger f_\uparrow + 1 - f_\uparrow^\dagger f_\uparrow) \\
 &= -\frac{\varepsilon_M}{2} (-2f_\uparrow^\dagger f_\uparrow + 1) \\
 &= -\varepsilon_M \left(-f_\uparrow^\dagger f_\uparrow + \frac{1}{2} \right) \\
 &= \varepsilon_M \left(f_\uparrow^\dagger f_\uparrow - \frac{1}{2} \right)
 \end{aligned} \tag{A.34}$$

Terms of Ψ_1

$$\begin{aligned}
 \lambda_{R2} (d_R - d_R^\dagger) \Psi_1 &= \lambda_{R2} [[(\sin \phi) d_\uparrow + (\cos \phi) d_\downarrow] \\
 &\quad - [(\sin \phi) d_\uparrow^\dagger + (\cos \phi) d_\downarrow^\dagger]] \Psi_1 \\
 &= \lambda_{R2} [(\sin \phi) d_\uparrow + (\cos \phi) d_\downarrow \\
 &\quad - (\sin \phi) d_\uparrow^\dagger - (\cos \phi) d_\downarrow^\dagger] \Psi_1
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \lambda_{R2} \left[(\sin \phi) d_\uparrow + (\cos \phi) d_\downarrow - (\sin \phi) d_\uparrow^\dagger - (\cos \phi) d_\downarrow^\dagger \right] \frac{1}{\sqrt{2}} (f_\uparrow^\dagger + f_\uparrow) \\
&= \lambda_{R2} (\sin \phi) d_\uparrow \frac{1}{\sqrt{2}} (f_\uparrow^\dagger + f_\uparrow) \\
&+ \lambda_{R2} (\cos \phi) d_\downarrow \frac{1}{\sqrt{2}} (f_\uparrow^\dagger + f_\uparrow) \\
&- \lambda_{R2} (\sin \phi) d_\uparrow^\dagger \frac{1}{\sqrt{2}} (f_\uparrow^\dagger + f_\uparrow) \\
&- \lambda_{R2} (\cos \phi) d_\downarrow^\dagger \frac{1}{\sqrt{2}} (f_\uparrow^\dagger + f_\uparrow) \\
&= \frac{\lambda_{R2}}{\sqrt{2}} (\sin \phi) (d_\uparrow f_\uparrow^\dagger + d_\uparrow f_\uparrow) + \frac{\lambda_{R2}}{\sqrt{2}} (\cos \phi) (d_\downarrow f_\uparrow^\dagger + d_\downarrow f_\uparrow) \\
&- \frac{\lambda_{R2}}{\sqrt{2}} (\sin \phi) (d_\uparrow^\dagger f_\uparrow^\dagger + d_\uparrow^\dagger f_\uparrow) - \frac{\lambda_{R2}}{\sqrt{2}} (\cos \phi) (d_\downarrow^\dagger f_\uparrow^\dagger + d_\downarrow^\dagger f_\uparrow) \\
&= \frac{\lambda_{R2}}{\sqrt{2}} (\sin \phi) (d_\uparrow f_\uparrow - d_\uparrow^\dagger f_\uparrow^\dagger) + \frac{\lambda_{R2}}{\sqrt{2}} (\cos \phi) (d_\downarrow f_\uparrow - d_\downarrow^\dagger f_\uparrow^\dagger) \\
&+ \frac{\lambda_{R2}}{\sqrt{2}} (\sin \phi) (d_\uparrow f_\uparrow^\dagger - d_\uparrow^\dagger f_\uparrow) + \frac{\lambda_{R2}}{\sqrt{2}} (\cos \phi) (d_\downarrow f_\uparrow^\dagger - d_\downarrow^\dagger f_\uparrow) \\
&= \frac{\lambda_{R2}}{\sqrt{2}} (\sin \phi) [d_\uparrow f_\uparrow^\dagger - d_\uparrow^\dagger f_\uparrow] + \frac{\lambda_{R2}}{\sqrt{2}} (\sin \phi) [d_\uparrow f_\uparrow - d_\uparrow^\dagger f_\uparrow^\dagger] \\
&+ \frac{\lambda_{R2}}{\sqrt{2}} (\cos \phi) [d_\downarrow f_\uparrow^\dagger - d_\downarrow^\dagger f_\uparrow] + \frac{\lambda_{R2}}{\sqrt{2}} (\cos \phi) [d_\downarrow f_\uparrow - d_\downarrow^\dagger f_\uparrow^\dagger]
\end{aligned} \tag{A.35}$$

and

$$\begin{aligned}
\lambda_{L1} (d_L - d_L^\dagger) \Psi_1 &= \lambda_{L1} [[(\cos \phi) d_\uparrow - (\sin \phi) d_\downarrow] \\
&\quad - [(\cos \phi) d_\uparrow^\dagger - (\sin \phi) d_\downarrow^\dagger]] \Psi_1 \\
&= \lambda_{L1} [(\cos \phi) d_\uparrow - (\sin \phi) d_\downarrow - (\cos \phi) d_\uparrow^\dagger + (\sin \phi) d_\downarrow^\dagger] \Psi_1
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \lambda_{L1} \left[(\cos \phi) d_\uparrow - (\sin \phi) d_\downarrow - (\cos \phi) d_\uparrow^\dagger + (\sin \phi) d_\downarrow^\dagger \right] \frac{1}{\sqrt{2}} (f_\uparrow^\dagger + f_\uparrow) \\
&= \frac{\lambda_{L1}}{\sqrt{2}} (\cos \phi) d_\uparrow (f_\uparrow^\dagger + f_\uparrow) - \frac{\lambda_{L1}}{\sqrt{2}} (\sin \phi) d_\downarrow (f_\uparrow^\dagger + f_\uparrow) \\
&- \frac{\lambda_{L1}}{\sqrt{2}} (\cos \phi) d_\uparrow^\dagger (f_\uparrow^\dagger + f_\uparrow) + \frac{\lambda_{L1}}{\sqrt{2}} (\sin \phi) d_\downarrow^\dagger (f_\uparrow^\dagger + f_\uparrow) \\
&= \frac{\lambda_{L1}}{\sqrt{2}} (\cos \phi) [d_\uparrow f_\uparrow^\dagger + d_\uparrow f_\uparrow] - \frac{\lambda_{L1}}{\sqrt{2}} (\sin \phi) [d_\downarrow f_\uparrow^\dagger + d_\downarrow f_\uparrow] \\
&- \frac{\lambda_{L1}}{\sqrt{2}} (\cos \phi) [d_\uparrow^\dagger f_\uparrow^\dagger + d_\uparrow^\dagger f_\uparrow] + \frac{\lambda_{L1}}{\sqrt{2}} (\sin \phi) [d_\downarrow^\dagger f_\uparrow^\dagger + d_\downarrow^\dagger f_\uparrow] \\
&= \frac{\lambda_{L1}}{\sqrt{2}} (\sin \phi) [d_\downarrow^\dagger f_\uparrow - d_\downarrow f_\uparrow^\dagger] + \frac{\lambda_{L1}}{\sqrt{2}} (\sin \phi) [d_\downarrow^\dagger f_\uparrow^\dagger - d_\downarrow f_\uparrow] \\
&+ \frac{\lambda_{L1}}{\sqrt{2}} (\cos \phi) [d_\uparrow f_\uparrow^\dagger - d_\uparrow^\dagger f_\uparrow] + \frac{\lambda_{L1}}{\sqrt{2}} (\cos \phi) [d_\uparrow f_\uparrow - d_\uparrow^\dagger f_\uparrow^\dagger] \\
&= \frac{\lambda_{L1}}{\sqrt{2}} (\sin \phi) [-d_\downarrow f_\uparrow^\dagger + d_\downarrow^\dagger f_\uparrow] + \frac{\lambda_{L1}}{\sqrt{2}} (\sin \phi) [-d_\downarrow f_\uparrow + d_\downarrow^\dagger f_\uparrow^\dagger] \\
&+ \frac{\lambda_{L1}}{\sqrt{2}} (\cos \phi) [d_\uparrow f_\uparrow^\dagger - d_\uparrow^\dagger f_\uparrow] + \frac{\lambda_{L1}}{\sqrt{2}} (\cos \phi) [d_\uparrow f_\uparrow - d_\uparrow^\dagger f_\uparrow^\dagger]
\end{aligned} \tag{A.36}$$

If we sum the terms of Ψ_1

$$\lambda_{R2} (d_R - d_R^\dagger) \Psi_1 + \lambda_{L1} (d_L - d_L^\dagger) \Psi_1 =$$

$$\begin{aligned}
&= \frac{\lambda_{R2}}{\sqrt{2}} (\sin \phi) [d_{\uparrow}f_{\uparrow}^{\dagger} - d_{\uparrow}^{\dagger}f_{\uparrow}] + \frac{\lambda_{R2}}{\sqrt{2}} (\sin \phi) [d_{\uparrow}f_{\uparrow} - d_{\uparrow}^{\dagger}f_{\uparrow}^{\dagger}] \\
&+ \frac{\lambda_{R2}}{\sqrt{2}} (\cos \phi) [d_{\downarrow}f_{\uparrow}^{\dagger} - d_{\downarrow}^{\dagger}f_{\uparrow}] + \frac{\lambda_{R2}}{\sqrt{2}} (\cos \phi) [d_{\downarrow}f_{\uparrow} - d_{\downarrow}^{\dagger}f_{\uparrow}^{\dagger}] \\
&+ \frac{\lambda_{L1}}{\sqrt{2}} (\sin \phi) [-d_{\downarrow}f_{\uparrow}^{\dagger} + d_{\downarrow}^{\dagger}f_{\uparrow}] + \frac{\lambda_{L1}}{\sqrt{2}} (\sin \phi) [-d_{\downarrow}f_{\uparrow} + d_{\downarrow}^{\dagger}f_{\uparrow}^{\dagger}] \\
&+ \frac{\lambda_{L1}}{\sqrt{2}} (\cos \phi) [d_{\uparrow}f_{\uparrow}^{\dagger} - d_{\uparrow}^{\dagger}f_{\uparrow}] + \frac{\lambda_{L1}}{\sqrt{2}} (\cos \phi) [d_{\uparrow}f_{\uparrow} - d_{\uparrow}^{\dagger}f_{\uparrow}^{\dagger}] \\
&= \left[\frac{\lambda_{R2}}{\sqrt{2}} (\sin \phi) + \frac{\lambda_{L1}}{\sqrt{2}} (\cos \phi) \right] [d_{\uparrow}f_{\uparrow}^{\dagger} - d_{\uparrow}^{\dagger}f_{\uparrow}] \\
&+ \left[\frac{\lambda_{R2}}{\sqrt{2}} (\sin \phi) + \frac{\lambda_{L1}}{\sqrt{2}} (\cos \phi) \right] [d_{\uparrow}f_{\uparrow} - d_{\uparrow}^{\dagger}f_{\uparrow}^{\dagger}] \\
&+ \left[\frac{\lambda_{R2}}{\sqrt{2}} (\cos \phi) - \frac{\lambda_{L1}}{\sqrt{2}} (\sin \phi) \right] [d_{\downarrow}f_{\uparrow}^{\dagger} - d_{\downarrow}^{\dagger}f_{\uparrow}] \\
&+ \left[\frac{\lambda_{R2}}{\sqrt{2}} (\cos \phi) - \frac{\lambda_{L1}}{\sqrt{2}} (\sin \phi) \right] [d_{\downarrow}f_{\uparrow} - d_{\downarrow}^{\dagger}f_{\uparrow}^{\dagger}] \tag{A.37}
\end{aligned}$$

Now, for the terms Ψ_2 .

$$\begin{aligned}
i\lambda_{R1} (d_R + d_R^{\dagger}) \Psi_2 &= i\lambda_{R1} [[(\sin \phi) d_{\uparrow} + (\cos \phi) d_{\downarrow}] \\
&\quad + [(\sin \phi) d_{\uparrow}^{\dagger} + (\cos \phi) d_{\downarrow}^{\dagger}]] \Psi_2 \\
&= i\lambda_{R1} [(\sin \phi) d_{\uparrow} + (\cos \phi) d_{\downarrow} + (\sin \phi) d_{\uparrow}^{\dagger} + (\cos \phi) d_{\downarrow}^{\dagger}] \Psi_2
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= i\lambda_{R1} \left[(\sin \phi) d_\uparrow + (\cos \phi) d_\downarrow + (\sin \phi) d_\uparrow^\dagger + (\cos \phi) d_\downarrow^\dagger \right] \frac{i}{\sqrt{2}} (f_\uparrow^\dagger - f_\uparrow) \\
&= -\frac{\lambda_{R1}}{\sqrt{2}} (\sin \phi) d_\uparrow (f_\uparrow^\dagger - f_\uparrow) - \frac{\lambda_{R1}}{\sqrt{2}} (\cos \phi) d_\downarrow (f_\uparrow^\dagger - f_\uparrow) \\
&\quad - \frac{\lambda_{R1}}{\sqrt{2}} (\sin \phi) d_\uparrow^\dagger (f_\uparrow^\dagger - f_\uparrow) - \frac{\lambda_{R1}}{\sqrt{2}} (\cos \phi) d_\downarrow^\dagger (f_\uparrow^\dagger - f_\uparrow) \\
&= -\frac{\lambda_{R1}}{\sqrt{2}} (\sin \phi) (d_\uparrow f_\uparrow^\dagger - d_\uparrow f_\uparrow) - \frac{\lambda_{R1}}{\sqrt{2}} (\cos \phi) (d_\downarrow f_\uparrow^\dagger - d_\downarrow f_\uparrow) \\
&\quad - \frac{\lambda_{R1}}{\sqrt{2}} (\sin \phi) (d_\uparrow^\dagger f_\uparrow^\dagger - d_\uparrow^\dagger f_\uparrow) - \frac{\lambda_{R1}}{\sqrt{2}} (\cos \phi) (d_\downarrow^\dagger f_\uparrow^\dagger - d_\downarrow^\dagger f_\uparrow) \\
&= \frac{\lambda_{R1}}{\sqrt{2}} (\sin \phi) (-d_\uparrow f_\uparrow^\dagger + d_\uparrow f_\uparrow) + \frac{\lambda_{R1}}{\sqrt{2}} (\cos \phi) (-d_\downarrow f_\uparrow^\dagger + d_\downarrow f_\uparrow) \\
&\quad + \frac{\lambda_{R1}}{\sqrt{2}} (\sin \phi) (-d_\uparrow^\dagger f_\uparrow^\dagger + d_\uparrow^\dagger f_\uparrow) + \frac{\lambda_{R1}}{\sqrt{2}} (\cos \phi) (-d_\downarrow^\dagger f_\uparrow^\dagger + d_\downarrow^\dagger f_\uparrow) \\
&= \frac{\lambda_{R1}}{\sqrt{2}} (\sin \phi) [-d_\uparrow f_\uparrow^\dagger + d_\uparrow^\dagger f_\uparrow] + \frac{\lambda_{R1}}{\sqrt{2}} (\sin \phi) [d_\uparrow f_\uparrow - d_\uparrow^\dagger f_\uparrow^\dagger] \\
&\quad + \frac{\lambda_{R1}}{\sqrt{2}} (\cos \phi) [-d_\downarrow f_\uparrow^\dagger + d_\downarrow^\dagger f_\uparrow] + \frac{\lambda_{R1}}{\sqrt{2}} (\cos \phi) [d_\downarrow f_\uparrow - d_\downarrow^\dagger f_\uparrow^\dagger]
\end{aligned} \tag{A.38}$$

and

$$\begin{aligned}
i\lambda_{L2} (d_L + d_L^\dagger) \Psi_2 &= i\lambda_{L2} [[(\cos \phi) d_\uparrow - (\sin \phi) d_\downarrow] \\
&\quad + [(\cos \phi) d_\uparrow^\dagger - (\sin \phi) d_\downarrow^\dagger]] \Psi_2 \\
&= i\lambda_{L2} \left[(\cos \phi) d_\uparrow - (\sin \phi) d_\downarrow + (\cos \phi) d_\uparrow^\dagger - (\sin \phi) d_\downarrow^\dagger \right] \Psi_2
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= i\lambda_{L2} \left[(\cos \phi) d_\uparrow - (\sin \phi) d_\downarrow + (\cos \phi) d_\uparrow^\dagger - (\sin \phi) d_\downarrow^\dagger \right] \left[\frac{i}{\sqrt{2}} (f_\uparrow^\dagger - f_\uparrow) \right] \\
&= -\frac{\lambda_{L2}}{\sqrt{2}} (\cos \phi) d_\uparrow (f_\uparrow^\dagger - f_\uparrow) + \frac{\lambda_{L2}}{\sqrt{2}} (\sin \phi) d_\downarrow (f_\uparrow^\dagger - f_\uparrow) \\
&- \frac{\lambda_{L2}}{\sqrt{2}} (\cos \phi) d_\uparrow^\dagger (f_\uparrow^\dagger - f_\uparrow) + \frac{\lambda_{L2}}{\sqrt{2}} (\sin \phi) d_\downarrow^\dagger (f_\uparrow^\dagger - f_\uparrow) \\
&= -\frac{\lambda_{L2}}{\sqrt{2}} (\cos \phi) (d_\uparrow f_\uparrow^\dagger - d_\uparrow f_\uparrow) + \frac{\lambda_{L2}}{\sqrt{2}} (\sin \phi) (d_\downarrow f_\uparrow^\dagger - d_\downarrow f_\uparrow) \\
&- \frac{\lambda_{L2}}{\sqrt{2}} (\cos \phi) (d_\uparrow^\dagger f_\uparrow^\dagger - d_\uparrow^\dagger f_\uparrow) + \frac{\lambda_{L2}}{\sqrt{2}} (\sin \phi) (d_\downarrow^\dagger f_\uparrow^\dagger - d_\downarrow^\dagger f_\uparrow) \\
&= \frac{\lambda_{L2}}{\sqrt{2}} (\cos \phi) (-d_\uparrow f_\uparrow^\dagger + d_\uparrow f_\uparrow) + \frac{\lambda_{L2}}{\sqrt{2}} (\sin \phi) (d_\downarrow f_\uparrow^\dagger - d_\downarrow f_\uparrow) \\
&+ \frac{\lambda_{L2}}{\sqrt{2}} (\cos \phi) (-d_\uparrow^\dagger f_\uparrow^\dagger + d_\uparrow^\dagger f_\uparrow) + \frac{\lambda_{L2}}{\sqrt{2}} (\sin \phi) (d_\downarrow^\dagger f_\uparrow^\dagger - d_\downarrow^\dagger f_\uparrow) \\
&= \frac{\lambda_{L2}}{\sqrt{2}} (\cos \phi) [-d_\uparrow f_\uparrow^\dagger + d_\uparrow^\dagger f_\uparrow] + \frac{\lambda_{L2}}{\sqrt{2}} (\cos \phi) [d_\uparrow f_\uparrow - d_\uparrow^\dagger f_\uparrow^\dagger] \\
&+ \frac{\lambda_{L2}}{\sqrt{2}} (\sin \phi) [d_\downarrow f_\uparrow^\dagger - d_\downarrow^\dagger f_\uparrow] + \frac{\lambda_{L2}}{\sqrt{2}} (\sin \phi) [-d_\downarrow f_\uparrow + d_\downarrow^\dagger f_\uparrow^\dagger]
\end{aligned} \tag{A.39}$$

Sum terms of Ψ_2

$$i\lambda_{R1} (d_R + d_R^\dagger) \Psi_2 + i\lambda_{L2} (d_L + d_L^\dagger) \Psi_2 =$$

$$\begin{aligned}
&= \frac{\lambda_{R1}}{\sqrt{2}} (\sin \phi) \left[-d_{\uparrow} f_{\uparrow}^{\dagger} + d_{\uparrow}^{\dagger} f_{\uparrow} \right] + \frac{\lambda_{R1}}{\sqrt{2}} (\sin \phi) \left[d_{\uparrow} f_{\uparrow} - d_{\uparrow}^{\dagger} f_{\uparrow}^{\dagger} \right] \\
&+ \frac{\lambda_{R1}}{\sqrt{2}} (\cos \phi) \left[-d_{\downarrow} f_{\uparrow}^{\dagger} + d_{\downarrow}^{\dagger} f_{\uparrow} \right] + \frac{\lambda_{R1}}{\sqrt{2}} (\cos \phi) \left[d_{\downarrow} f_{\uparrow} - d_{\downarrow}^{\dagger} f_{\uparrow}^{\dagger} \right] \\
&+ \frac{\lambda_{L2}}{\sqrt{2}} (\cos \phi) \left[-d_{\uparrow} f_{\uparrow}^{\dagger} + d_{\uparrow}^{\dagger} f_{\uparrow} \right] + \frac{\lambda_{L2}}{\sqrt{2}} (\cos \phi) \left[d_{\uparrow} f_{\uparrow} - d_{\uparrow}^{\dagger} f_{\uparrow}^{\dagger} \right] \\
&+ \frac{\lambda_{L2}}{\sqrt{2}} (\sin \phi) \left[d_{\downarrow} f_{\uparrow}^{\dagger} - d_{\downarrow}^{\dagger} f_{\uparrow} \right] + \frac{\lambda_{L2}}{\sqrt{2}} (\sin \phi) \left[-d_{\downarrow} f_{\uparrow} + d_{\downarrow}^{\dagger} f_{\uparrow}^{\dagger} \right] \\
\\
&= \left[\frac{\lambda_{R1}}{\sqrt{2}} (\sin \phi) + \frac{\lambda_{L2}}{\sqrt{2}} (\cos \phi) \right] \left[-d_{\uparrow} f_{\uparrow}^{\dagger} + d_{\uparrow}^{\dagger} f_{\uparrow} \right] \\
&+ \left[\frac{\lambda_{R1}}{\sqrt{2}} (\sin \phi) + \frac{\lambda_{L2}}{\sqrt{2}} (\cos \phi) \right] \left[d_{\uparrow} f_{\uparrow} - d_{\uparrow}^{\dagger} f_{\uparrow}^{\dagger} \right] \\
&+ \left[\frac{\lambda_{R1}}{\sqrt{2}} (\cos \phi) - \frac{\lambda_{L2}}{\sqrt{2}} (\sin \phi) \right] \left[-d_{\downarrow} f_{\uparrow}^{\dagger} + d_{\downarrow}^{\dagger} f_{\uparrow} \right] \\
&+ \left[\frac{\lambda_{R1}}{\sqrt{2}} (\cos \phi) - \frac{\lambda_{L2}}{\sqrt{2}} (\sin \phi) \right] \left[d_{\downarrow} f_{\uparrow} - d_{\downarrow}^{\dagger} f_{\uparrow}^{\dagger} \right] \\
\\
&= \left[-\frac{\lambda_{R1}}{\sqrt{2}} (\sin \phi) - \frac{\lambda_{L2}}{\sqrt{2}} (\cos \phi) \right] \left[d_{\uparrow} f_{\uparrow}^{\dagger} - d_{\uparrow}^{\dagger} f_{\uparrow} \right] \\
&+ \left[\frac{\lambda_{R1}}{\sqrt{2}} (\sin \phi) + \frac{\lambda_{L2}}{\sqrt{2}} (\cos \phi) \right] \left[d_{\uparrow} f_{\uparrow} - d_{\uparrow}^{\dagger} f_{\uparrow}^{\dagger} \right] \\
&+ \left[\frac{\lambda_{L2}}{\sqrt{2}} (\sin \phi) - \frac{\lambda_{R1}}{\sqrt{2}} (\cos \phi) \right] \left[d_{\downarrow} f_{\uparrow}^{\dagger} - d_{\downarrow}^{\dagger} f_{\uparrow} \right] \\
&+ \left[\frac{\lambda_{R1}}{\sqrt{2}} (\cos \phi) - \frac{\lambda_{L2}}{\sqrt{2}} (\sin \phi) \right] \left[d_{\downarrow} f_{\uparrow} - d_{\downarrow}^{\dagger} f_{\uparrow}^{\dagger} \right]
\end{aligned} \tag{A.40}$$

As a result we have:

$$\begin{aligned}
\mathcal{H}_{MFS} = & \varepsilon_M \left(f_{\uparrow}^{\dagger} f_{\uparrow} - \frac{1}{2} \right) \\
& + \left[\frac{\lambda_{R2}}{\sqrt{2}} (\sin \phi) + \frac{\lambda_{L1}}{\sqrt{2}} (\cos \phi) \right] \left[d_{\uparrow} f_{\uparrow}^{\dagger} - d_{\uparrow}^{\dagger} f_{\uparrow} \right] \\
& + \left[\frac{\lambda_{R2}}{\sqrt{2}} (\sin \phi) + \frac{\lambda_{L1}}{\sqrt{2}} (\cos \phi) \right] \left[d_{\uparrow} f_{\uparrow} - d_{\uparrow}^{\dagger} f_{\uparrow}^{\dagger} \right] \\
& + \left[\frac{\lambda_{R2}}{\sqrt{2}} (\cos \phi) - \frac{\lambda_{L1}}{\sqrt{2}} (\sin \phi) \right] \left[d_{\downarrow} f_{\uparrow}^{\dagger} - d_{\downarrow}^{\dagger} f_{\uparrow} \right] \\
& + \left[\frac{\lambda_{R2}}{\sqrt{2}} (\cos \phi) - \frac{\lambda_{L1}}{\sqrt{2}} (\sin \phi) \right] \left[d_{\downarrow} f_{\uparrow} - d_{\downarrow}^{\dagger} f_{\uparrow}^{\dagger} \right] \\
& + \left[-\frac{\lambda_{R1}}{\sqrt{2}} (\sin \phi) - \frac{\lambda_{L2}}{\sqrt{2}} (\cos \phi) \right] \left[d_{\uparrow} f_{\uparrow}^{\dagger} - d_{\uparrow}^{\dagger} f_{\uparrow} \right] \\
& + \left[\frac{\lambda_{R1}}{\sqrt{2}} (\sin \phi) + \frac{\lambda_{L2}}{\sqrt{2}} (\cos \phi) \right] \left[d_{\uparrow} f_{\uparrow} - d_{\uparrow}^{\dagger} f_{\uparrow}^{\dagger} \right] \\
& + \left[\frac{\lambda_{L2}}{\sqrt{2}} (\sin \phi) - \frac{\lambda_{R1}}{\sqrt{2}} (\cos \phi) \right] \left[d_{\downarrow} f_{\uparrow}^{\dagger} - d_{\downarrow}^{\dagger} f_{\uparrow} \right] \\
& + \left[\frac{\lambda_{R1}}{\sqrt{2}} (\cos \phi) - \frac{\lambda_{L2}}{\sqrt{2}} (\sin \phi) \right] \left[d_{\downarrow} f_{\uparrow} - d_{\downarrow}^{\dagger} f_{\uparrow}^{\dagger} \right]
\end{aligned} \tag{A.41}$$

For the sake of simplicity, let's consider

$$\lambda_{\uparrow 1} = \left[\frac{\lambda_{R2}}{\sqrt{2}} (\sin \phi) + \frac{\lambda_{L1}}{\sqrt{2}} (\cos \phi) \right] \tag{A.42}$$

$$\lambda_{\downarrow 1} = \left[\frac{\lambda_{R2}}{\sqrt{2}} (\cos \phi) - \frac{\lambda_{L1}}{\sqrt{2}} (\sin \phi) \right] \tag{A.43}$$

$$\lambda_{\uparrow 2} = \left[\frac{\lambda_{R1}}{\sqrt{2}} (\sin \phi) + \frac{\lambda_{L2}}{\sqrt{2}} (\cos \phi) \right] \tag{A.44}$$

$$\lambda_{\downarrow 2} = \left[\frac{\lambda_{R1}}{\sqrt{2}} (\cos \phi) - \frac{\lambda_{L2}}{\sqrt{2}} (\sin \phi) \right] \tag{A.45}$$

The Hamiltonian

$$\begin{aligned}
\mathcal{H}_{MFs} = & \varepsilon_M \left(f_{\uparrow}^{\dagger} f_{\uparrow} - \frac{1}{2} \right) \\
& + \lambda_{\uparrow T} \left[d_{\uparrow} f_{\uparrow}^{\dagger} - d_{\uparrow}^{\dagger} f_{\uparrow} \right] + \lambda_{\uparrow T} \left[d_{\uparrow} f_{\uparrow} - d_{\uparrow}^{\dagger} f_{\uparrow}^{\dagger} \right] \\
& + \lambda_{\downarrow T} \left[d_{\downarrow} f_{\uparrow}^{\dagger} - d_{\downarrow}^{\dagger} f_{\uparrow} \right] + \lambda_{\downarrow T} \left[d_{\downarrow} f_{\uparrow} - d_{\downarrow}^{\dagger} f_{\uparrow}^{\dagger} \right] \\
& - \lambda_{\uparrow B} \left[d_{\uparrow} f_{\uparrow}^{\dagger} - d_{\uparrow}^{\dagger} f_{\uparrow} \right] + \lambda_{\uparrow B} \left[d_{\uparrow} f_{\uparrow} - d_{\uparrow}^{\dagger} f_{\uparrow}^{\dagger} \right] \\
& - \lambda_{\downarrow B} \left[d_{\downarrow} f_{\uparrow}^{\dagger} - d_{\downarrow}^{\dagger} f_{\uparrow} \right] + \lambda_{\downarrow B} \left[d_{\downarrow} f_{\uparrow} - d_{\downarrow}^{\dagger} f_{\uparrow}^{\dagger} \right]
\end{aligned} \tag{A.46}$$

Then

$$\begin{aligned}
\mathcal{H}_{MFs} = & \varepsilon_M \left(f_{\uparrow}^{\dagger} f_{\uparrow} - \frac{1}{2} \right) \\
& + \lambda_{\uparrow 1} \left[\left(d_{\uparrow} f_{\uparrow}^{\dagger} - d_{\uparrow}^{\dagger} f_{\uparrow} \right) + \left(d_{\uparrow} f_{\uparrow} - d_{\uparrow}^{\dagger} f_{\uparrow}^{\dagger} \right) \right] \\
& + \lambda_{\downarrow 1} \left[\left(d_{\downarrow} f_{\uparrow}^{\dagger} - d_{\downarrow}^{\dagger} f_{\uparrow} \right) + \left(d_{\downarrow} f_{\uparrow} - d_{\downarrow}^{\dagger} f_{\uparrow}^{\dagger} \right) \right] \\
& + \lambda_{\uparrow 2} \left[\left(d_{\uparrow} f_{\uparrow} - d_{\uparrow}^{\dagger} f_{\uparrow}^{\dagger} \right) - \left(d_{\uparrow} f_{\uparrow}^{\dagger} - d_{\uparrow}^{\dagger} f_{\uparrow} \right) \right] \\
& + \lambda_{\downarrow 2} \left[\left(d_{\downarrow} f_{\uparrow} - d_{\downarrow}^{\dagger} f_{\uparrow}^{\dagger} \right) - \left(d_{\downarrow} f_{\uparrow}^{\dagger} - d_{\downarrow}^{\dagger} f_{\uparrow} \right) \right] \\
= & \varepsilon_M \left(f_{\uparrow}^{\dagger} f_{\uparrow} - \frac{1}{2} \right) \\
& + \sum_{\sigma} \lambda_{\sigma 1} \left[\left(d_{\sigma} f_{\uparrow}^{\dagger} - d_{\sigma}^{\dagger} f_{\uparrow} \right) + \left(d_{\sigma} f_{\uparrow} - d_{\sigma}^{\dagger} f_{\uparrow}^{\dagger} \right) \right] \\
& + \sum_{\sigma} \lambda_{\sigma 2} \left[\left(d_{\sigma} f_{\uparrow} - d_{\sigma}^{\dagger} f_{\uparrow}^{\dagger} \right) - \left(d_{\sigma} f_{\uparrow}^{\dagger} - d_{\sigma}^{\dagger} f_{\uparrow} \right) \right]
\end{aligned}$$

Thus, we have the Hamiltonian

$$\begin{aligned}
\mathcal{H}_{MFs} = & \varepsilon_M \left(f_{\uparrow}^{\dagger} f_{\uparrow} - \frac{1}{2} \right) + \sum_{\sigma} \lambda_{\sigma 1} \left[\left(d_{\sigma} f_{\uparrow}^{\dagger} - d_{\sigma}^{\dagger} f_{\uparrow} \right) + \left(d_{\sigma} f_{\uparrow} - d_{\sigma}^{\dagger} f_{\uparrow}^{\dagger} \right) \right] \\
& + \sum_{\sigma} \lambda_{\sigma 2} \left[\left(d_{\sigma} f_{\uparrow} - d_{\sigma}^{\dagger} f_{\uparrow}^{\dagger} \right) - \left(d_{\sigma} f_{\uparrow}^{\dagger} - d_{\sigma}^{\dagger} f_{\uparrow} \right) \right]
\end{aligned} \tag{A.47}$$

or

$$\begin{aligned}\mathcal{H}_{MFS} &= \varepsilon_M \left(f_{\uparrow}^{\dagger} f_{\uparrow} - \frac{1}{2} \right) + \sum_{\sigma} \lambda_{\sigma 1} \left[\left(d_{\sigma} f_{\uparrow}^{\dagger} + f_{\uparrow} d_{\sigma}^{\dagger} \right) + \left(d_{\sigma} f_{\uparrow} + f_{\uparrow}^{\dagger} d_{\sigma}^{\dagger} \right) \right] \\ &+ \sum_{\sigma} \lambda_{\sigma 2} \left[\left(d_{\sigma} f_{\uparrow} + f_{\uparrow}^{\dagger} d_{\sigma}^{\dagger} \right) - \left(d_{\sigma} f_{\uparrow}^{\dagger} + f_{\uparrow} d_{\sigma}^{\dagger} \right) \right].\end{aligned}\quad (\text{A.48})$$

Working with the terms

$$\begin{aligned}\mathcal{H}_{MFS} &= \varepsilon_M \left(f_{\uparrow}^{\dagger} f_{\uparrow} - \frac{1}{2} \right) \\ &+ \sum_{\sigma} \left[(\lambda_{\sigma 1} - \lambda_{\sigma 2}) \left(d_{\sigma} f_{\uparrow}^{\dagger} + f_{\uparrow} d_{\sigma}^{\dagger} \right) + (\lambda_{\sigma 1} + \lambda_{\sigma 2}) \left(d_{\sigma} f_{\uparrow} + f_{\uparrow}^{\dagger} d_{\sigma}^{\dagger} \right) \right],\end{aligned}\quad (\text{A.49})$$

or

$$\begin{aligned}\mathcal{H}_{MFS} &= \varepsilon_M \left(f_{\uparrow}^{\dagger} f_{\uparrow} - \frac{1}{2} \right) + (\lambda_{\uparrow 1} - \lambda_{\uparrow 2}) \left(d_{\uparrow} f_{\uparrow}^{\dagger} + f_{\uparrow} d_{\uparrow}^{\dagger} \right) + (\lambda_{\uparrow 1} + \lambda_{\uparrow 2}) \left(d_{\uparrow} f_{\uparrow} + f_{\uparrow}^{\dagger} d_{\uparrow}^{\dagger} \right) \\ &+ (\lambda_{\downarrow 1} - \lambda_{\downarrow 2}) \left(d_{\downarrow} f_{\uparrow}^{\dagger} + f_{\uparrow} d_{\downarrow}^{\dagger} \right) + (\lambda_{\downarrow 1} + \lambda_{\downarrow 2}) \left(d_{\downarrow} f_{\uparrow} + f_{\uparrow}^{\dagger} d_{\downarrow}^{\dagger} \right)\end{aligned}\quad (\text{A.50})$$

Now we will analyze the terms $(\lambda_{\sigma 1} - \lambda_{\sigma 2})$ and $(\lambda_{\sigma 1} + \lambda_{\sigma 2})$.

$$\begin{aligned}(\lambda_{\uparrow 1} - \lambda_{\uparrow 2}) &= \left[\frac{\lambda_{R2}}{\sqrt{2}} (\sin \phi) + \frac{\lambda_{L1}}{\sqrt{2}} (\cos \phi) \right] - \left[\frac{\lambda_{R1}}{\sqrt{2}} (\sin \phi) + \frac{\lambda_{L2}}{\sqrt{2}} (\cos \phi) \right] \\ &= \frac{(\sin \phi)}{\sqrt{2}} (\lambda_{R2} - \lambda_{R1}) + \frac{(\cos \phi)}{\sqrt{2}} (\lambda_{L1} - \lambda_{L2})\end{aligned}\quad (\text{A.51})$$

$$\begin{aligned}(\lambda_{\downarrow 1} - \lambda_{\downarrow 2}) &= \left[\frac{\lambda_{R2}}{\sqrt{2}} (\cos \phi) - \frac{\lambda_{L1}}{\sqrt{2}} (\sin \phi) \right] - \left[\frac{\lambda_{R1}}{\sqrt{2}} (\cos \phi) - \frac{\lambda_{L2}}{\sqrt{2}} (\sin \phi) \right] \\ &= \frac{(\cos \phi)}{\sqrt{2}} (\lambda_{R2} - \lambda_{R1}) + \frac{(\sin \phi)}{\sqrt{2}} (-\lambda_{L1} + \lambda_{L2})\end{aligned}\quad (\text{A.52})$$

$$\begin{aligned}
(\lambda_{\uparrow 1} + \lambda_{\uparrow 2}) &= \left[\frac{\lambda_{R2}}{\sqrt{2}} (\sin \phi) + \frac{\lambda_{L1}}{\sqrt{2}} (\cos \phi) \right] + \left[\frac{\lambda_{R1}}{\sqrt{2}} (\sin \phi) + \frac{\lambda_{L2}}{\sqrt{2}} (\cos \phi) \right] \\
&= \frac{(\sin \phi)}{\sqrt{2}} (\lambda_{R2} + \lambda_{R1}) + \frac{(\cos \phi)}{\sqrt{2}} (\lambda_{L1} + \lambda_{L2})
\end{aligned} \tag{A.53}$$

$$\begin{aligned}
(\lambda_{\downarrow 1} + \lambda_{\downarrow 2}) &= \left[\frac{\lambda_{R2}}{\sqrt{2}} (\cos \phi) - \frac{\lambda_{L1}}{\sqrt{2}} (\sin \phi) \right] + \left[\frac{\lambda_{R1}}{\sqrt{2}} (\cos \phi) - \frac{\lambda_{L2}}{\sqrt{2}} (\sin \phi) \right] \\
&= \frac{(\cos \phi)}{\sqrt{2}} (\lambda_{R2} + \lambda_{R1}) - \frac{(\sin \phi)}{\sqrt{2}} (\lambda_{L1} + \lambda_{L2})
\end{aligned} \tag{A.54}$$

We can consider the term $(\lambda_{\sigma 1} - \lambda_{\sigma 2})$ as the hopping term t_σ and the term $(\lambda_{\sigma 1} + \lambda_{\sigma 2})$ as the Cooper pair term Δ_σ . Then we have:

$$\begin{aligned}
\mathcal{H}_{MFs} &= \varepsilon_M \left(f_\uparrow^\dagger f_\uparrow - \frac{1}{2} \right) \\
&+ \sum_\sigma \left[t_\sigma \left(d_\sigma f_\uparrow^\dagger + f_\uparrow d_\sigma^\dagger \right) + \Delta_\sigma \left(d_\sigma f_\uparrow + f_\uparrow^\dagger d_\sigma^\dagger \right) \right].
\end{aligned} \tag{A.55}$$

A.1.4 Full Hamiltonian

Therefore, we can write the full Hamiltonian

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_{AM} + \mathcal{H}_{MFs} \tag{A.56}$$

$$\begin{aligned}
\mathcal{H} &= \sum_{k,\sigma} \epsilon c_{\sigma k}^\dagger c_{\sigma k} + \sum_\sigma \epsilon_{d,\sigma} d_\sigma^\dagger d_\sigma + V \sum_{k,\sigma} \left(c_{\sigma k}^\dagger d_\sigma + d_\sigma^\dagger c_{\sigma k} \right) + U \left(d_\uparrow^\dagger d_\uparrow d_\downarrow^\dagger d_\downarrow \right) \\
&+ \varepsilon_M \left(f_\uparrow^\dagger f_\uparrow - \frac{1}{2} \right) + \sum_\sigma \left[t_\sigma \left(d_\sigma f_\uparrow^\dagger + f_\uparrow d_\sigma^\dagger \right) + \Delta_\sigma \left(d_\sigma f_\uparrow + f_\uparrow^\dagger d_\sigma^\dagger \right) \right].
\end{aligned} \tag{A.57}$$

Without the Coulomb term

A.2 Equation of motion (EOM)

As we have above. The Hamiltonian

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_N + \mathcal{H}_{QD} + \mathcal{H}_{N-QD} + \mathcal{H}_{MFs}, \quad (\text{A.58})$$

where

$$\mathcal{H}_N = \sum_{\mathbf{k},\sigma} \epsilon c_{\sigma\mathbf{k}}^\dagger c_{\sigma\mathbf{k}}, \quad (\text{A.59})$$

$$\mathcal{H}_{QD} = \sum_{\sigma} \epsilon_{d,\sigma} d_\sigma^\dagger d_\sigma + U \left(d_\uparrow^\dagger d_\uparrow d_\downarrow^\dagger d_\downarrow \right), \quad (\text{A.60})$$

$$\mathcal{H}_{N-QD} = V \sum_{\mathbf{k},\sigma} \left(c_{\sigma\mathbf{k}}^\dagger d_\sigma + d_\sigma^\dagger c_{\sigma\mathbf{k}} \right), \quad (\text{A.61})$$

and¹

$$\mathcal{H}_{MFs} = \varepsilon_M \left(f_\uparrow^\dagger f_\uparrow - \frac{1}{2} \right) + \sum_{\sigma} \left[t_\sigma \left(d_\sigma f_\uparrow^\dagger + f_\uparrow d_\sigma^\dagger \right) + \Delta_\sigma \left(d_\sigma f_\uparrow + f_\uparrow^\dagger d_\sigma^\dagger \right) \right]. \quad (\text{A.62})$$

In order to analyze the DOS of the quantum dot, we make use of the Green's function (GF) formalism using the equation of motion technique (EOM), which can be summarized as (Zubarev notation):

$$\omega^+ \left\langle \left\langle A_{i\sigma}; B_{j\sigma'}^\dagger \right\rangle \right\rangle = \left\langle \left[A_{i\sigma}, B_{j\sigma'}^\dagger \right]_+ \right\rangle + \left\langle \left\langle [A_{i\sigma}, \mathcal{H}]; B_{j\sigma'}^\dagger \right\rangle \right\rangle, \quad (\text{A.63})$$

where ω^+ is the spectral frequency, with $\omega^+ \rightarrow (\omega + i\eta^+)$, $\eta^+ \rightarrow 0^+$. The GF of the QD is define as

¹ t_σ is tunneling term and Δ_σ is the electron pairing energy.

$$G_{QD}^{\sigma}(\omega) = \langle\langle d_{\sigma}; d_{\sigma}^{\dagger} \rangle\rangle \quad (\text{A.64})$$

and the LDOS of QD is given by

$$\rho_{QD}^{\sigma}(\omega) = -\frac{1}{\pi} \text{Im} [\langle\langle d_{\sigma}; d_{\sigma}^{\dagger} \rangle\rangle]. \quad (\text{A.65})$$

At first moment, we are interested in the Coulomb blockade regime of QD coupled to a superconductor, where the relevant physics can be captured within a self-consistent Hartree-Fock mean-field approximation when the system is away from Kondo regime. This allows to write the interacting term as

$$U n_{d\uparrow} n_{d\downarrow} \approx U (n_{d\uparrow} \langle n_{d\downarrow} \rangle + \langle n_{d\uparrow} \rangle n_{d\downarrow} - \langle n_{d\uparrow} \rangle \langle n_{d\downarrow} \rangle) \quad (\text{A.66})$$

and thus

$$\mathcal{H}_{QD} = \sum_{\sigma} \epsilon_{d,\sigma} d_{\sigma}^{\dagger} d_{\sigma} + U (d_{\uparrow}^{\dagger} d_{\uparrow} d_{\downarrow}^{\dagger} d_{\downarrow}),$$

$$\mathcal{H}_{QD} \approx \sum_{\sigma} \tilde{\epsilon}_{d\sigma} d_{\sigma}^{\dagger} d_{\sigma} - U \langle n_{d\uparrow} \rangle \langle n_{d\downarrow} \rangle \quad (\text{A.67})$$

with $\tilde{\epsilon}_{d\sigma} = \epsilon_{d\sigma} + U \langle n_{d\bar{\sigma}} \rangle$, where $\bar{\sigma}$ is the opposite of σ .

Then we have the Hamiltonian

$$\begin{aligned} \mathcal{H} &= \sum_{\mathbf{k},\sigma} \epsilon c_{\sigma\mathbf{k}}^{\dagger} c_{\sigma\mathbf{k}} + \sum_{\sigma} \tilde{\epsilon}_{d\sigma} d_{\sigma}^{\dagger} d_{\sigma} - U \langle n_{d\uparrow} \rangle \langle n_{d\downarrow} \rangle + V \sum_{\mathbf{k},\sigma} (c_{\sigma\mathbf{k}}^{\dagger} d_{\sigma} + d_{\sigma}^{\dagger} c_{\sigma\mathbf{k}}) + \varepsilon_M \left(f_{\uparrow}^{\dagger} f_{\uparrow} - \frac{1}{2} \right) \\ &+ \sum_{\sigma} \left[t_{\sigma} (d_{\sigma} f_{\uparrow}^{\dagger} + f_{\uparrow} d_{\sigma}^{\dagger}) + \Delta_{\sigma} (d_{\sigma} f_{\uparrow} + f_{\uparrow}^{\dagger} d_{\sigma}^{\dagger}) \right]. \end{aligned} \quad (\text{A.68})$$

Now, let's apply the EOM in $G_{QD}^{\sigma}(\omega)$ ²:

²Remember, the term $U \langle n_{d\uparrow} \rangle \langle n_{d\downarrow} \rangle$ is zero in EOM method, because is constant.

$$\begin{aligned}\omega^+ \langle\langle d_\sigma; d_\sigma^\dagger \rangle\rangle &= \left\langle [d_\sigma, d_\sigma^\dagger]_+ \right\rangle + \langle\langle [d_\sigma, \mathcal{H}]; d_\sigma^\dagger \rangle\rangle \\ &= 1 + \langle\langle [d_\sigma, \mathcal{H}]; d_\sigma^\dagger \rangle\rangle,\end{aligned}\quad (\text{A.69})$$

$$\begin{aligned}[d_\sigma, \mathcal{H}] &= [d_\sigma, \mathcal{H}_N] + [d_\sigma, \mathcal{H}_{QD}] + [d_\sigma, \mathcal{H}_{N-QD}] + [d_\sigma, \mathcal{H}_{MFs}] \\ &= [d_\sigma, \mathcal{H}_{QD}] + [d_\sigma, \mathcal{H}_{N-QD}].\end{aligned}\quad (\text{A.70})$$

$$\begin{aligned}[d_\sigma, \mathcal{H}_{QD}] &= \sum_{\sigma'} \tilde{\varepsilon}_{d\sigma'} \left[d_\sigma, d_{\sigma'}^\dagger d_{\sigma'} \right] \\ &= \sum_{\sigma'} \tilde{\varepsilon}_{d\sigma'} \left[d_\sigma d_{\sigma'}^\dagger d_{\sigma'} - d_{\sigma'}^\dagger d_{\sigma'} d_\sigma \right] \\ &= \sum_{\sigma'} \tilde{\varepsilon}_{d\sigma'} \left[\left(\delta_{\sigma\sigma'} - d_{\sigma'}^\dagger d_\sigma \right) d_{\sigma'} - d_{\sigma'}^\dagger d_{\sigma'} d_\sigma \right] \\ &= \sum_{\sigma'} \tilde{\varepsilon}_{d\sigma'} \left[\left(\delta_{\sigma\sigma'} d_{\sigma'} - d_{\sigma'}^\dagger d_\sigma \right) d_{\sigma'} - d_{\sigma'}^\dagger d_{\sigma'} d_\sigma \right] \\ &= \sum_{\sigma'} \tilde{\varepsilon}_{d\sigma'} \left[\delta_{\sigma\sigma'} d_{\sigma'} + d_{\sigma'}^\dagger d_{\sigma'} d_\sigma - d_{\sigma'}^\dagger d_{\sigma'} d_\sigma \right] \\ &= \sum_{\sigma'} \delta_{\sigma\sigma'} \tilde{\varepsilon}_{d\sigma'} d_{\sigma'} \\ &= \tilde{\varepsilon}_{d\sigma} d_\sigma.\end{aligned}\quad (\text{A.71})$$

$$\begin{aligned}
[d_\sigma, \mathcal{H}_{N-QD}] &= V \sum_{\mathbf{k}, \sigma'} \left[d_\sigma, \left(c_{\sigma' \mathbf{k}}^\dagger d_{\sigma'} + d_{\sigma' \mathbf{k}}^\dagger c_{\sigma' \mathbf{k}} \right) \right] \\
&= V \sum_{\mathbf{k}, \sigma'} \left[\left(d_\sigma c_{\sigma' \mathbf{k}}^\dagger d_{\sigma'} + d_\sigma d_{\sigma'}^\dagger c_{\sigma' \mathbf{k}} \right) - \left(c_{\sigma' \mathbf{k}}^\dagger d_{\sigma'} d_\sigma + d_{\sigma'}^\dagger c_{\sigma' \mathbf{k}} d_\sigma \right) \right] \\
&= V \sum_{\mathbf{k}, \sigma'} \left[\left(c_{\sigma' \mathbf{k}}^\dagger d_{\sigma'} d_\sigma + \left(\delta_{\sigma \sigma'} - d_{\sigma'}^\dagger d_\sigma \right) c_{\sigma' \mathbf{k}} \right) - \left(c_{\sigma' \mathbf{k}}^\dagger d_{\sigma'} d_\sigma + d_{\sigma'}^\dagger c_{\sigma' \mathbf{k}} d_\sigma \right) \right] \\
&= V \sum_{\mathbf{k}, \sigma'} \left[\left(c_{\sigma' \mathbf{k}}^\dagger d_{\sigma'} d_\sigma + \delta_{\sigma \sigma'} c_{\sigma' \mathbf{k}} - d_{\sigma'}^\dagger d_\sigma c_{\sigma' \mathbf{k}} \right) - \left(c_{\sigma' \mathbf{k}}^\dagger d_{\sigma'} d_\sigma + d_{\sigma'}^\dagger c_{\sigma' \mathbf{k}} d_\sigma \right) \right] \\
&= V \sum_{\mathbf{k}, \sigma'} \left[c_{\sigma' \mathbf{k}}^\dagger d_{\sigma'} d_\sigma + \delta_{\sigma \sigma'} c_{\sigma' \mathbf{k}} + d_{\sigma'}^\dagger c_{\sigma' \mathbf{k}} d_\sigma - c_{\sigma' \mathbf{k}}^\dagger d_{\sigma'} d_\sigma - d_{\sigma'}^\dagger c_{\sigma' \mathbf{k}} d_\sigma \right] \\
&= V \sum_{\mathbf{k}, \sigma'} \delta_{\sigma \sigma'} c_{\sigma' \mathbf{k}} \\
&= V \sum_{\mathbf{k}} c_{\sigma \mathbf{k}}. \tag{A.72}
\end{aligned}$$

Then

$$\omega^+ \langle\langle d_\sigma; d_\sigma^\dagger \rangle\rangle = 1 + \tilde{\varepsilon}_{d\sigma} \langle\langle d_\sigma; d_\sigma^\dagger \rangle\rangle + V \sum_{\mathbf{k}} \langle\langle c_{\sigma \mathbf{k}}; d_\sigma^\dagger \rangle\rangle + \langle\langle [d_\sigma, \mathcal{H}_{MFs}]; d_\sigma^\dagger \rangle\rangle. \tag{A.73}$$

Now we need to determine $\langle\langle c_{\sigma \mathbf{k}}; d_\sigma^\dagger \rangle\rangle$

$$\omega^+ \langle\langle c_{\sigma \mathbf{k}}; d_\sigma^\dagger \rangle\rangle = \langle [c_{\sigma \mathbf{k}}, d_\sigma^\dagger]_+ \rangle + \langle\langle [c_{\sigma \mathbf{k}}, \mathcal{H}]; d_\sigma^\dagger \rangle\rangle. \tag{A.74}$$

$$\begin{aligned}
[c_{\sigma \mathbf{k}}, \mathcal{H}] &= [c_{\sigma \mathbf{k}}, \mathcal{H}_N] + [c_{\sigma \mathbf{k}}, \mathcal{H}_{QD}] + [c_{\sigma \mathbf{k}}, \mathcal{H}_{N-QD}] + [d_\sigma, \mathcal{H}_{MFs}] \\
&= [c_{\sigma \mathbf{k}}, \mathcal{H}_N] + [c_{\sigma \mathbf{k}}, \mathcal{H}_{N-QD}]. \tag{A.75}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
[c_{\sigma\mathbf{k}}, \mathcal{H}_N] &= \sum_{\mathbf{k}', \sigma'} \epsilon \left[c_{\sigma\mathbf{k}}, c_{\sigma'\mathbf{k}'}^\dagger c_{\sigma'\mathbf{k}'} \right] \\
&= \sum_{\mathbf{k}', \sigma'} \epsilon \left[c_{\sigma\mathbf{k}} c_{\sigma'\mathbf{k}'}^\dagger c_{\sigma'\mathbf{k}'} - c_{\sigma'\mathbf{k}'}^\dagger c_{\sigma'\mathbf{k}'} c_{\sigma'\mathbf{k}'} c_{\sigma\mathbf{k}} \right] \\
&= \sum_{\mathbf{k}', \sigma'} \epsilon \left[\left(\delta_{\sigma\sigma'} \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} - c_{\sigma'\mathbf{k}'}^\dagger c_{\sigma\mathbf{k}} \right) c_{\sigma'\mathbf{k}'} - c_{\sigma'\mathbf{k}'}^\dagger c_{\sigma'\mathbf{k}'} c_{\sigma'\mathbf{k}'} c_{\sigma\mathbf{k}} \right] \\
&= \sum_{\mathbf{k}', \sigma'} \epsilon \left[c_{\sigma'\mathbf{k}'} \delta_{\sigma\sigma'} \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} + c_{\sigma'\mathbf{k}'}^\dagger c_{\sigma'\mathbf{k}'} c_{\sigma'\mathbf{k}'} c_{\sigma\mathbf{k}} - c_{\sigma'\mathbf{k}'}^\dagger c_{\sigma'\mathbf{k}'} c_{\sigma'\mathbf{k}'} c_{\sigma\mathbf{k}} \right] \\
&= \sum_{\mathbf{k}', \sigma'} \epsilon c_{\sigma'\mathbf{k}'} \delta_{\sigma\sigma'} \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \\
&= \epsilon c_{\sigma\mathbf{k}}. \tag{A.76}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
[c_{\sigma\mathbf{k}}, \mathcal{H}_{N-QD}] &= \left[c_{\sigma\mathbf{k}}, V \sum_{\mathbf{k}', \sigma'} \left(c_{\sigma'\mathbf{k}'}^\dagger d_{\sigma'} + d_{\sigma'}^\dagger c_{\sigma'\mathbf{k}'} \right) \right] \\
&= V \sum_{\mathbf{k}', \sigma'} \left[\left(c_{\sigma\mathbf{k}} c_{\sigma'\mathbf{k}'}^\dagger d_{\sigma'} + c_{\sigma\mathbf{k}} d_{\sigma'}^\dagger c_{\sigma'\mathbf{k}'} \right) - \left(c_{\sigma'\mathbf{k}'}^\dagger d_{\sigma'} c_{\sigma\mathbf{k}} + d_{\sigma'}^\dagger c_{\sigma'\mathbf{k}'} c_{\sigma\mathbf{k}} \right) \right] \\
&= V \sum_{\mathbf{k}', \sigma'} \left[\left(\left(\delta_{\sigma\sigma'} \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} - c_{\sigma'\mathbf{k}'}^\dagger c_{\sigma\mathbf{k}} \right) d_{\sigma'} + d_{\sigma'}^\dagger c_{\sigma'\mathbf{k}'} c_{\sigma\mathbf{k}} \right) - \left(c_{\sigma'\mathbf{k}'}^\dagger d_{\sigma'} c_{\sigma\mathbf{k}} + d_{\sigma'}^\dagger c_{\sigma'\mathbf{k}'} c_{\sigma\mathbf{k}} \right) \right] \\
&= V \sum_{\mathbf{k}', \sigma'} \left[\delta_{\sigma\sigma'} \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} d_{\sigma'} - c_{\sigma'\mathbf{k}'}^\dagger c_{\sigma\mathbf{k}} d_{\sigma'} + d_{\sigma'}^\dagger c_{\sigma'\mathbf{k}'} c_{\sigma\mathbf{k}} - c_{\sigma'\mathbf{k}'}^\dagger d_{\sigma'} c_{\sigma\mathbf{k}} - d_{\sigma'}^\dagger c_{\sigma'\mathbf{k}'} c_{\sigma\mathbf{k}} \right] \\
&= V \sum_{\mathbf{k}', \sigma'} \left[\delta_{\sigma\sigma'} \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} d_{\sigma'} + c_{\sigma'\mathbf{k}'}^\dagger d_{\sigma'} c_{\sigma\mathbf{k}} + d_{\sigma'}^\dagger c_{\sigma'\mathbf{k}'} c_{\sigma\mathbf{k}} - c_{\sigma'\mathbf{k}'}^\dagger d_{\sigma'} c_{\sigma\mathbf{k}} - d_{\sigma'}^\dagger c_{\sigma'\mathbf{k}'} c_{\sigma\mathbf{k}} \right] \\
&= V \sum_{\mathbf{k}', \sigma'} \delta_{\sigma\sigma'} \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} d_{\sigma'} \\
&= V d_\sigma. \tag{A.77}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\omega^+ \langle \langle c_{\sigma\mathbf{k}}; d_\sigma^\dagger \rangle \rangle &= 0 + \epsilon \langle \langle c_{\sigma\mathbf{k}}; d_\sigma^\dagger \rangle \rangle + V \langle \langle d_\sigma; d_\sigma^\dagger \rangle \rangle \\
(\omega^+ - \epsilon) \langle \langle c_{\sigma\mathbf{k}}; d_\sigma^\dagger \rangle \rangle &= V \langle \langle d_\sigma; d_\sigma^\dagger \rangle \rangle
\end{aligned}$$

$$\langle \langle c_{\sigma\mathbf{k}}; d_\sigma^\dagger \rangle \rangle = \frac{V}{(\omega^+ - \epsilon)} \langle \langle d_\sigma; d_\sigma^\dagger \rangle \rangle. \tag{A.78}$$

Substituting Eq.(A.78) in Eq.(A.73), we get:

$$\begin{aligned}
 \omega^+ \langle\langle d_\sigma; d_\sigma^\dagger \rangle\rangle &= 1 + \tilde{\varepsilon}_{d\sigma} \langle\langle d_\sigma; d_\sigma^\dagger \rangle\rangle + V \sum_{\mathbf{k}} \left[\frac{V}{(\omega^+ - \epsilon)} \langle\langle d_\sigma; d_\sigma^\dagger \rangle\rangle \right] + \langle\langle [d_\sigma, \mathcal{H}_{MFS}] ; d_\sigma^\dagger \rangle\rangle \\
 &= 1 + \tilde{\varepsilon}_{d\sigma} \langle\langle d_\sigma; d_\sigma^\dagger \rangle\rangle + \sum_{\mathbf{k}} \frac{V^2}{(\omega^+ - \epsilon)} \langle\langle d_\sigma; d_\sigma^\dagger \rangle\rangle + \langle\langle [d_\sigma, \mathcal{H}_{MFS}] ; d_\sigma^\dagger \rangle\rangle \\
 \left(\omega^+ - \tilde{\varepsilon}_{d\sigma} - \sum_{\mathbf{k}} \frac{V^2}{(\omega^+ - \epsilon)} \right) \langle\langle d_\sigma; d_\sigma^\dagger \rangle\rangle &= 1 + \langle\langle [d_\sigma, \mathcal{H}_{MFS}] ; d_\sigma^\dagger \rangle\rangle
 \end{aligned} \tag{A.79}$$

Let's define

$$\sum_{\mathbf{k}} \frac{V^2}{(\omega^+ - \epsilon)} = -i\Gamma_{N\sigma}.$$

Thus

$$(\omega^+ - \tilde{\varepsilon}_{d\sigma} + i\Gamma_{N\sigma}) \langle\langle d_\sigma; d_\sigma^\dagger \rangle\rangle = 1 + \langle\langle [d_\sigma, \mathcal{H}_{MFS}] ; d_\sigma^\dagger \rangle\rangle. \tag{A.80}$$

Now we need to calculated terms of nanowire.

$$[d_\sigma, \mathcal{H}_{MFS}] = \left[d_\sigma, \sum_{\sigma'} t_{\sigma'} \left(d_{\sigma'} f_\uparrow^\dagger + f_\uparrow d_{\sigma'}^\dagger \right) \right] + \left[d_\sigma, \sum_{\sigma'} \Delta_{\sigma'} \left(d_{\sigma'} f_\uparrow + f_\uparrow^\dagger d_{\sigma'}^\dagger \right) \right], \tag{A.81}$$

$$\begin{aligned}
\left[d_\sigma, \sum_{\sigma'} t_{\sigma'} \left(d_{\sigma'} f_\uparrow^\dagger + f_\uparrow d_{\sigma'}^\dagger \right) \right] &= \sum_{\sigma'} t_{\sigma'} \left[\left(d_\sigma d_{\sigma'} f_\uparrow^\dagger + d_\sigma f_\uparrow d_{\sigma'}^\dagger \right) - \left(d_{\sigma'} f_\uparrow^\dagger d_\sigma + f_\uparrow d_{\sigma'}^\dagger d_\sigma \right) \right] \\
&= \sum_{\sigma'} t_{\sigma'} \left[\left(d_{\sigma'} f_\uparrow^\dagger d_\sigma - f_\uparrow d_\sigma d_{\sigma'}^\dagger \right) - \left(d_{\sigma'} f_\uparrow^\dagger d_\sigma + f_\uparrow d_{\sigma'}^\dagger d_\sigma \right) \right] \\
&= \sum_{\sigma'} t_{\sigma'} \left[\left(d_{\sigma'} f_\uparrow^\dagger d_\sigma - f_\uparrow \left(\delta_{\sigma\sigma'} - d_{\sigma'}^\dagger d_\sigma \right) \right) - \left(d_{\sigma'} f_\uparrow^\dagger d_\sigma + f_\uparrow d_{\sigma'}^\dagger d_\sigma \right) \right] \\
&= \sum_{\sigma'} t_{\sigma'} \left[d_{\sigma'} f_\uparrow^\dagger d_\sigma - f_\uparrow \delta_{\sigma\sigma'} + f_\uparrow d_{\sigma'}^\dagger d_\sigma - d_{\sigma'} f_\uparrow^\dagger d_\sigma - f_\uparrow d_{\sigma'}^\dagger d_\sigma \right] \\
&= - \sum_{\sigma'} t_{\sigma'} f_\uparrow^\dagger \delta_{\sigma\sigma'} \\
&= -t_\sigma f_\uparrow.
\end{aligned} \tag{A.82}$$

$$\begin{aligned}
\left[d_\sigma, \sum_{\sigma'} \Delta_{\sigma'} \left(d_{\sigma'} f_\uparrow + f_\uparrow^\dagger d_{\sigma'}^\dagger \right) \right] &= \sum_{\sigma'} \Delta_{\sigma'} \left[\left(d_\sigma d_{\sigma'} f_\uparrow + d_\sigma f_\uparrow^\dagger d_{\sigma'}^\dagger \right) - \left(d_{\sigma'} f_\uparrow d_\sigma + f_\uparrow^\dagger d_{\sigma'}^\dagger d_\sigma \right) \right] \\
&= \sum_{\sigma'} \Delta_{\sigma'} \left[\left(d_{\sigma'} f_\uparrow d_\sigma - f_\uparrow^\dagger d_\sigma d_{\sigma'}^\dagger \right) - \left(d_{\sigma'} f_\uparrow d_\sigma + f_\uparrow^\dagger d_{\sigma'}^\dagger d_\sigma \right) \right] \\
&= \sum_{\sigma'} \Delta_{\sigma'} \left[\left(d_{\sigma'} f_\uparrow d_\sigma - f_\uparrow^\dagger \left(\delta_{\sigma\sigma'} - d_{\sigma'}^\dagger d_\sigma \right) \right) - \left(d_{\sigma'} f_\uparrow d_\sigma + f_\uparrow^\dagger d_{\sigma'}^\dagger d_\sigma \right) \right] \\
&= \sum_{\sigma'} \Delta_{\sigma'} \left[d_{\sigma'} f_\uparrow d_\sigma - f_\uparrow^\dagger \delta_{\sigma\sigma'} + f_\uparrow^\dagger d_{\sigma'}^\dagger d_\sigma - d_{\sigma'} f_\uparrow d_\sigma - f_\uparrow^\dagger d_{\sigma'}^\dagger d_\sigma \right] \\
&= - \sum_{\sigma'} \Delta_{\sigma'} f_\uparrow^\dagger \delta_{\sigma\sigma'} \\
&= -\Delta_\sigma f_\uparrow^\dagger.
\end{aligned} \tag{A.83}$$

$$(\omega^+ - \tilde{\varepsilon}_{d\sigma} + i\Gamma_{N\sigma}) \langle\langle d_\sigma; d_\sigma^\dagger \rangle\rangle = 1 - t_\sigma \langle\langle f_\uparrow; d_\sigma^\dagger \rangle\rangle - \Delta_\sigma \langle\langle f_\uparrow^\dagger; d_\sigma^\dagger \rangle\rangle. \tag{A.84}$$

We need to calculate terms $\langle\langle f_\uparrow; d_\sigma^\dagger \rangle\rangle$ and $\langle\langle f_\uparrow^\dagger; d_\sigma^\dagger \rangle\rangle$.

$$\omega^+ \langle\langle f_\uparrow; d_\sigma^\dagger \rangle\rangle = \left\langle [f_\uparrow, d_\sigma^\dagger]_+ \right\rangle + \langle\langle [f_\uparrow, \mathcal{H}]; d_\sigma^\dagger \rangle\rangle \quad (\text{A.85})$$

$$\begin{aligned} [f_\uparrow, \mathcal{H}] &= \left[f_\uparrow, \varepsilon_M \left(f_\uparrow^\dagger f_\uparrow - \frac{1}{2} \right) \right] + \left[f_\uparrow, \sum_{\sigma'} t_{\sigma'} \left(d_{\sigma'} f_\uparrow^\dagger + f_\uparrow d_{\sigma'}^\dagger \right) \right] \\ &+ \left[f_\uparrow, \sum_{\sigma'} \Delta_{\sigma'} \left(d_{\sigma'} f_\uparrow + f_\uparrow^\dagger d_{\sigma'}^\dagger \right) \right], \end{aligned} \quad (\text{A.86})$$

$$\begin{aligned} \left[f_\uparrow, \varepsilon_M \left(f_\uparrow^\dagger f_\uparrow - \frac{1}{2} \right) \right] &= \varepsilon_M \left[f_\uparrow f_\uparrow^\dagger f_\uparrow - f_\uparrow^\dagger f_\uparrow f_\uparrow \right] \\ &= \varepsilon_M \left[\left(1 - f_\uparrow^\dagger f_\uparrow \right) f_\uparrow - f_\uparrow^\dagger f_\uparrow f_\uparrow \right] \\ &= \varepsilon_M \left[f_\uparrow - f_\uparrow^\dagger f_\uparrow f_\uparrow - f_\uparrow^\dagger f_\uparrow f_\uparrow \right] \\ &= \varepsilon_M \left[f_\uparrow + f_\uparrow^\dagger f_\uparrow f_\uparrow - f_\uparrow^\dagger f_\uparrow f_\uparrow \right] \\ &= \varepsilon_M f_\uparrow. \end{aligned} \quad (\text{A.87})$$

$$\begin{aligned} \left[f_\uparrow, \sum_{\sigma'} t_{\sigma'} \left(d_{\sigma'} f_\uparrow^\dagger + f_\uparrow d_{\sigma'}^\dagger \right) \right] &= \sum_{\sigma'} t_{\sigma'} \left[\left(f_\uparrow d_{\sigma'} f_\uparrow^\dagger + f_\uparrow f_\uparrow^\dagger d_{\sigma'}^\dagger \right) - \left(d_{\sigma'} f_\uparrow^\dagger f_\uparrow + f_\uparrow d_{\sigma'}^\dagger f_\uparrow \right) \right] \\ &= \sum_{\sigma'} t_{\sigma'} \left[\left(-d_{\sigma'} f_\uparrow^\dagger f_\uparrow + f_\uparrow d_{\sigma'}^\dagger f_\uparrow \right) - \left(d_{\sigma'} f_\uparrow^\dagger f_\uparrow + f_\uparrow d_{\sigma'}^\dagger f_\uparrow \right) \right] \\ &= \sum_{\sigma'} t_{\sigma'} \left[\left(-d_{\sigma'} \left(1 - f_\uparrow^\dagger f_\uparrow \right) + f_\uparrow d_{\sigma'}^\dagger f_\uparrow \right) - \left(d_{\sigma'} f_\uparrow^\dagger f_\uparrow + f_\uparrow d_{\sigma'}^\dagger f_\uparrow \right) \right] \\ &= \sum_{\sigma'} t_{\sigma'} \left[-d_{\sigma'} + d_{\sigma'} f_\uparrow^\dagger f_\uparrow + f_\uparrow d_{\sigma'}^\dagger f_\uparrow - d_{\sigma'} f_\uparrow^\dagger f_\uparrow - f_\uparrow d_{\sigma'}^\dagger f_\uparrow \right] \\ &= - \sum_{\sigma'} t_{\sigma'} d_{\sigma'}. \\ &= \end{aligned} \quad (\text{A.88})$$

$$\begin{aligned}
\left[f_{\uparrow}, \sum_{\sigma'} \Delta_{\sigma'} (d_{\sigma'} f_{\uparrow} + f_{\uparrow}^{\dagger} d_{\sigma'}^{\dagger}) \right] &= \sum_{\sigma'} \Delta_{\sigma'} \left[(f_{\uparrow} d_{\sigma'} f_{\uparrow} + f_{\uparrow} f_{\uparrow}^{\dagger} d_{\sigma'}^{\dagger}) - (d_{\sigma'} f_{\uparrow} f_{\uparrow} + f_{\uparrow}^{\dagger} d_{\sigma'}^{\dagger} f_{\uparrow}) \right] \\
&= \sum_{\sigma'} \Delta_{\sigma'} \left[(d_{\sigma'} f_{\uparrow} f_{\uparrow} + (1 - f_{\uparrow}^{\dagger} f_{\uparrow}) d_{\sigma'}^{\dagger}) - (d_{\sigma'} f_{\uparrow} f_{\uparrow} + f_{\uparrow}^{\dagger} d_{\sigma'}^{\dagger} f_{\uparrow}) \right] \\
&= \sum_{\sigma'} \Delta_{\sigma'} \left[(d_{\sigma'} f_{\uparrow} f_{\uparrow} + d_{\sigma'}^{\dagger} - f_{\uparrow}^{\dagger} f_{\uparrow} d_{\sigma'}^{\dagger}) - (d_{\sigma'} f_{\uparrow} f_{\uparrow} + f_{\uparrow}^{\dagger} d_{\sigma'}^{\dagger} f_{\uparrow}) \right] \\
&= \sum_{\sigma'} \Delta_{\sigma'} \left[d_{\sigma'} f_{\uparrow} f_{\uparrow} + d_{\sigma'}^{\dagger} + f_{\uparrow}^{\dagger} d_{\sigma'}^{\dagger} f_{\uparrow} - d_{\sigma'} f_{\uparrow} f_{\uparrow} - f_{\uparrow}^{\dagger} d_{\sigma'}^{\dagger} f_{\uparrow} \right] \\
&= \sum_{\sigma'} \Delta_{\sigma'} d_{\sigma'}^{\dagger}.
\end{aligned} \tag{A.89}$$

$$\begin{aligned}
\omega^+ \langle\langle f_{\uparrow}; d_{\sigma}^{\dagger} \rangle\rangle &= \varepsilon_M \langle\langle f_{\uparrow}; d_{\sigma}^{\dagger} \rangle\rangle - \sum_{\sigma'} t_{\sigma'} \langle\langle d_{\sigma'}; d_{\sigma}^{\dagger} \rangle\rangle + \sum_{\sigma'} \Delta_{\sigma'} \langle\langle d_{\sigma'}^{\dagger}; d_{\sigma}^{\dagger} \rangle\rangle \\
(\omega^+ - \varepsilon_M) \langle\langle f_{\uparrow}; d_{\sigma}^{\dagger} \rangle\rangle &= - \sum_{\sigma'} t_{\sigma'} \langle\langle d_{\sigma'}; d_{\sigma}^{\dagger} \rangle\rangle + \sum_{\sigma'} \Delta_{\sigma'} \langle\langle d_{\sigma'}^{\dagger}; d_{\sigma}^{\dagger} \rangle\rangle \\
\langle\langle f_{\uparrow}; d_{\sigma}^{\dagger} \rangle\rangle &= - \sum_{\sigma'} \frac{t_{\sigma'}}{(\omega^+ - \varepsilon_M)} \langle\langle d_{\sigma'}; d_{\sigma}^{\dagger} \rangle\rangle + \sum_{\sigma'} \frac{\Delta_{\sigma'}}{(\omega^+ - \varepsilon_M)} \langle\langle d_{\sigma'}^{\dagger}; d_{\sigma}^{\dagger} \rangle\rangle
\end{aligned} \tag{A.90}$$

and

$$\omega^+ \langle\langle f_{\uparrow}^{\dagger}; d_{\sigma}^{\dagger} \rangle\rangle = \left\langle \left[f_{\uparrow}^{\dagger}, d_{\sigma}^{\dagger} \right]_+ \right\rangle + \langle\langle \left[f_{\uparrow}^{\dagger}, \mathcal{H} \right]; d_{\sigma}^{\dagger} \rangle\rangle. \tag{A.91}$$

$$\begin{aligned}
\left[f_{\uparrow}^{\dagger}, \mathcal{H} \right] &= \left[f_{\uparrow}^{\dagger}, \varepsilon_M \left(f_{\uparrow}^{\dagger} f_{\uparrow} - \frac{1}{2} \right) \right] + \left[f_{\uparrow}^{\dagger}, \sum_{\sigma'} t_{\sigma'} (d_{\sigma'} f_{\uparrow}^{\dagger} + f_{\uparrow} d_{\sigma'}^{\dagger}) \right] \\
&+ \left[f_{\uparrow}^{\dagger}, \sum_{\sigma'} \Delta_{\sigma'} (d_{\sigma'} f_{\uparrow} + f_{\uparrow}^{\dagger} d_{\sigma'}^{\dagger}) \right]
\end{aligned} \tag{A.92}$$

$$\begin{aligned}
\left[f_{\uparrow}^{\dagger}, \varepsilon_M \left(f_{\uparrow}^{\dagger} f_{\uparrow} - \frac{1}{2} \right) \right] &= \varepsilon_M \left[f_{\uparrow}^{\dagger} f_{\uparrow}^{\dagger} f_{\uparrow} - f_{\uparrow}^{\dagger} f_{\uparrow} f_{\uparrow}^{\dagger} \right] \\
&= \varepsilon_M \left[-f_{\uparrow}^{\dagger} f_{\uparrow}^{\dagger} f_{\uparrow} - f_{\uparrow}^{\dagger} f_{\uparrow} f_{\uparrow}^{\dagger} \right] \\
&= \varepsilon_M \left[-f_{\uparrow}^{\dagger} \left(1 - f_{\uparrow} f_{\uparrow}^{\dagger} \right) - f_{\uparrow}^{\dagger} f_{\uparrow} f_{\uparrow}^{\dagger} \right] \\
&= \varepsilon_M \left[-f_{\uparrow}^{\dagger} + f_{\uparrow}^{\dagger} f_{\uparrow} f_{\uparrow}^{\dagger} - f_{\uparrow}^{\dagger} f_{\uparrow} f_{\uparrow}^{\dagger} \right] \\
&= -\varepsilon_M f_{\uparrow}^{\dagger}.
\end{aligned} \tag{A.93}$$

$$\begin{aligned}
\left[f_{\uparrow}^{\dagger}, \sum_{\sigma'} t_{\sigma'} \left(d_{\sigma'} f_{\uparrow}^{\dagger} + f_{\uparrow}^{\dagger} d_{\sigma'}^{\dagger} \right) \right] &= \sum_{\sigma'} t_{\sigma'} \left[\left(f_{\uparrow}^{\dagger} d_{\sigma'} f_{\uparrow}^{\dagger} + f_{\uparrow}^{\dagger} f_{\uparrow} d_{\sigma'}^{\dagger} \right) - \left(d_{\sigma'} f_{\uparrow}^{\dagger} f_{\uparrow}^{\dagger} + f_{\uparrow}^{\dagger} d_{\sigma'}^{\dagger} f_{\uparrow}^{\dagger} \right) \right] \\
&= \sum_{\sigma'} t_{\sigma'} \left[\left(d_{\sigma'} f_{\uparrow}^{\dagger} f_{\uparrow}^{\dagger} + \left(1 - f_{\uparrow} f_{\uparrow}^{\dagger} \right) d_{\sigma'}^{\dagger} \right) - \left(d_{\sigma'} f_{\uparrow}^{\dagger} f_{\uparrow}^{\dagger} + f_{\uparrow}^{\dagger} d_{\sigma'}^{\dagger} f_{\uparrow}^{\dagger} \right) \right] \\
&= \sum_{\sigma'} t_{\sigma'} \left[\left(d_{\sigma'} f_{\uparrow}^{\dagger} f_{\uparrow}^{\dagger} + d_{\sigma'}^{\dagger} - f_{\uparrow} f_{\uparrow}^{\dagger} d_{\sigma'}^{\dagger} \right) - \left(d_{\sigma'} f_{\uparrow}^{\dagger} f_{\uparrow}^{\dagger} + f_{\uparrow}^{\dagger} d_{\sigma'}^{\dagger} f_{\uparrow}^{\dagger} \right) \right] \\
&= \sum_{\sigma'} t_{\sigma'} \left[d_{\sigma'} f_{\uparrow}^{\dagger} f_{\uparrow}^{\dagger} + d_{\sigma'}^{\dagger} + f_{\uparrow}^{\dagger} d_{\sigma'}^{\dagger} f_{\uparrow}^{\dagger} - d_{\sigma'} f_{\uparrow}^{\dagger} f_{\uparrow}^{\dagger} - f_{\uparrow}^{\dagger} d_{\sigma'}^{\dagger} f_{\uparrow}^{\dagger} \right] \\
&= \sum_{\sigma'} t_{\sigma'} d_{\sigma'}^{\dagger}.
\end{aligned} \tag{A.94}$$

$$\begin{aligned}
\left[f_{\uparrow}^{\dagger}, \sum_{\sigma'} \Delta_{\sigma'} \left(d_{\sigma'} f_{\uparrow}^{\dagger} + f_{\uparrow}^{\dagger} d_{\sigma'}^{\dagger} \right) \right] &= \sum_{\sigma'} \Delta_{\sigma'} \left[\left(f_{\uparrow}^{\dagger} d_{\sigma'} f_{\uparrow}^{\dagger} + f_{\uparrow}^{\dagger} f_{\uparrow}^{\dagger} d_{\sigma'}^{\dagger} \right) - \left(d_{\sigma'} f_{\uparrow}^{\dagger} f_{\uparrow}^{\dagger} + f_{\uparrow}^{\dagger} d_{\sigma'}^{\dagger} f_{\uparrow}^{\dagger} \right) \right] \\
&= \sum_{\sigma'} \Delta_{\sigma'} \left[\left(-d_{\sigma'} f_{\uparrow}^{\dagger} f_{\uparrow}^{\dagger} + f_{\uparrow}^{\dagger} d_{\sigma'}^{\dagger} f_{\uparrow}^{\dagger} \right) - \left(d_{\sigma'} f_{\uparrow}^{\dagger} f_{\uparrow}^{\dagger} + f_{\uparrow}^{\dagger} d_{\sigma'}^{\dagger} f_{\uparrow}^{\dagger} \right) \right] \\
&= \sum_{\sigma'} \Delta_{\sigma'} \left[\left(-d_{\sigma'} \left(1 - f_{\uparrow} f_{\uparrow}^{\dagger} \right) + f_{\uparrow}^{\dagger} d_{\sigma'}^{\dagger} f_{\uparrow}^{\dagger} \right) - \left(d_{\sigma'} f_{\uparrow}^{\dagger} f_{\uparrow}^{\dagger} + f_{\uparrow}^{\dagger} d_{\sigma'}^{\dagger} f_{\uparrow}^{\dagger} \right) \right] \\
&= \sum_{\sigma'} \Delta_{\sigma'} \left[-d_{\sigma'} + d_{\sigma'} f_{\uparrow}^{\dagger} f_{\uparrow}^{\dagger} + f_{\uparrow}^{\dagger} d_{\sigma'}^{\dagger} f_{\uparrow}^{\dagger} - d_{\sigma'} f_{\uparrow}^{\dagger} f_{\uparrow}^{\dagger} - f_{\uparrow}^{\dagger} d_{\sigma'}^{\dagger} f_{\uparrow}^{\dagger} \right] \\
&= \sum_{\sigma'} \Delta_{\sigma'} [-d_{\sigma'}] \\
&= -\sum_{\sigma'} \Delta_{\sigma'} d_{\sigma'}.
\end{aligned} \tag{A.95}$$

$$\begin{aligned}
\omega^+ \langle \langle f_\uparrow^\dagger; d_\sigma^\dagger \rangle \rangle &= -\varepsilon_M \langle \langle f_\uparrow^\dagger; d_\sigma^\dagger \rangle \rangle + \sum_{\sigma'} t_{\sigma'} \langle \langle d_{\sigma'}^\dagger; d_\sigma^\dagger \rangle \rangle - \sum_{\sigma'} \Delta_{\sigma'} \langle \langle d_{\sigma'}; d_\sigma^\dagger \rangle \rangle \\
(\omega^+ + \varepsilon_M) \langle \langle f_\uparrow^\dagger; d_\sigma^\dagger \rangle \rangle &= \sum_{\sigma'} t_{\sigma'} \langle \langle d_{\sigma'}^\dagger; d_\sigma^\dagger \rangle \rangle - \sum_{\sigma'} \Delta_{\sigma'} \langle \langle d_{\sigma'}; d_\sigma^\dagger \rangle \rangle \\
\langle \langle f_\uparrow^\dagger; d_\sigma^\dagger \rangle \rangle &= \sum_{\sigma'} \frac{t_{\sigma'}}{(\omega^+ + \varepsilon_M)} \langle \langle d_{\sigma'}^\dagger; d_\sigma^\dagger \rangle \rangle - \sum_{\sigma'} \frac{\Delta_{\sigma'}}{(\omega^+ + \varepsilon_M)} \langle \langle d_{\sigma'}; d_\sigma^\dagger \rangle \rangle \quad (\text{A.96})
\end{aligned}$$

Substituting Eqs.(A.90) and (A.96) in Eq.(A.84) we have (For a more generic case):

$$(\omega^+ - \tilde{\varepsilon}_{d\sigma'} + i\Gamma_{N\sigma'}) \langle \langle d_{\sigma'}; d_\sigma^\dagger \rangle \rangle = \delta_{\sigma\sigma'} - t_{\sigma'} \langle \langle f_\uparrow; d_\sigma^\dagger \rangle \rangle - \Delta_{\sigma'} \langle \langle f_\uparrow^\dagger; d_\sigma^\dagger \rangle \rangle.$$

$$\begin{aligned}
&(\omega^+ - \tilde{\varepsilon}_{d\sigma'} + i\Gamma_{N\sigma'}) \langle \langle d_{\sigma'}; d_\sigma^\dagger \rangle \rangle = \\
&= \delta_{\sigma\sigma'} - t_{\sigma'} \left[- \sum_{\tilde{\sigma}} \frac{t_{\tilde{\sigma}}}{(\omega^+ - \varepsilon_M)} \langle \langle d_{\tilde{\sigma}}; d_\sigma^\dagger \rangle \rangle + \sum_{\tilde{\sigma}} \frac{\Delta_{\tilde{\sigma}}}{(\omega^+ - \varepsilon_M)} \langle \langle d_{\tilde{\sigma}}^\dagger; d_\sigma^\dagger \rangle \rangle \right] \\
&- \Delta_{\sigma'} \left[\sum_{\tilde{\sigma}} \frac{t_{\tilde{\sigma}}}{(\omega^+ + \varepsilon_M)} \langle \langle d_{\tilde{\sigma}}^\dagger; d_\sigma^\dagger \rangle \rangle - \sum_{\tilde{\sigma}} \frac{\Delta_{\tilde{\sigma}}}{(\omega^+ + \varepsilon_M)} \langle \langle d_{\tilde{\sigma}}; d_\sigma^\dagger \rangle \rangle \right] \\
&= 1 + t_{\sigma'} \sum_{\tilde{\sigma}} \frac{t_{\tilde{\sigma}}}{(\omega^+ - \varepsilon_M)} \langle \langle d_{\tilde{\sigma}}; d_\sigma^\dagger \rangle \rangle - t_{\sigma'} \sum_{\tilde{\sigma}} \frac{\Delta_{\tilde{\sigma}}}{(\omega^+ - \varepsilon_M)} \langle \langle d_{\tilde{\sigma}}^\dagger; d_\sigma^\dagger \rangle \rangle \\
&- \Delta_{\sigma'} \sum_{\tilde{\sigma}} \frac{t_{\tilde{\sigma}}}{(\omega^+ + \varepsilon_M)} \langle \langle d_{\tilde{\sigma}}^\dagger; d_\sigma^\dagger \rangle \rangle + \Delta_{\sigma'} \sum_{\tilde{\sigma}} \frac{\Delta_{\tilde{\sigma}}}{(\omega^+ + \varepsilon_M)} \langle \langle d_{\tilde{\sigma}}; d_\sigma^\dagger \rangle \rangle \\
&= \delta_{\sigma\sigma'} + \frac{t_{\sigma'}}{(\omega^+ - \varepsilon_M)} [t_{\sigma'} \langle \langle d_{\sigma'}; d_\sigma^\dagger \rangle \rangle + t_{\bar{\sigma}'} \langle \langle d_{\bar{\sigma}'}; d_\sigma^\dagger \rangle \rangle] \\
&- \frac{t_{\sigma'}}{(\omega^+ - \varepsilon_M)} [\Delta_{\sigma'} \langle \langle d_{\sigma'}^\dagger; d_\sigma^\dagger \rangle \rangle + \Delta_{\bar{\sigma}'} \langle \langle d_{\bar{\sigma}'}^\dagger; d_\sigma^\dagger \rangle \rangle] \\
&- \frac{\Delta_{\sigma'}}{(\omega^+ + \varepsilon_M)} [t_{\sigma'} \langle \langle d_{\sigma'}^\dagger; d_\sigma^\dagger \rangle \rangle + t_{\bar{\sigma}'} \langle \langle d_{\bar{\sigma}'}^\dagger; d_\sigma^\dagger \rangle \rangle] \\
&+ \frac{\Delta_{\sigma'}}{(\omega^+ + \varepsilon_M)} [\Delta_{\sigma'} \langle \langle d_{\sigma'}; d_\sigma^\dagger \rangle \rangle + \Delta_{\bar{\sigma}'} \langle \langle d_{\bar{\sigma}'}; d_\sigma^\dagger \rangle \rangle] \quad (\text{A.97})
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
(\omega^+ - \tilde{\varepsilon}_{d\sigma'} + i\Gamma_{N\sigma'}) \langle\langle d_{\sigma'}; d_\sigma^\dagger \rangle\rangle &= \delta_{\sigma\sigma'} + \frac{t_{\sigma'}}{(\omega^+ - \varepsilon_M)} [t_{\sigma'} \langle\langle d_{\sigma'}; d_\sigma^\dagger \rangle\rangle + t_{\bar{\sigma}'} \langle\langle d_{\bar{\sigma}'}; d_\sigma^\dagger \rangle\rangle] \\
&+ \frac{\Delta_{\sigma'}}{(\omega^+ + \varepsilon_M)} [\Delta_{\sigma'} \langle\langle d_{\sigma'}; d_\sigma^\dagger \rangle\rangle + \Delta_{\bar{\sigma}'} \langle\langle d_{\bar{\sigma}'}; d_\sigma^\dagger \rangle\rangle] \\
&- \frac{t_{\sigma'}}{(\omega^+ - \varepsilon_M)} [\Delta_{\sigma'} \langle\langle d_{\sigma'}^\dagger; d_\sigma^\dagger \rangle\rangle + \Delta_{\bar{\sigma}'} \langle\langle d_{\bar{\sigma}'}^\dagger; d_\sigma^\dagger \rangle\rangle] \\
&- \frac{\Delta_{\sigma'}}{(\omega^+ + \varepsilon_M)} [t_{\sigma'} \langle\langle d_{\sigma'}^\dagger; d_\sigma^\dagger \rangle\rangle + t_{\bar{\sigma}'} \langle\langle d_{\bar{\sigma}'}^\dagger; d_\sigma^\dagger \rangle\rangle]
\end{aligned} \tag{A.98}$$

$$\begin{aligned}
(\omega^+ - \tilde{\varepsilon}_{d\sigma'} + i\Gamma_{N\sigma'}) \langle\langle d_{\sigma'}; d_\sigma^\dagger \rangle\rangle &= \delta_{\sigma\sigma'} + \left[\frac{t_{\sigma'} t_{\sigma'}}{(\omega^+ - \varepsilon_M)} + \frac{\Delta_{\sigma'} \Delta_{\sigma'}}{(\omega^+ + \varepsilon_M)} \right] \langle\langle d_{\sigma'}; d_\sigma^\dagger \rangle\rangle \\
&+ \left[\frac{t_{\sigma'} t_{\bar{\sigma}'}}{(\omega^+ - \varepsilon_M)} + \frac{\Delta_{\sigma'} \Delta_{\bar{\sigma}'}}{(\omega^+ + \varepsilon_M)} \right] \langle\langle d_{\bar{\sigma}'}; d_\sigma^\dagger \rangle\rangle \\
&- \left[\frac{t_{\sigma'} \Delta_{\sigma'}}{(\omega^+ - \varepsilon_M)} + \frac{\Delta_{\sigma'} t_{\sigma'}}{(\omega^+ + \varepsilon_M)} \right] \langle\langle d_{\sigma'}^\dagger; d_\sigma^\dagger \rangle\rangle \\
&- \left[\frac{t_{\sigma'} \Delta_{\bar{\sigma}'}}{(\omega^+ - \varepsilon_M)} + \frac{\Delta_{\sigma'} t_{\bar{\sigma}'}}{(\omega^+ + \varepsilon_M)} \right] \langle\langle d_{\bar{\sigma}'}^\dagger; d_\sigma^\dagger \rangle\rangle
\end{aligned} \tag{A.99}$$

Let's label the following functions:

$$k_1^{\sigma'\sigma'}(\omega) = \frac{t_{\sigma'} \Delta_{\sigma'}}{(\omega^+ - \varepsilon_M)} + \frac{\Delta_{\sigma'} t_{\sigma'}}{(\omega^+ + \varepsilon_M)} \tag{A.100}$$

$$k_1^{\sigma'\bar{\sigma}'}(\omega) = \frac{t_{\sigma'} \Delta_{\bar{\sigma}'}}{(\omega^+ - \varepsilon_M)} + \frac{\Delta_{\sigma'} t_{\bar{\sigma}'}}{(\omega^+ + \varepsilon_M)} \tag{A.101}$$

$$k_2^{\sigma'\sigma'}(\omega) = \frac{t_{\sigma'} t_{\sigma'}}{(\omega^+ - \varepsilon_M)} + \frac{\Delta_{\sigma'} \Delta_{\sigma'}}{(\omega^+ + \varepsilon_M)} \tag{A.102}$$

$$k_2^{\sigma'\bar{\sigma}'}(\omega) = \frac{t_{\sigma'} t_{\bar{\sigma}'}}{(\omega^+ - \varepsilon_M)} + \frac{\Delta_{\sigma'} \Delta_{\bar{\sigma}'}}{(\omega^+ + \varepsilon_M)} \tag{A.103}$$

We can write

$$\begin{aligned} (\omega^+ - \tilde{\varepsilon}_{d\sigma'} + i\Gamma_{N\sigma'}) \langle\langle d_{\sigma'}; d_\sigma^\dagger \rangle\rangle &= \delta_{\sigma\sigma'} + k_2^{\sigma'\sigma'} \langle\langle d_{\sigma'}; d_\sigma^\dagger \rangle\rangle + k_2^{\sigma'\bar{\sigma}'} \langle\langle d_{\bar{\sigma}'}; d_\sigma^\dagger \rangle\rangle \\ &\quad - k_1^{\sigma'\sigma'} \langle\langle d_{\sigma'}^\dagger; d_\sigma^\dagger \rangle\rangle - k_1^{\sigma'\bar{\sigma}'} \langle\langle d_{\bar{\sigma}'}^\dagger; d_\sigma^\dagger \rangle\rangle \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} (\omega^+ - \tilde{\varepsilon}_{d\sigma'} - k_2^{\sigma'\sigma'} + i\Gamma_{N\sigma'}) \langle\langle d_{\sigma'}; d_\sigma^\dagger \rangle\rangle &= \delta_{\sigma\sigma'} + k_2^{\sigma'\bar{\sigma}'} \langle\langle d_{\bar{\sigma}'}; d_\sigma^\dagger \rangle\rangle - k_1^{\sigma'\sigma'} \langle\langle d_{\sigma'}^\dagger; d_\sigma^\dagger \rangle\rangle \\ &\quad - k_1^{\sigma'\bar{\sigma}'} \langle\langle d_{\bar{\sigma}'}^\dagger; d_\sigma^\dagger \rangle\rangle \end{aligned} \quad (\text{A.104})$$

Now, let's calculate the anomalous GF $\langle\langle d_\sigma^\dagger; d_\sigma^\dagger \rangle\rangle$. According EOM method.

$$\omega^+ \langle\langle d_\sigma^\dagger; d_\sigma^\dagger \rangle\rangle = \langle [d_\sigma^\dagger, d_\sigma^\dagger]_+ \rangle + \langle\langle [d_\sigma^\dagger, \mathcal{H}] ; d_\sigma^\dagger \rangle\rangle \quad (\text{A.105})$$

$$\begin{aligned} [d_\sigma^\dagger, \mathcal{H}] &= [d_\sigma^\dagger, (\mathcal{H}_N + \mathcal{H}_{QD} + \mathcal{H}_{N-QD} + \mathcal{H}_{MFS})] \\ &= [d_\sigma^\dagger, \mathcal{H}_{QD}] + [d_\sigma^\dagger, \mathcal{H}_{N-QD}] + [d_\sigma^\dagger, \mathcal{H}_{MFS}] \end{aligned} \quad (\text{A.106})$$

Let's do

$$\begin{aligned} [d_\sigma^\dagger, \mathcal{H}_{QD}] &= \sum_{\sigma'} \tilde{\varepsilon}_{d\sigma'} \left[d_\sigma^\dagger d_{\sigma'}^\dagger d_{\sigma'} - d_{\sigma'}^\dagger d_{\sigma'} d_\sigma^\dagger \right] \\ &= \sum_{\sigma'} \tilde{\varepsilon}_{d\sigma'} \left[-d_{\sigma'}^\dagger d_\sigma^\dagger d_{\sigma'} - d_{\sigma'}^\dagger d_{\sigma'} d_{\sigma'}^\dagger \right] \\ &= \sum_{\sigma'} \tilde{\varepsilon}_{d\sigma'} \left[-d_{\sigma'}^\dagger (\delta_{\sigma\sigma'} - d_{\sigma'} d_\sigma^\dagger) - d_{\sigma'}^\dagger d_{\sigma'} d_\sigma^\dagger \right] \\ &= \sum_{\sigma'} \tilde{\varepsilon}_{d\sigma'} \left[-d_{\sigma'}^\dagger \delta_{\sigma\sigma'} + d_{\sigma'}^\dagger d_{\sigma'} d_\sigma^\dagger - d_{\sigma'}^\dagger d_{\sigma'} d_\sigma^\dagger \right] \\ &= \sum_{\sigma'} \tilde{\varepsilon}_{d\sigma'} \left[-d_{\sigma'}^\dagger \delta_{\sigma\sigma'} \right] \\ &= - \sum_{\sigma'} \tilde{\varepsilon}_{d\sigma'} d_{\sigma'}^\dagger \delta_{\sigma\sigma'} \\ &= -\tilde{\varepsilon}_{d\sigma} d_\sigma^\dagger. \end{aligned} \quad (\text{A.107})$$

$$\begin{aligned}
[d_\sigma^\dagger, \mathcal{H}_{N-QD}] &= V \sum_{\mathbf{k}, \sigma'} \left[\left(d_\sigma^\dagger c_{\sigma' \mathbf{k}}^\dagger d_{\sigma'} + d_\sigma^\dagger d_{\sigma'}^\dagger c_{\sigma' \mathbf{k}} \right) - \left(c_{\sigma' \mathbf{k}}^\dagger d_{\sigma'} d_\sigma^\dagger + d_{\sigma'}^\dagger c_{\sigma' \mathbf{k}} d_\sigma^\dagger \right) \right] \\
&= V \sum_{\mathbf{k}, \sigma'} \left[\left(-c_{\sigma' \mathbf{k}}^\dagger d_\sigma^\dagger d_{\sigma'} + d_{\sigma'}^\dagger c_{\sigma' \mathbf{k}} d_\sigma^\dagger \right) - \left(c_{\sigma' \mathbf{k}}^\dagger d_{\sigma'} d_\sigma^\dagger + d_{\sigma'}^\dagger c_{\sigma' \mathbf{k}} d_\sigma^\dagger \right) \right] \\
&= V \sum_{\mathbf{k}, \sigma'} \left[\left(-c_{\sigma' \mathbf{k}}^\dagger (\delta_{\sigma \sigma'} - d_{\sigma'} d_\sigma^\dagger) + d_{\sigma'}^\dagger c_{\sigma' \mathbf{k}} d_\sigma^\dagger \right) - \left(c_{\sigma' \mathbf{k}}^\dagger d_{\sigma'} d_\sigma^\dagger + d_{\sigma'}^\dagger c_{\sigma' \mathbf{k}} d_\sigma^\dagger \right) \right] \\
&= V \sum_{\mathbf{k}, \sigma'} \left[-c_{\sigma' \mathbf{k}}^\dagger \delta_{\sigma \sigma'} + c_{\sigma' \mathbf{k}}^\dagger d_{\sigma'} d_\sigma^\dagger + d_{\sigma'}^\dagger c_{\sigma' \mathbf{k}} d_\sigma^\dagger - c_{\sigma' \mathbf{k}}^\dagger d_{\sigma'} d_\sigma^\dagger - d_{\sigma'}^\dagger c_{\sigma' \mathbf{k}} d_\sigma^\dagger \right] \\
&= V \sum_{\mathbf{k}, \sigma'} \left[-c_{\sigma' \mathbf{k}}^\dagger \delta_{\sigma \sigma'} \right] \\
&= -V \sum_{\mathbf{k}} c_{\sigma \mathbf{k}}^\dagger. \tag{A.108}
\end{aligned}$$

and

$$\begin{aligned}
[d_\sigma^\dagger, \mathcal{H}_{MFS}] &= \left[d_\sigma^\dagger, \varepsilon_M \left(f_\uparrow^\dagger f_\uparrow - \frac{1}{2} \right) \right] + \left[d_\sigma^\dagger, \sum_{\sigma'} t_{\sigma'} \left(d_{\sigma'} f_\uparrow^\dagger + f_\uparrow d_{\sigma'}^\dagger \right) \right] \\
&\quad + \left[d_\sigma^\dagger, \sum_{\sigma'} \Delta_{\sigma'} \left(d_{\sigma'} f_\uparrow + f_\uparrow^\dagger d_{\sigma'}^\dagger \right) \right] \tag{A.109}
\end{aligned}$$

$$\left[d_\sigma^\dagger, \varepsilon_M \left(f_\uparrow^\dagger f_\uparrow - \frac{1}{2} \right) \right] = 0.$$

$$\begin{aligned}
\left[d_\sigma^\dagger, \sum_{\sigma'} t_{\sigma'} \left(d_{\sigma'} f_\uparrow^\dagger + f_\uparrow^\dagger d_{\sigma'}^\dagger \right) \right] &= \sum_{\sigma'} t_{\sigma'} \left[\left(d_\sigma^\dagger d_{\sigma'} f_\uparrow^\dagger + d_\sigma^\dagger f_\uparrow^\dagger d_{\sigma'}^\dagger \right) - \left(d_{\sigma'} f_\uparrow^\dagger d_\sigma^\dagger + f_\uparrow^\dagger d_{\sigma'}^\dagger d_\sigma^\dagger \right) \right] \\
&= \sum_{\sigma'} t_{\sigma'} \left[\left((\delta_{\sigma\sigma'} - d_{\sigma'} d_\sigma^\dagger) f_\uparrow^\dagger + f_\uparrow^\dagger d_{\sigma'}^\dagger d_\sigma^\dagger \right) - \left(d_{\sigma'} f_\uparrow^\dagger d_\sigma^\dagger + f_\uparrow^\dagger d_{\sigma'}^\dagger d_\sigma^\dagger \right) \right] \\
&= \sum_{\sigma'} t_{\sigma'} \left[\left(f_\uparrow^\dagger \delta_{\sigma\sigma'} - d_{\sigma'} d_\sigma^\dagger f_\uparrow^\dagger + f_\uparrow^\dagger d_{\sigma'}^\dagger d_\sigma^\dagger \right) - \left(d_{\sigma'} f_\uparrow^\dagger d_\sigma^\dagger + f_\uparrow^\dagger d_{\sigma'}^\dagger d_\sigma^\dagger \right) \right] \\
&= \sum_{\sigma'} t_{\sigma'} \left[f_\uparrow^\dagger \delta_{\sigma\sigma'} + d_{\sigma'} f_\uparrow^\dagger d_\sigma^\dagger + f_\uparrow^\dagger d_{\sigma'}^\dagger d_\sigma^\dagger - d_{\sigma'} f_\uparrow^\dagger d_\sigma^\dagger - f_\uparrow^\dagger d_{\sigma'}^\dagger d_\sigma^\dagger \right] \\
&= \sum_{\sigma'} t_{\sigma'} f_\uparrow^\dagger \delta_{\sigma\sigma'} \\
&= t_\sigma f_\uparrow^\dagger. \tag{A.110}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\left[d_\sigma^\dagger, \sum_{\sigma'} \Delta_{\sigma'} \left(d_{\sigma'} f_\uparrow^\dagger + f_\uparrow^\dagger d_{\sigma'}^\dagger \right) \right] &= \sum_{\sigma'} \Delta_{\sigma'} \left[\left(d_\sigma^\dagger d_{\sigma'} f_\uparrow^\dagger + d_\sigma^\dagger f_\uparrow^\dagger d_{\sigma'}^\dagger \right) - \left(d_{\sigma'} f_\uparrow^\dagger d_\sigma^\dagger + f_\uparrow^\dagger d_{\sigma'}^\dagger d_\sigma^\dagger \right) \right] \\
&= \sum_{\sigma'} \Delta_{\sigma'} \left[\left((\delta_{\sigma\sigma'} - d_{\sigma'} d_\sigma^\dagger) f_\uparrow^\dagger + f_\uparrow^\dagger d_{\sigma'}^\dagger d_\sigma^\dagger \right) - \left(d_{\sigma'} f_\uparrow^\dagger d_\sigma^\dagger + f_\uparrow^\dagger d_{\sigma'}^\dagger d_\sigma^\dagger \right) \right] \\
&= \sum_{\sigma'} \Delta_{\sigma'} \left[\left(f_\uparrow^\dagger \delta_{\sigma\sigma'} - d_{\sigma'} d_\sigma^\dagger f_\uparrow^\dagger + f_\uparrow^\dagger d_{\sigma'}^\dagger d_\sigma^\dagger \right) - \left(d_{\sigma'} f_\uparrow^\dagger d_\sigma^\dagger + f_\uparrow^\dagger d_{\sigma'}^\dagger d_\sigma^\dagger \right) \right] \\
&= \sum_{\sigma'} \Delta_{\sigma'} \left[f_\uparrow^\dagger \delta_{\sigma\sigma'} + d_{\sigma'} f_\uparrow^\dagger d_\sigma^\dagger + f_\uparrow^\dagger d_{\sigma'}^\dagger d_\sigma^\dagger - d_{\sigma'} f_\uparrow^\dagger d_\sigma^\dagger - f_\uparrow^\dagger d_{\sigma'}^\dagger d_\sigma^\dagger \right] \\
&= \sum_{\sigma'} \Delta_{\sigma'} f_\uparrow^\dagger \delta_{\sigma\sigma'} \\
&= \Delta_\sigma f_\uparrow. \tag{A.111}
\end{aligned}$$

Then, we have:

$$\begin{aligned}
\omega^+ \langle\langle d_\sigma^\dagger; d_\sigma^\dagger \rangle\rangle &= -\tilde{\varepsilon}_{d\sigma} \langle\langle d_\sigma^\dagger; d_\sigma^\dagger \rangle\rangle - V \sum_{\mathbf{k}} \langle\langle c_{\sigma\mathbf{k}}^\dagger; d_\sigma^\dagger \rangle\rangle + t_\sigma \langle\langle f_\uparrow^\dagger; d_\sigma^\dagger \rangle\rangle + \Delta_\sigma \langle\langle f_\uparrow; d_\sigma^\dagger \rangle\rangle \\
(\omega^+ + \tilde{\varepsilon}_{d\sigma}) \langle\langle d_\sigma^\dagger; d_\sigma^\dagger \rangle\rangle &= -V \sum_{\mathbf{k}} \langle\langle c_{\sigma\mathbf{k}}^\dagger; d_\sigma^\dagger \rangle\rangle + t_\sigma \langle\langle f_\uparrow^\dagger; d_\sigma^\dagger \rangle\rangle + \Delta_\sigma \langle\langle f_\uparrow; d_\sigma^\dagger \rangle\rangle. \tag{A.112}
\end{aligned}$$

Now $\langle\langle c_{\sigma\mathbf{k}}^\dagger; d_\sigma^\dagger \rangle\rangle$.

$$\omega^+ \left\langle \left\langle c_{\sigma k}^\dagger; d_\sigma^\dagger \right\rangle \right\rangle = \left\langle \left[c_{\sigma k}^\dagger, d_\sigma^\dagger \right]_+ \right\rangle + \left\langle \left\langle \left[c_{\sigma k}^\dagger, \mathcal{H} \right]; d_\sigma^\dagger \right\rangle \right\rangle \quad (\text{A.113})$$

$$\begin{aligned} \left[c_{\sigma k}^\dagger, \mathcal{H} \right] &= \left[c_{\sigma k}^\dagger, \mathcal{H}_N \right] + \left[c_{\sigma k}^\dagger, \mathcal{H}_{QD} \right] + \left[c_{\sigma k}^\dagger, \mathcal{H}_{N-QD} \right] + \left[c_{\sigma k}^\dagger, \mathcal{H}_{MFS} \right] \\ &= \left[c_{\sigma k}^\dagger, \mathcal{H}_N \right] + \left[c_{\sigma k}^\dagger, \mathcal{H}_{N-QD} \right]. \end{aligned} \quad (\text{A.114})$$

$$\begin{aligned} \left[c_{\sigma k}^\dagger, \mathcal{H}_N \right] &= \sum_{\mathbf{k}', \sigma'} \epsilon \left[c_{\sigma k}^\dagger c_{\sigma' \mathbf{k}'}^\dagger c_{\sigma' \mathbf{k}'} - c_{\sigma' \mathbf{k}'}^\dagger c_{\sigma' \mathbf{k}'} c_{\sigma' \mathbf{k}'} c_{\sigma k}^\dagger \right] \\ &= \sum_{\mathbf{k}', \sigma'} \epsilon \left[-c_{\sigma' \mathbf{k}'}^\dagger c_{\sigma k}^\dagger c_{\sigma' \mathbf{k}'} - c_{\sigma' \mathbf{k}'}^\dagger c_{\sigma' \mathbf{k}'} c_{\sigma' \mathbf{k}'} c_{\sigma k}^\dagger \right] \\ &= \sum_{\mathbf{k}', \sigma'} \epsilon \left[-c_{\sigma' \mathbf{k}'}^\dagger \left(\delta_{\sigma \sigma'} \delta_{\mathbf{k} \mathbf{k}'} - c_{\sigma' \mathbf{k}'} c_{\sigma k}^\dagger \right) - c_{\sigma' \mathbf{k}'}^\dagger c_{\sigma' \mathbf{k}'} c_{\sigma' \mathbf{k}'} c_{\sigma k}^\dagger \right] \\ &= \sum_{\mathbf{k}', \sigma'} \epsilon \left[-c_{\sigma' \mathbf{k}'}^\dagger \delta_{\sigma \sigma'} \delta_{\mathbf{k} \mathbf{k}'} + c_{\sigma' \mathbf{k}'}^\dagger c_{\sigma' \mathbf{k}'} c_{\sigma' \mathbf{k}'} c_{\sigma k}^\dagger - c_{\sigma' \mathbf{k}'}^\dagger c_{\sigma' \mathbf{k}'} c_{\sigma' \mathbf{k}'} c_{\sigma k}^\dagger \right] \\ &= \sum_{\mathbf{k}', \sigma'} \epsilon \left[-c_{\sigma' \mathbf{k}'}^\dagger \delta_{\sigma \sigma'} \delta_{\mathbf{k} \mathbf{k}'} \right] \\ &= -\epsilon c_{\sigma k}^\dagger. \end{aligned} \quad (\text{A.115})$$

$$\begin{aligned}
[c_{\sigma\mathbf{k}}^\dagger, \mathcal{H}_{N-QD}] &= V \sum_{\mathbf{k}', \sigma'} \left[\left(c_{\sigma\mathbf{k}}^\dagger c_{\sigma'\mathbf{k}'}^\dagger d_{\sigma'} + c_{\sigma\mathbf{k}}^\dagger d_{\sigma'}^\dagger c_{\sigma'\mathbf{k}'} \right) - \left(c_{\sigma'\mathbf{k}'}^\dagger d_{\sigma'} c_{\sigma\mathbf{k}}^\dagger + d_{\sigma'}^\dagger c_{\sigma'\mathbf{k}'} c_{\sigma\mathbf{k}}^\dagger \right) \right] \\
&= V \sum_{\mathbf{k}', \sigma'} \left[\left(c_{\sigma'\mathbf{k}'}^\dagger d_{\sigma'} c_{\sigma\mathbf{k}}^\dagger - d_{\sigma'}^\dagger c_{\sigma\mathbf{k}}^\dagger c_{\sigma'\mathbf{k}'} \right) - \left(c_{\sigma'\mathbf{k}'}^\dagger d_{\sigma'} c_{\sigma\mathbf{k}}^\dagger + d_{\sigma'}^\dagger c_{\sigma'\mathbf{k}'} c_{\sigma\mathbf{k}}^\dagger \right) \right] \\
&= V \sum_{\mathbf{k}', \sigma'} \left[\left(c_{\sigma'\mathbf{k}'}^\dagger d_{\sigma'} c_{\sigma\mathbf{k}}^\dagger - d_{\sigma'}^\dagger \left(\delta_{\sigma\sigma'} \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} - c_{\sigma'\mathbf{k}'} c_{\sigma\mathbf{k}}^\dagger \right) \right) - \left(c_{\sigma'\mathbf{k}'}^\dagger d_{\sigma'} c_{\sigma\mathbf{k}}^\dagger + d_{\sigma'}^\dagger c_{\sigma'\mathbf{k}'} c_{\sigma\mathbf{k}}^\dagger \right) \right] \\
&= V \sum_{\mathbf{k}', \sigma'} \left[c_{\sigma'\mathbf{k}'}^\dagger d_{\sigma'} c_{\sigma\mathbf{k}}^\dagger - d_{\sigma'}^\dagger \delta_{\sigma\sigma'} \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} + d_{\sigma'}^\dagger c_{\sigma'\mathbf{k}'} c_{\sigma\mathbf{k}}^\dagger - c_{\sigma'\mathbf{k}'}^\dagger d_{\sigma'} c_{\sigma\mathbf{k}}^\dagger - d_{\sigma'}^\dagger c_{\sigma'\mathbf{k}'} c_{\sigma\mathbf{k}}^\dagger \right] \\
&= V \sum_{\mathbf{k}', \sigma'} \left[-d_{\sigma'}^\dagger \delta_{\sigma\sigma'} \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \right] \\
&= -V d_\sigma^\dagger. \tag{A.116}
\end{aligned}$$

Thus

$$\begin{aligned}
\omega^+ \langle \langle c_{\sigma\mathbf{k}}^\dagger; d_\sigma^\dagger \rangle \rangle &= -\epsilon \langle \langle c_{\sigma\mathbf{k}}^\dagger; d_\sigma^\dagger \rangle \rangle - V \langle \langle d_\sigma^\dagger; d_\sigma^\dagger \rangle \rangle \\
(\omega^+ + \epsilon) \langle \langle c_{\sigma\mathbf{k}}^\dagger; d_\sigma^\dagger \rangle \rangle &= -V \langle \langle d_\sigma^\dagger; d_\sigma^\dagger \rangle \rangle \\
\langle \langle c_{\sigma\mathbf{k}}^\dagger; d_\sigma^\dagger \rangle \rangle &= -\frac{V}{(\omega^+ + \epsilon)} \langle \langle d_\sigma^\dagger; d_\sigma^\dagger \rangle \rangle. \tag{A.117}
\end{aligned}$$

Substituting the Eq.(A.117) in Eq.(A.112).

$$(\omega^+ + \tilde{\varepsilon}_{d\sigma}) \langle \langle d_\sigma^\dagger; d_\sigma^\dagger \rangle \rangle = -V \sum_{\mathbf{k}} \langle \langle c_{\sigma\mathbf{k}}^\dagger; d_\sigma^\dagger \rangle \rangle + t_\sigma \langle \langle f_\uparrow^\dagger; d_\sigma^\dagger \rangle \rangle + \Delta_\sigma \langle \langle f_\uparrow; d_\sigma^\dagger \rangle \rangle \tag{A.118}$$

$$\begin{aligned}
(\omega^+ + \tilde{\varepsilon}_{d\sigma}) \langle \langle d_\sigma^\dagger; d_\sigma^\dagger \rangle \rangle &= -V \sum_{\mathbf{k}} \left[-\frac{V}{(\omega^+ + \epsilon)} \langle \langle d_\sigma^\dagger; d_\sigma^\dagger \rangle \rangle \right] + t_\sigma \langle \langle f_\uparrow^\dagger; d_\sigma^\dagger \rangle \rangle + \Delta_\sigma \langle \langle f_\uparrow; d_\sigma^\dagger \rangle \rangle \\
(\omega^+ + \tilde{\varepsilon}_{d\sigma}) \langle \langle d_\sigma^\dagger; d_\sigma^\dagger \rangle \rangle &= \sum_{\mathbf{k}} \frac{V^2}{(\omega^+ + \epsilon)} \langle \langle d_\sigma^\dagger; d_\sigma^\dagger \rangle \rangle + t_\sigma \langle \langle f_\uparrow^\dagger; d_\sigma^\dagger \rangle \rangle + \Delta_\sigma \langle \langle f_\uparrow; d_\sigma^\dagger \rangle \rangle \tag{A.119}
\end{aligned}$$

$$\left(\omega^+ + \tilde{\varepsilon}_{d\sigma} - \sum_{\mathbf{k}} \frac{V^2}{(\omega^+ + \epsilon)} \right) \langle\langle d_{\sigma}^{\dagger}; d_{\sigma}^{\dagger} \rangle\rangle = t_{\sigma} \langle\langle f_{\uparrow}^{\dagger}; d_{\sigma}^{\dagger} \rangle\rangle + \Delta_{\sigma} \langle\langle f_{\uparrow}; d_{\sigma}^{\dagger} \rangle\rangle. \quad (\text{A.120})$$

ou

$$(\omega^+ + \tilde{\varepsilon}_{d\sigma} + i\Gamma_{N\sigma}) \langle\langle d_{\sigma}^{\dagger}; d_{\sigma}^{\dagger} \rangle\rangle = t_{\sigma} \langle\langle f_{\uparrow}^{\dagger}; d_{\sigma}^{\dagger} \rangle\rangle + \Delta_{\sigma} \langle\langle f_{\uparrow}; d_{\sigma}^{\dagger} \rangle\rangle. \quad (\text{A.121})$$

Substituting Eq.(A.90) and Eq.(A.96) in Eq.(A.121), we have (for a generic case):

$$\begin{aligned} & (\omega^+ + \tilde{\varepsilon}_{d\sigma'} + i\Gamma_{N\sigma'}) \langle\langle d_{\sigma'}^{\dagger}; d_{\sigma'}^{\dagger} \rangle\rangle = \\ &= t_{\sigma'} \langle\langle f_{\uparrow}^{\dagger}; d_{\sigma'}^{\dagger} \rangle\rangle + \Delta_{\sigma'} \langle\langle f_{\uparrow}; d_{\sigma'}^{\dagger} \rangle\rangle \\ &= t_{\sigma'} \left[\sum_{\tilde{\sigma}} \frac{t_{\tilde{\sigma}}}{(\omega^+ + \varepsilon_M)} \langle\langle d_{\tilde{\sigma}}^{\dagger}; d_{\sigma'}^{\dagger} \rangle\rangle - \sum_{\tilde{\sigma}} \frac{\Delta_{\tilde{\sigma}}}{(\omega^+ + \varepsilon_M)} \langle\langle d_{\tilde{\sigma}}; d_{\sigma'}^{\dagger} \rangle\rangle \right] \\ &+ \Delta_{\sigma'} \left[- \sum_{\tilde{\sigma}} \frac{t_{\tilde{\sigma}}}{(\omega^+ - \varepsilon_M)} \langle\langle d_{\tilde{\sigma}}; d_{\sigma'}^{\dagger} \rangle\rangle + \sum_{\tilde{\sigma}} \frac{\Delta_{\tilde{\sigma}}}{(\omega^+ - \varepsilon_M)} \langle\langle d_{\tilde{\sigma}}^{\dagger}; d_{\sigma'}^{\dagger} \rangle\rangle \right] \\ &= t_{\sigma'} \sum_{\tilde{\sigma}} \frac{t_{\tilde{\sigma}}}{(\omega^+ + \varepsilon_M)} \langle\langle d_{\tilde{\sigma}}^{\dagger}; d_{\sigma'}^{\dagger} \rangle\rangle - t_{\sigma'} \sum_{\tilde{\sigma}} \frac{\Delta_{\tilde{\sigma}}}{(\omega^+ + \varepsilon_M)} \langle\langle d_{\tilde{\sigma}}; d_{\sigma'}^{\dagger} \rangle\rangle \\ &- \Delta_{\sigma'} \sum_{\tilde{\sigma}} \frac{t_{\tilde{\sigma}}}{(\omega^+ - \varepsilon_M)} \langle\langle d_{\tilde{\sigma}}; d_{\sigma'}^{\dagger} \rangle\rangle + \Delta_{\sigma'} \sum_{\tilde{\sigma}} \frac{\Delta_{\tilde{\sigma}}}{(\omega^+ - \varepsilon_M)} \langle\langle d_{\tilde{\sigma}}^{\dagger}; d_{\sigma'}^{\dagger} \rangle\rangle \end{aligned} \quad (\text{A.122})$$

$$\begin{aligned}
(\omega^+ + \tilde{\varepsilon}_{d\sigma'} + i\Gamma_{N\sigma'}) \left\langle \left\langle d_{\sigma'}^\dagger; d_\sigma^\dagger \right\rangle \right\rangle &= \frac{t_{\sigma'}}{(\omega^+ + \varepsilon_M)} \left[t_{\sigma'} \left\langle \left\langle d_{\sigma'}^\dagger; d_\sigma^\dagger \right\rangle \right\rangle + t_{\bar{\sigma}'} \left\langle \left\langle d_{\bar{\sigma}'}^\dagger; d_\sigma^\dagger \right\rangle \right\rangle \right] \\
&+ \frac{\Delta_{\sigma'}}{(\omega^+ - \varepsilon_M)} \left[\Delta_{\sigma'} \left\langle \left\langle d_{\sigma'}^\dagger; d_\sigma^\dagger \right\rangle \right\rangle + \Delta_{\bar{\sigma}'} \left\langle \left\langle d_{\bar{\sigma}'}^\dagger; d_\sigma^\dagger \right\rangle \right\rangle \right] \\
&- \frac{t_{\sigma'}}{(\omega^+ + \varepsilon_M)} \left[\Delta_{\sigma'} \left\langle \left\langle d_{\sigma'}; d_\sigma^\dagger \right\rangle \right\rangle + \Delta_{\bar{\sigma}'} \left\langle \left\langle d_{\bar{\sigma}'}; d_\sigma^\dagger \right\rangle \right\rangle \right] \\
&- \frac{\Delta_{\sigma'}}{(\omega^+ - \varepsilon_M)} \left[t_{\sigma'} \left\langle \left\langle d_{\sigma'}; d_\sigma^\dagger \right\rangle \right\rangle + t_{\bar{\sigma}'} \left\langle \left\langle d_{\bar{\sigma}'}; d_\sigma^\dagger \right\rangle \right\rangle \right] \quad (\text{A.123})
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
(\omega^+ + \tilde{\varepsilon}_{d\sigma'} + i\Gamma_{N\sigma'}) \left\langle \left\langle d_{\sigma'}^\dagger; d_\sigma^\dagger \right\rangle \right\rangle &= \left[\frac{t_{\sigma'} t_{\sigma'}}{(\omega^+ + \varepsilon_M)} + \frac{\Delta_{\sigma'} \Delta_{\sigma'}}{(\omega^+ - \varepsilon_M)} \right] \left\langle \left\langle d_{\sigma'}^\dagger; d_\sigma^\dagger \right\rangle \right\rangle \\
&+ \left[\frac{t_{\sigma'} t_{\bar{\sigma}'}}{(\omega^+ + \varepsilon_M)} + \frac{\Delta_{\sigma'} \Delta_{\bar{\sigma}'}}{(\omega^+ - \varepsilon_M)} \right] \left\langle \left\langle d_{\bar{\sigma}'}^\dagger; d_\sigma^\dagger \right\rangle \right\rangle \\
&- \left[\frac{t_{\sigma'} \Delta_{\sigma'}}{(\omega^+ + \varepsilon_M)} + \frac{\Delta_{\sigma'} t_{\sigma'}}{(\omega^+ - \varepsilon_M)} \right] \left\langle \left\langle d_{\sigma'}; d_\sigma^\dagger \right\rangle \right\rangle \\
&- \left[\frac{t_{\sigma'} \Delta_{\bar{\sigma}'}}{(\omega^+ + \varepsilon_M)} + \frac{\Delta_{\sigma'} t_{\bar{\sigma}'}}{(\omega^+ - \varepsilon_M)} \right] \left\langle \left\langle d_{\bar{\sigma}'}; d_\sigma^\dagger \right\rangle \right\rangle \quad (\text{A.124})
\end{aligned}$$

Where we recognize

$$\bar{k}_1^{\sigma'\sigma'} = \frac{t_{\sigma'} \Delta_{\sigma'}}{(\omega^+ + \varepsilon_M)} + \frac{\Delta_{\sigma'} t_{\sigma'}}{(\omega^+ - \varepsilon_M)}.$$

$$\bar{k}_1^{\sigma'\bar{\sigma}'} = \frac{t_{\sigma'} \Delta_{\bar{\sigma}'}}{(\omega^+ + \varepsilon_M)} + \frac{\Delta_{\sigma'} t_{\bar{\sigma}'}}{(\omega^+ - \varepsilon_M)}.$$

$$\bar{k}_2^{\sigma'\sigma'} = \frac{t_{\sigma'} t_{\sigma'}}{(\omega^+ + \varepsilon_M)} + \frac{\Delta_{\sigma'} \Delta_{\sigma'}}{(\omega^+ - \varepsilon_M)}.$$

$$\bar{k}_2^{\sigma'\bar{\sigma}'} = \frac{t_{\sigma'} t_{\bar{\sigma}'}}{(\omega^+ + \varepsilon_M)} + \frac{\Delta_{\sigma'} \Delta_{\bar{\sigma}'}}{(\omega^+ - \varepsilon_M)}.$$

Then

$$\begin{aligned} (\omega^+ + \tilde{\varepsilon}_{d\sigma'} + i\Gamma_{N\sigma'}) \langle\langle d_{\sigma'}^\dagger; d_\sigma^\dagger \rangle\rangle &= \bar{k}_2^{\sigma'\sigma'} \langle\langle d_{\sigma'}^\dagger; d_\sigma^\dagger \rangle\rangle + \bar{k}_2^{\sigma'\bar{\sigma}'} \langle\langle d_{\bar{\sigma}'}^\dagger; d_\sigma^\dagger \rangle\rangle \\ &- \bar{k}_1^{\sigma'\sigma'} \langle\langle d_{\sigma'}^\dagger; d_\sigma^\dagger \rangle\rangle - \bar{k}_1^{\sigma'\bar{\sigma}'} \langle\langle d_{\bar{\sigma}'}^\dagger; d_\sigma^\dagger \rangle\rangle \end{aligned} \quad (\text{A.125})$$

$$\begin{aligned} (\omega^+ + \tilde{\varepsilon}_{d\sigma'} - \bar{k}_2^{\sigma'\sigma'} + i\Gamma_{N\sigma'}) \langle\langle d_{\sigma'}^\dagger; d_\sigma^\dagger \rangle\rangle &= \bar{k}_2^{\sigma'\bar{\sigma}'} \langle\langle d_{\bar{\sigma}'}^\dagger; d_\sigma^\dagger \rangle\rangle - \bar{k}_1^{\sigma'\sigma'} \langle\langle d_{\sigma'}^\dagger; d_\sigma^\dagger \rangle\rangle \\ &- -\bar{k}_1^{\sigma'\bar{\sigma}'} \langle\langle d_{\bar{\sigma}'}^\dagger; d_\sigma^\dagger \rangle\rangle \end{aligned} \quad (\text{A.126})$$

A.2.1 System of Green's functions

We have the expressions which allow us to obtain both normal and anomalous GFs for each spin component.

$$\begin{aligned} (\omega^+ - \tilde{\varepsilon}_{d\sigma'} - k_2^{\sigma'\sigma'} + i\Gamma_{N\sigma'}) \langle\langle d_{\sigma'}^\dagger; d_\sigma^\dagger \rangle\rangle &= \delta_{\sigma\sigma'} + k_2^{\sigma'\bar{\sigma}'} \langle\langle d_{\bar{\sigma}'}^\dagger; d_\sigma^\dagger \rangle\rangle - k_1^{\sigma'\sigma'} \langle\langle d_{\sigma'}^\dagger; d_\sigma^\dagger \rangle\rangle \\ &- k_1^{\sigma'\bar{\sigma}'} \langle\langle d_{\bar{\sigma}'}^\dagger; d_\sigma^\dagger \rangle\rangle \end{aligned} \quad (\text{A.127})$$

$$\begin{aligned} (\omega^+ + \tilde{\varepsilon}_{d\sigma'} - \bar{k}_2^{\sigma'\sigma'} + i\Gamma_{N\sigma'}) \langle\langle d_{\sigma'}^\dagger; d_\sigma^\dagger \rangle\rangle &= \bar{k}_2^{\sigma'\bar{\sigma}'} \langle\langle d_{\bar{\sigma}'}^\dagger; d_\sigma^\dagger \rangle\rangle - \bar{k}_1^{\sigma'\sigma'} \langle\langle d_{\sigma'}^\dagger; d_\sigma^\dagger \rangle\rangle \\ &- \bar{k}_1^{\sigma'\bar{\sigma}'} \langle\langle d_{\bar{\sigma}'}^\dagger; d_\sigma^\dagger \rangle\rangle \end{aligned} \quad (\text{A.128})$$

Where

$$k_1^{\sigma'\sigma'} = \frac{t_{\sigma'}\Delta_{\sigma'}}{(\omega^+ - \varepsilon_M)} + \frac{\Delta_{\sigma'}t_{\sigma'}}{(\omega^+ + \varepsilon_M)} \quad \bar{k}_1^{\sigma'\sigma'} = \frac{t_{\sigma'}\Delta_{\sigma'}}{(\omega^+ + \varepsilon_M)} + \frac{\Delta_{\sigma'}t_{\sigma'}}{(\omega^+ - \varepsilon_M)} \quad (\text{A.129})$$

$$k_1^{\sigma'\bar{\sigma}'} = \frac{t_{\sigma'}\Delta_{\bar{\sigma}'}}{(\omega^+ - \varepsilon_M)} + \frac{\Delta_{\sigma'}t_{\bar{\sigma}'}}{(\omega^+ + \varepsilon_M)} \quad \bar{k}_1^{\sigma'\bar{\sigma}'} = \frac{t_{\sigma'}\Delta_{\bar{\sigma}'}}{(\omega^+ + \varepsilon_M)} + \frac{\Delta_{\sigma'}t_{\bar{\sigma}'}}{(\omega^+ - \varepsilon_M)} \quad (\text{A.130})$$

$$k_2^{\sigma'\sigma'} = \frac{t_{\sigma'}t_{\sigma'}}{(\omega^+ - \varepsilon_M)} + \frac{\Delta_{\sigma'}\Delta_{\sigma'}}{(\omega^+ + \varepsilon_M)} \quad \bar{k}_2^{\sigma'\sigma'} = \frac{t_{\sigma'}t_{\sigma'}}{(\omega^+ + \varepsilon_M)} + \frac{\Delta_{\sigma'}\Delta_{\sigma'}}{(\omega^+ - \varepsilon_M)} \quad (\text{A.131})$$

$$k_2^{\sigma'\bar{\sigma}'} = \frac{t_{\sigma'}t_{\bar{\sigma}'}}{(\omega^+ - \varepsilon_M)} + \frac{\Delta_{\sigma'}\Delta_{\bar{\sigma}'}}{(\omega^+ + \varepsilon_M)} \quad \bar{k}_2^{\sigma'\bar{\sigma}'} = \frac{t_{\sigma'}t_{\bar{\sigma}'}}{(\omega^+ + \varepsilon_M)} + \frac{\Delta_{\sigma'}\Delta_{\bar{\sigma}'}}{(\omega^+ - \varepsilon_M)} \quad (\text{A.132})$$

Once we intend to write a system of coupled equations carrying all the GFs of the system in a matrix form, it is suitable defining the column matrix

$$\mathbf{G}^\sigma(\omega) = \begin{bmatrix} \langle\langle d_\sigma; d_\sigma^\dagger \rangle\rangle \\ \langle\langle d_{\bar{\sigma}}; d_\sigma^\dagger \rangle\rangle \\ \langle\langle d_\sigma^\dagger; d_\sigma^\dagger \rangle\rangle \\ \langle\langle d_{\bar{\sigma}}^\dagger; d_\sigma^\dagger \rangle\rangle \end{bmatrix}. \quad (\text{A.133})$$

The electronic of states per spin is given by:

$$\rho^\sigma(\omega) = -\frac{1}{\pi}\text{Im}[\mathbf{G}_{11}^\sigma(\omega)], \quad (\text{A.134})$$

with $\mathbf{G}_{11}^\sigma(\omega) = \langle\langle d_\sigma; d_\sigma^\dagger \rangle\rangle$. The elements of $\mathbf{G}^\sigma(\omega)$ can be obtained numerically, since

$$\mathbf{A}^\sigma(\omega)\mathbf{G}^\sigma(\omega) = \mathbf{R}$$

$$\mathbf{G}^\sigma(\omega) = [\mathbf{A}^\sigma(\omega)]^{-1} \mathbf{R} \quad (\text{A.135})$$

wherein $A^\sigma(\omega)$ is a 4×4 matrix containing the information of the system and R is a 4×1 column matrix.

A.2.1.1 Finding the spin-up matrix Green's function $G^\uparrow(\omega)$

Below, we perform the calculation of $\sigma = \sigma' = \uparrow$ ($\bar{\sigma} = \bar{\sigma}' = \downarrow$). Using equation (A.127) and assuming that $\Gamma_{N\uparrow} = \Gamma_{N\downarrow} = \Gamma_N$.

$$\left(\omega^+ - \tilde{\varepsilon}_{d\uparrow} - k_2^{\uparrow\uparrow} + i\Gamma_N \right) \langle\langle d_\uparrow; d_\uparrow^\dagger \rangle\rangle = 1 + k_2^{\uparrow\downarrow} \langle\langle d_\downarrow; d_\uparrow^\dagger \rangle\rangle - k_1^{\uparrow\uparrow} \langle\langle d_\uparrow^\dagger; d_\uparrow^\dagger \rangle\rangle - k_1^{\uparrow\downarrow} \langle\langle d_\downarrow^\dagger; d_\uparrow^\dagger \rangle\rangle, \quad (\text{A.136})$$

which forces us to find the relations $\langle\langle d_\downarrow; d_\uparrow^\dagger \rangle\rangle$, $\langle\langle d_\uparrow^\dagger; d_\uparrow^\dagger \rangle\rangle$ and $\langle\langle d_\downarrow^\dagger; d_\uparrow^\dagger \rangle\rangle$. Let's start for the first one. From equation (A.127)

$$\begin{aligned} \left(\omega^+ - \tilde{\varepsilon}_{d\sigma'} - k_2^{\sigma'\sigma'} + i\Gamma_{N\sigma'} \right) \langle\langle d_{\sigma'}; d_\sigma^\dagger \rangle\rangle &= \delta_{\sigma\sigma'} + k_2^{\sigma'\bar{\sigma}'} \langle\langle d_{\bar{\sigma}'}; d_\sigma^\dagger \rangle\rangle - k_1^{\sigma'\sigma'} \langle\langle d_{\sigma'}^\dagger; d_\sigma^\dagger \rangle\rangle \\ &\quad - k_1^{\sigma'\bar{\sigma}'} \langle\langle d_{\bar{\sigma}'}^\dagger; d_\sigma^\dagger \rangle\rangle \end{aligned} \quad (\text{A.137})$$

$$\begin{aligned} \left(\omega^+ - \tilde{\varepsilon}_{d\downarrow} - k_2^{\downarrow\downarrow} + i\Gamma_N \right) \langle\langle d_\downarrow; d_\uparrow^\dagger \rangle\rangle &= k_2^{\downarrow\uparrow} \langle\langle d_\uparrow; d_\uparrow^\dagger \rangle\rangle - k_1^{\downarrow\downarrow} \langle\langle d_\downarrow^\dagger; d_\uparrow^\dagger \rangle\rangle \\ &\quad - k_1^{\downarrow\uparrow} \langle\langle d_\uparrow^\dagger; d_\uparrow^\dagger \rangle\rangle \end{aligned} \quad (\text{A.138})$$

For anomalous GF $\langle\langle d_\uparrow^\dagger; d_\uparrow^\dagger \rangle\rangle$, we use the relation of Eq.(A.128)

$$\begin{aligned} \left(\omega^+ + \tilde{\varepsilon}_{d\sigma'} - \bar{k}_2^{\sigma'\sigma'} + i\Gamma_{N\sigma'} \right) \langle\langle d_{\sigma'}^\dagger; d_\sigma^\dagger \rangle\rangle &= \bar{k}_2^{\sigma'\bar{\sigma}'} \langle\langle d_{\bar{\sigma}'}^\dagger; d_\sigma^\dagger \rangle\rangle - \bar{k}_1^{\sigma'\sigma'} \langle\langle d_{\sigma'}; d_\sigma^\dagger \rangle\rangle \\ &\quad - \bar{k}_1^{\sigma'\bar{\sigma}'} \langle\langle d_{\bar{\sigma}'}; d_\sigma^\dagger \rangle\rangle \end{aligned} \quad (\text{A.139})$$

$$\begin{aligned} \left(\omega^+ + \tilde{\varepsilon}_{d\uparrow} - \bar{k}_2^{\uparrow\uparrow} + i\Gamma_N \right) \langle\langle d_\uparrow^\dagger; d_\uparrow^\dagger \rangle\rangle &= \bar{k}_2^{\uparrow\downarrow} \langle\langle d_\downarrow^\dagger; d_\uparrow^\dagger \rangle\rangle - \bar{k}_1^{\uparrow\uparrow} \langle\langle d_\uparrow; d_\uparrow^\dagger \rangle\rangle \\ &\quad - \bar{k}_1^{\uparrow\downarrow} \langle\langle d_\downarrow; d_\uparrow^\dagger \rangle\rangle, \end{aligned} \quad (\text{A.140})$$

and the last term $\langle\langle d_\downarrow^\dagger; d_\uparrow^\dagger \rangle\rangle$:

$$\begin{aligned} \left(\omega^+ + \tilde{\varepsilon}_{d\sigma'} - \bar{k}_2^{\sigma'\sigma'} + i\Gamma_{N\sigma'} \right) \langle\langle d_{\sigma'}^\dagger; d_\sigma^\dagger \rangle\rangle &= \bar{k}_2^{\sigma'\bar{\sigma}'} \langle\langle d_{\bar{\sigma}'}^\dagger; d_\sigma^\dagger \rangle\rangle - \bar{k}_1^{\sigma'\sigma'} \langle\langle d_{\sigma'}; d_\sigma^\dagger \rangle\rangle \\ &- \bar{k}_1^{\sigma'\bar{\sigma}'} \langle\langle d_{\bar{\sigma}'}; d_\sigma^\dagger \rangle\rangle \end{aligned} \quad (\text{A.141})$$

$$\begin{aligned} \left(\omega^+ + \tilde{\varepsilon}_{d\downarrow} - \bar{k}_2^{\downarrow\downarrow} + i\Gamma_N \right) \langle\langle d_\downarrow^\dagger; d_\uparrow^\dagger \rangle\rangle &= \bar{k}_2^{\downarrow\uparrow} \langle\langle d_\uparrow^\dagger; d_\uparrow^\dagger \rangle\rangle - \bar{k}_1^{\downarrow\downarrow} \langle\langle d_\downarrow; d_\uparrow^\dagger \rangle\rangle \\ &- \bar{k}_1^{\downarrow\uparrow} \langle\langle d_\downarrow; d_\uparrow^\dagger \rangle\rangle \end{aligned} \quad (\text{A.142})$$

Thus, we have the following system of coupled GFs (Eq.(A.136), (A.138), (A.140) and (A.142)):

$$\begin{aligned} \left(\omega^+ - \tilde{\varepsilon}_{d\uparrow} - k_2^{\uparrow\uparrow} + i\Gamma_N \right) \langle\langle d_\uparrow; d_\uparrow^\dagger \rangle\rangle &= 1 + k_2^{\uparrow\downarrow} \langle\langle d_\downarrow; d_\uparrow^\dagger \rangle\rangle - k_1^{\uparrow\uparrow} \langle\langle d_\uparrow^\dagger; d_\uparrow^\dagger \rangle\rangle \\ &- k_1^{\uparrow\downarrow} \langle\langle d_\downarrow^\dagger; d_\uparrow^\dagger \rangle\rangle, \end{aligned} \quad (\text{A.143})$$

$$\left(\omega^+ - \tilde{\varepsilon}_{d\downarrow} - k_2^{\downarrow\downarrow} + i\Gamma_N \right) \langle\langle d_\downarrow; d_\uparrow^\dagger \rangle\rangle = k_2^{\downarrow\uparrow} \langle\langle d_\uparrow; d_\uparrow^\dagger \rangle\rangle - k_1^{\downarrow\downarrow} \langle\langle d_\downarrow^\dagger; d_\uparrow^\dagger \rangle\rangle - k_1^{\downarrow\uparrow} \langle\langle d_\uparrow^\dagger; d_\uparrow^\dagger \rangle\rangle, \quad (\text{A.144})$$

$$\left(\omega^+ + \tilde{\varepsilon}_{d\uparrow} - \bar{k}_2^{\uparrow\uparrow} + i\Gamma_N \right) \langle\langle d_\uparrow^\dagger; d_\uparrow^\dagger \rangle\rangle = \bar{k}_2^{\uparrow\downarrow} \langle\langle d_\downarrow^\dagger; d_\uparrow^\dagger \rangle\rangle - \bar{k}_1^{\uparrow\uparrow} \langle\langle d_\uparrow; d_\uparrow^\dagger \rangle\rangle - \bar{k}_1^{\uparrow\downarrow} \langle\langle d_\downarrow; d_\uparrow^\dagger \rangle\rangle, \quad (\text{A.145})$$

$$\left(\omega^+ + \tilde{\varepsilon}_{d\downarrow} - \bar{k}_2^{\downarrow\downarrow} + i\Gamma_N \right) \langle\langle d_\downarrow^\dagger; d_\uparrow^\dagger \rangle\rangle = \bar{k}_2^{\downarrow\uparrow} \langle\langle d_\uparrow^\dagger; d_\uparrow^\dagger \rangle\rangle - \bar{k}_1^{\downarrow\downarrow} \langle\langle d_\downarrow; d_\uparrow^\dagger \rangle\rangle - \bar{k}_1^{\downarrow\uparrow} \langle\langle d_\uparrow^\dagger; d_\uparrow^\dagger \rangle\rangle. \quad (\text{A.146})$$

The system of equations can rewrite as:

$$\left(\omega^+ - \tilde{\varepsilon}_{d\uparrow} - k_2^{\uparrow\uparrow} + i\Gamma_N \right) \langle\langle d_\uparrow; d_\uparrow^\dagger \rangle\rangle - k_2^{\uparrow\downarrow} \langle\langle d_\downarrow; d_\uparrow^\dagger \rangle\rangle + k_1^{\uparrow\uparrow} \langle\langle d_\uparrow^\dagger; d_\uparrow^\dagger \rangle\rangle + k_1^{\uparrow\downarrow} \langle\langle d_\downarrow^\dagger; d_\uparrow^\dagger \rangle\rangle = 1$$

$$\left(\omega^+ - \tilde{\varepsilon}_{d\downarrow} - k_2^{\downarrow\downarrow} + i\Gamma_N \right) \langle\langle d_\downarrow; d_\uparrow^\dagger \rangle\rangle - k_2^{\downarrow\uparrow} \langle\langle d_\uparrow; d_\uparrow^\dagger \rangle\rangle + k_1^{\downarrow\downarrow} \langle\langle d_\downarrow^\dagger; d_\uparrow^\dagger \rangle\rangle + k_1^{\downarrow\uparrow} \langle\langle d_\uparrow^\dagger; d_\uparrow^\dagger \rangle\rangle = 0$$

$$\left(\omega^+ + \tilde{\varepsilon}_{d\uparrow} - \bar{k}_2^{\uparrow\uparrow} + i\Gamma_N \right) \langle\langle d_\uparrow^\dagger; d_\uparrow^\dagger \rangle\rangle - \bar{k}_2^{\uparrow\downarrow} \langle\langle d_\downarrow^\dagger; d_\uparrow^\dagger \rangle\rangle + \bar{k}_1^{\uparrow\uparrow} \langle\langle d_\uparrow; d_\uparrow^\dagger \rangle\rangle + \bar{k}_1^{\uparrow\downarrow} \langle\langle d_\downarrow; d_\uparrow^\dagger \rangle\rangle = 0$$

$$\left(\omega^+ + \tilde{\varepsilon}_{d\downarrow} - \bar{k}_2^{\downarrow\downarrow} + i\Gamma_N \right) \langle\langle d_\downarrow^\dagger; d_\uparrow^\dagger \rangle\rangle - \bar{k}_2^{\downarrow\uparrow} \langle\langle d_\uparrow^\dagger; d_\uparrow^\dagger \rangle\rangle + \bar{k}_1^{\downarrow\downarrow} \langle\langle d_\downarrow; d_\uparrow^\dagger \rangle\rangle + \bar{k}_1^{\downarrow\uparrow} \langle\langle d_\uparrow; d_\uparrow^\dagger \rangle\rangle = 0$$

and

$$\left(\omega^+ - \tilde{\varepsilon}_{d\uparrow} - k_2^{\uparrow\uparrow} + i\Gamma_N \right) \langle\langle d_\uparrow; d_\uparrow^\dagger \rangle\rangle - k_2^{\uparrow\downarrow} \langle\langle d_\downarrow; d_\uparrow^\dagger \rangle\rangle + k_1^{\uparrow\uparrow} \langle\langle d_\uparrow^\dagger; d_\uparrow^\dagger \rangle\rangle + k_1^{\uparrow\downarrow} \langle\langle d_\downarrow^\dagger; d_\uparrow^\dagger \rangle\rangle = 1 \quad (\text{A.147})$$

$$-k_2^{\downarrow\uparrow} \langle\langle d_\uparrow; d_\uparrow^\dagger \rangle\rangle + \left(\omega^+ - \tilde{\varepsilon}_{d\downarrow} - k_2^{\downarrow\downarrow} + i\Gamma_N \right) \langle\langle d_\downarrow; d_\uparrow^\dagger \rangle\rangle + k_1^{\downarrow\uparrow} \langle\langle d_\uparrow^\dagger; d_\uparrow^\dagger \rangle\rangle + k_1^{\downarrow\downarrow} \langle\langle d_\downarrow^\dagger; d_\uparrow^\dagger \rangle\rangle = 0 \quad (\text{A.148})$$

$$\bar{k}_1^{\uparrow\uparrow} \langle\langle d_\uparrow; d_\uparrow^\dagger \rangle\rangle + \bar{k}_1^{\uparrow\downarrow} \langle\langle d_\downarrow; d_\uparrow^\dagger \rangle\rangle + \left(\omega^+ + \tilde{\varepsilon}_{d\uparrow} - \bar{k}_2^{\uparrow\uparrow} + i\Gamma_N \right) \langle\langle d_\uparrow^\dagger; d_\uparrow^\dagger \rangle\rangle - \bar{k}_2^{\uparrow\downarrow} \langle\langle d_\downarrow^\dagger; d_\uparrow^\dagger \rangle\rangle = 0 \quad (\text{A.149})$$

$$\bar{k}_1^{\downarrow\uparrow} \langle\langle d_\uparrow; d_\uparrow^\dagger \rangle\rangle + \bar{k}_1^{\downarrow\downarrow} \langle\langle d_\downarrow; d_\uparrow^\dagger \rangle\rangle - \bar{k}_2^{\downarrow\uparrow} \langle\langle d_\uparrow^\dagger; d_\uparrow^\dagger \rangle\rangle + \left(\omega^+ + \tilde{\varepsilon}_{d\downarrow} - \bar{k}_2^{\downarrow\downarrow} + i\Gamma_N \right) \langle\langle d_\downarrow^\dagger; d_\uparrow^\dagger \rangle\rangle = 0 \quad (\text{A.150})$$

For sake of simplicity, let's consider:

$$a_\sigma(\omega) = (\omega^+ - \tilde{\varepsilon}_{d\sigma} - k_2^{\sigma\sigma} + i\Gamma_N) \quad (\text{A.151})$$

and

$$b_\sigma(\omega) = (\omega^+ + \tilde{\varepsilon}_{d\sigma} - \bar{k}_2^{\sigma\sigma} + i\Gamma_N), \quad (\text{A.152})$$

which allows us to rewrite the system above as

$$a_\uparrow(\omega) \langle \langle d_\uparrow; d_\uparrow^\dagger \rangle \rangle - k_2^{\uparrow\downarrow} \langle \langle d_\downarrow; d_\uparrow^\dagger \rangle \rangle + k_1^{\uparrow\uparrow} \langle \langle d_\uparrow^\dagger; d_\uparrow^\dagger \rangle \rangle + k_1^{\uparrow\downarrow} \langle \langle d_\downarrow^\dagger; d_\uparrow^\dagger \rangle \rangle = 1 \quad (\text{A.153})$$

$$-k_2^{\downarrow\uparrow} \langle \langle d_\uparrow; d_\uparrow^\dagger \rangle \rangle + a_\downarrow(\omega) \langle \langle d_\downarrow; d_\uparrow^\dagger \rangle \rangle + k_1^{\downarrow\uparrow} \langle \langle d_\uparrow^\dagger; d_\uparrow^\dagger \rangle \rangle + k_1^{\downarrow\downarrow} \langle \langle d_\downarrow^\dagger; d_\uparrow^\dagger \rangle \rangle = 0 \quad (\text{A.154})$$

$$\bar{k}_1^{\uparrow\uparrow} \langle \langle d_\uparrow; d_\uparrow^\dagger \rangle \rangle + \bar{k}_1^{\uparrow\downarrow} \langle \langle d_\downarrow; d_\uparrow^\dagger \rangle \rangle + b_\uparrow(\omega) \langle \langle d_\uparrow^\dagger; d_\uparrow^\dagger \rangle \rangle - \bar{k}_2^{\uparrow\downarrow} \langle \langle d_\downarrow^\dagger; d_\uparrow^\dagger \rangle \rangle = 0 \quad (\text{A.155})$$

$$\bar{k}_1^{\downarrow\uparrow} \langle \langle d_\uparrow; d_\uparrow^\dagger \rangle \rangle + \bar{k}_1^{\downarrow\downarrow} \langle \langle d_\downarrow; d_\uparrow^\dagger \rangle \rangle - \bar{k}_2^{\downarrow\uparrow} \langle \langle d_\uparrow^\dagger; d_\uparrow^\dagger \rangle \rangle + b_\downarrow(\omega) \langle \langle d_\downarrow^\dagger; d_\uparrow^\dagger \rangle \rangle = 0 \quad (\text{A.156})$$

or in matrix form

$$\begin{bmatrix} a_\uparrow(\omega) & -k_2^{\uparrow\downarrow} & k_1^{\uparrow\uparrow} & k_1^{\uparrow\downarrow} \\ -k_2^{\downarrow\uparrow} & a_\downarrow(\omega) & k_1^{\downarrow\uparrow} & k_1^{\downarrow\downarrow} \\ \bar{k}_1^{\uparrow\uparrow} & \bar{k}_1^{\uparrow\downarrow} & b_\uparrow(\omega) & -\bar{k}_2^{\uparrow\downarrow} \\ \bar{k}_1^{\downarrow\uparrow} & \bar{k}_1^{\downarrow\downarrow} & -\bar{k}_2^{\downarrow\uparrow} & b_\downarrow(\omega) \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} \langle \langle d_\uparrow; d_\uparrow^\dagger \rangle \rangle \\ \langle \langle d_\downarrow; d_\uparrow^\dagger \rangle \rangle \\ \langle \langle d_\uparrow^\dagger; d_\uparrow^\dagger \rangle \rangle \\ \langle \langle d_\downarrow^\dagger; d_\uparrow^\dagger \rangle \rangle \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \quad (\text{A.157})$$

A.2.1.2 Finding the spin-down matrix Green's function $G^\downarrow(\omega)$

Now, we perform the calculation of $\sigma = \sigma' = \downarrow$ ($\bar{\sigma} = \bar{\sigma}' = \uparrow$). Using equation (A.127) and assuming that $\Gamma_{N\uparrow} = \Gamma_{N\downarrow} = \Gamma_N$.

$$\begin{aligned} \left(\omega^+ - \tilde{\varepsilon}_{d\sigma'} - k_2^{\sigma'\sigma'} + i\Gamma_{N\sigma'} \right) \langle\langle d_{\sigma'}; d_\sigma^\dagger \rangle\rangle &= \delta_{\sigma\sigma'} + k_2^{\sigma'\bar{\sigma}'} \langle\langle d_{\bar{\sigma}'}; d_\sigma^\dagger \rangle\rangle - k_1^{\sigma'\sigma'} \langle\langle d_{\sigma'}^\dagger; d_\sigma^\dagger \rangle\rangle \\ &- k_1^{\sigma'\bar{\sigma}'} \langle\langle d_{\bar{\sigma}'}^\dagger; d_\sigma^\dagger \rangle\rangle \end{aligned} \quad (\text{A.158})$$

$$\begin{aligned} \left(\omega^+ - \tilde{\varepsilon}_{d\downarrow} - k_2^{\downarrow\downarrow} + i\Gamma_N \right) \langle\langle d_\downarrow; d_\downarrow^\dagger \rangle\rangle &= 1 + k_2^{\uparrow\downarrow} \langle\langle d_\uparrow; d_\downarrow^\dagger \rangle\rangle - k_1^{\downarrow\downarrow} \langle\langle d_\downarrow^\dagger; d_\downarrow^\dagger \rangle\rangle \\ &- k_1^{\downarrow\uparrow} \langle\langle d_\uparrow^\dagger; d_\downarrow^\dagger \rangle\rangle. \end{aligned} \quad (\text{A.159})$$

we need to determine $\langle\langle d_\uparrow; d_\downarrow^\dagger \rangle\rangle$, $\langle\langle d_\uparrow^\dagger; d_\downarrow^\dagger \rangle\rangle$ and $\langle\langle d_\downarrow^\dagger; d_\downarrow^\dagger \rangle\rangle$.

Using Eq.(A.127), let's determine $\langle\langle d_\uparrow; d_\downarrow^\dagger \rangle\rangle$

$$\begin{aligned} \left(\omega^+ - \tilde{\varepsilon}_{d\sigma'} - k_2^{\sigma'\sigma'} + i\Gamma_{N\sigma'} \right) \langle\langle d_{\sigma'}; d_\sigma^\dagger \rangle\rangle &= \delta_{\sigma\sigma'} + k_2^{\sigma'\bar{\sigma}'} \langle\langle d_{\bar{\sigma}'}; d_\sigma^\dagger \rangle\rangle - k_1^{\sigma'\sigma'} \langle\langle d_{\sigma'}^\dagger; d_\sigma^\dagger \rangle\rangle \\ &- k_1^{\sigma'\bar{\sigma}'} \langle\langle d_{\bar{\sigma}'}^\dagger; d_\sigma^\dagger \rangle\rangle \end{aligned} \quad (\text{A.160})$$

$$\begin{aligned} \left(\omega^+ - \tilde{\varepsilon}_{d\uparrow} - k_2^{\uparrow\uparrow} + i\Gamma_N \right) \langle\langle d_\uparrow; d_\downarrow^\dagger \rangle\rangle &= k_2^{\uparrow\downarrow} \langle\langle d_\downarrow; d_\downarrow^\dagger \rangle\rangle - k_1^{\uparrow\uparrow} \langle\langle d_\uparrow^\dagger; d_\downarrow^\dagger \rangle\rangle \\ &- k_1^{\uparrow\downarrow} \langle\langle d_\downarrow^\dagger; d_\downarrow^\dagger \rangle\rangle. \end{aligned} \quad (\text{A.161})$$

and, using Eq.(A.128) for to determine the anomalous term $\langle\langle d_\uparrow^\dagger; d_\downarrow^\dagger \rangle\rangle$.

$$\begin{aligned} \left(\omega^+ + \tilde{\varepsilon}_{d\sigma'} - \bar{k}_2^{\sigma'\sigma'} + i\Gamma_{N\sigma'} \right) \langle\langle d_{\sigma'}^\dagger; d_\sigma^\dagger \rangle\rangle &= \bar{k}_2^{\sigma'\bar{\sigma}'} \langle\langle d_{\bar{\sigma}'}^\dagger; d_\sigma^\dagger \rangle\rangle - \bar{k}_1^{\sigma'\sigma'} \langle\langle d_{\sigma'}; d_\sigma^\dagger \rangle\rangle \\ &- \bar{k}_1^{\sigma'\bar{\sigma}'} \langle\langle d_{\bar{\sigma}'}; d_\sigma^\dagger \rangle\rangle \end{aligned} \quad (\text{A.162})$$

$$\begin{aligned} \left(\omega^+ + \tilde{\varepsilon}_{d\uparrow} - \bar{k}_2^{\uparrow\uparrow} + i\Gamma_N \right) \langle\langle d_{\uparrow}^\dagger; d_{\downarrow}^\dagger \rangle\rangle &= \bar{k}_2^{\uparrow\downarrow} \langle\langle d_{\downarrow}^\dagger; d_{\downarrow}^\dagger \rangle\rangle - \bar{k}_1^{\uparrow\uparrow} \langle\langle d_{\uparrow}; d_{\downarrow}^\dagger \rangle\rangle \\ &- \bar{k}_1^{\uparrow\downarrow} \langle\langle d_{\downarrow}; d_{\downarrow}^\dagger \rangle\rangle \end{aligned} \quad (\text{A.163})$$

and, the last term $\langle\langle d_{\downarrow}^\dagger; d_{\downarrow}^\dagger \rangle\rangle$ by Eq.(A.128)

$$\begin{aligned} \left(\omega^+ + \tilde{\varepsilon}_{d\sigma'} - \bar{k}_2^{\sigma'\sigma'} + i\Gamma_{N\sigma'} \right) \langle\langle d_{\sigma'}^\dagger; d_{\sigma}^\dagger \rangle\rangle &= \bar{k}_2^{\sigma'\bar{\sigma}'} \langle\langle d_{\bar{\sigma}'}^\dagger; d_{\sigma}^\dagger \rangle\rangle - \bar{k}_1^{\sigma'\sigma'} \langle\langle d_{\sigma'}; d_{\sigma}^\dagger \rangle\rangle \\ &- \bar{k}_1^{\sigma'\bar{\sigma}'} \langle\langle d_{\bar{\sigma}'}; d_{\sigma}^\dagger \rangle\rangle \end{aligned} \quad (\text{A.164})$$

$$\begin{aligned} \left(\omega^+ + \tilde{\varepsilon}_{d\downarrow} - \bar{k}_2^{\downarrow\downarrow} + i\Gamma_N \right) \langle\langle d_{\downarrow}^\dagger; d_{\downarrow}^\dagger \rangle\rangle &= \bar{k}_2^{\downarrow\uparrow} \langle\langle d_{\uparrow}^\dagger; d_{\downarrow}^\dagger \rangle\rangle - \bar{k}_1^{\downarrow\downarrow} \langle\langle d_{\downarrow}; d_{\downarrow}^\dagger \rangle\rangle \\ &- \bar{k}_1^{\downarrow\uparrow} \langle\langle d_{\uparrow}; d_{\downarrow}^\dagger \rangle\rangle. \end{aligned} \quad (\text{A.165})$$

We have the system of coupled GFs:

$$\left(\omega^+ - \tilde{\varepsilon}_{d\downarrow} - k_2^{\downarrow\downarrow} + i\Gamma_N \right) \langle\langle d_{\downarrow}; d_{\downarrow}^\dagger \rangle\rangle = 1 + k_2^{\downarrow\uparrow} \langle\langle d_{\uparrow}; d_{\downarrow}^\dagger \rangle\rangle - k_1^{\downarrow\uparrow} \langle\langle d_{\uparrow}^\dagger; d_{\downarrow}^\dagger \rangle\rangle - k_1^{\downarrow\downarrow} \langle\langle d_{\downarrow}^\dagger; d_{\downarrow}^\dagger \rangle\rangle$$

$$\left(\omega^+ - \tilde{\varepsilon}_{d\uparrow} - k_2^{\uparrow\uparrow} + i\Gamma_N \right) \langle\langle d_{\uparrow}; d_{\downarrow}^\dagger \rangle\rangle = k_2^{\uparrow\downarrow} \langle\langle d_{\downarrow}; d_{\downarrow}^\dagger \rangle\rangle - k_1^{\uparrow\uparrow} \langle\langle d_{\uparrow}^\dagger; d_{\downarrow}^\dagger \rangle\rangle - k_1^{\uparrow\downarrow} \langle\langle d_{\downarrow}^\dagger; d_{\downarrow}^\dagger \rangle\rangle$$

$$\left(\omega^+ + \tilde{\varepsilon}_{d\uparrow} - \bar{k}_2^{\uparrow\uparrow} + i\Gamma_N \right) \langle\langle d_{\uparrow}^\dagger; d_{\downarrow}^\dagger \rangle\rangle = \bar{k}_2^{\uparrow\downarrow} \langle\langle d_{\downarrow}^\dagger; d_{\downarrow}^\dagger \rangle\rangle - \bar{k}_1^{\uparrow\uparrow} \langle\langle d_{\uparrow}; d_{\downarrow}^\dagger \rangle\rangle - \bar{k}_1^{\uparrow\downarrow} \langle\langle d_{\downarrow}; d_{\downarrow}^\dagger \rangle\rangle$$

$$\left(\omega^+ + \tilde{\varepsilon}_{d\downarrow} - \bar{k}_2^{\downarrow\downarrow} + i\Gamma_N \right) \langle\langle d_{\downarrow}^\dagger; d_{\downarrow}^\dagger \rangle\rangle = \bar{k}_2^{\downarrow\uparrow} \langle\langle d_{\uparrow}^\dagger; d_{\downarrow}^\dagger \rangle\rangle - \bar{k}_1^{\downarrow\uparrow} \langle\langle d_{\uparrow}; d_{\downarrow}^\dagger \rangle\rangle - \bar{k}_1^{\downarrow\downarrow} \langle\langle d_{\downarrow}; d_{\downarrow}^\dagger \rangle\rangle$$

The equations can be rewrite as:

$$\left(\omega^+ - \tilde{\varepsilon}_{d\downarrow} - k_2^{\downarrow\downarrow} + i\Gamma_N \right) \langle\langle d_\downarrow; d_\downarrow^\dagger \rangle\rangle - k_2^{\downarrow\uparrow} \langle\langle d_\uparrow; d_\downarrow^\dagger \rangle\rangle + k_1^{\downarrow\downarrow} \langle\langle d_\downarrow^\dagger; d_\downarrow^\dagger \rangle\rangle + k_1^{\downarrow\uparrow} \langle\langle d_\uparrow^\dagger; d_\downarrow^\dagger \rangle\rangle = 1 \quad (\text{A.166})$$

$$-k_2^{\uparrow\downarrow} \langle\langle d_\downarrow; d_\downarrow^\dagger \rangle\rangle + \left(\omega^+ - \tilde{\varepsilon}_{d\uparrow} - k_2^{\uparrow\uparrow} + i\Gamma_N \right) \langle\langle d_\uparrow; d_\downarrow^\dagger \rangle\rangle + k_1^{\uparrow\downarrow} \langle\langle d_\downarrow^\dagger; d_\downarrow^\dagger \rangle\rangle + k_1^{\uparrow\uparrow} \langle\langle d_\uparrow^\dagger; d_\downarrow^\dagger \rangle\rangle = 0 \quad (\text{A.167})$$

$$\bar{k}_1^{\downarrow\downarrow} \langle\langle d_\downarrow; d_\downarrow^\dagger \rangle\rangle + \bar{k}_1^{\downarrow\uparrow} \langle\langle d_\uparrow; d_\downarrow^\dagger \rangle\rangle + \left(\omega^+ + \tilde{\varepsilon}_{d\downarrow} - \bar{k}_2^{\downarrow\downarrow} + i\Gamma_N \right) \langle\langle d_\downarrow^\dagger; d_\downarrow^\dagger \rangle\rangle - \bar{k}_2^{\downarrow\uparrow} \langle\langle d_\uparrow^\dagger; d_\downarrow^\dagger \rangle\rangle = 0 \quad (\text{A.168})$$

$$\bar{k}_1^{\uparrow\downarrow} \langle\langle d_\downarrow; d_\downarrow^\dagger \rangle\rangle + \bar{k}_1^{\uparrow\uparrow} \langle\langle d_\uparrow; d_\downarrow^\dagger \rangle\rangle - \bar{k}_2^{\uparrow\downarrow} \langle\langle d_\downarrow^\dagger; d_\downarrow^\dagger \rangle\rangle + \left(\omega^+ + \tilde{\varepsilon}_{d\uparrow} - \bar{k}_2^{\uparrow\uparrow} + i\Gamma_N \right) \langle\langle d_\uparrow^\dagger; d_\downarrow^\dagger \rangle\rangle = 0 \quad (\text{A.169})$$

Remember the terms $a_\sigma(\omega)$ and $b_\sigma(\omega)$.

$$a_\downarrow(\omega) \langle\langle d_\downarrow; d_\downarrow^\dagger \rangle\rangle - k_2^{\downarrow\uparrow}(\omega) \langle\langle d_\uparrow; d_\downarrow^\dagger \rangle\rangle + k_1^{\downarrow\downarrow}(\omega) \langle\langle d_\downarrow^\dagger; d_\downarrow^\dagger \rangle\rangle + k_1^{\downarrow\uparrow}(\omega) \langle\langle d_\uparrow^\dagger; d_\downarrow^\dagger \rangle\rangle = 1 \quad (\text{A.170})$$

$$-k_2^{\uparrow\downarrow}(\omega) \langle\langle d_\downarrow; d_\downarrow^\dagger \rangle\rangle + a_\uparrow(\omega) \langle\langle d_\uparrow; d_\downarrow^\dagger \rangle\rangle + k_1^{\uparrow\downarrow}(\omega) \langle\langle d_\downarrow^\dagger; d_\downarrow^\dagger \rangle\rangle + k_1^{\uparrow\uparrow}(\omega) \langle\langle d_\uparrow^\dagger; d_\downarrow^\dagger \rangle\rangle = 0 \quad (\text{A.171})$$

$$\bar{k}_1^{\downarrow\downarrow}(\omega) \langle\langle d_\downarrow; d_\downarrow^\dagger \rangle\rangle + \bar{k}_1^{\downarrow\uparrow}(\omega) \langle\langle d_\uparrow; d_\downarrow^\dagger \rangle\rangle + b_\downarrow(\omega) \langle\langle d_\downarrow^\dagger; d_\downarrow^\dagger \rangle\rangle - \bar{k}_2^{\downarrow\uparrow}(\omega) \langle\langle d_\uparrow^\dagger; d_\downarrow^\dagger \rangle\rangle = 0 \quad (\text{A.172})$$

$$\bar{k}_1^{\uparrow\downarrow}(\omega) \langle\langle d_{\downarrow}; d_{\downarrow}^{\dagger} \rangle\rangle + \bar{k}_1^{\uparrow\uparrow}(\omega) \langle\langle d_{\uparrow}; d_{\downarrow}^{\dagger} \rangle\rangle - \bar{k}_2^{\uparrow\downarrow}(\omega) \langle\langle d_{\downarrow}^{\dagger}; d_{\downarrow}^{\dagger} \rangle\rangle + b_{\uparrow}(\omega) \langle\langle d_{\uparrow}^{\dagger}; d_{\downarrow}^{\dagger} \rangle\rangle = 0 \quad (\text{A.173})$$

In matrix form, we have:

$$\begin{bmatrix} a_{\downarrow}(\omega) & -k_2^{\downarrow\uparrow} & k_1^{\downarrow\downarrow} & k_1^{\downarrow\uparrow} \\ -k_2^{\uparrow\downarrow} & a_{\uparrow}(\omega) & k_1^{\uparrow\downarrow} & k_1^{\uparrow\uparrow} \\ \bar{k}_1^{\downarrow\downarrow} & \bar{k}_1^{\downarrow\uparrow} & b_{\downarrow}(\omega) & -\bar{k}_2^{\downarrow\uparrow} \\ \bar{k}_1^{\uparrow\downarrow} & \bar{k}_1^{\uparrow\uparrow} & -\bar{k}_2^{\uparrow\downarrow} & b_{\uparrow}(\omega) \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} \langle\langle d_{\downarrow}; d_{\downarrow}^{\dagger} \rangle\rangle \\ \langle\langle d_{\uparrow}; d_{\downarrow}^{\dagger} \rangle\rangle \\ \langle\langle d_{\downarrow}^{\dagger}; d_{\downarrow}^{\dagger} \rangle\rangle \\ \langle\langle d_{\uparrow}^{\dagger}; d_{\downarrow}^{\dagger} \rangle\rangle \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \quad (\text{A.174})$$

A.2.1.3 Results for the matrix $G^{\sigma}(\omega)$

The spin-up and down matrix are respectively given by

$$\mathbf{G}^{\uparrow}(\omega) = [\mathbf{A}^{\uparrow}(\omega)]^{-1} \mathbf{R} \quad (\text{A.175})$$

and

$$\mathbf{G}^{\downarrow}(\omega) = [\mathbf{A}^{\downarrow}(\omega)]^{-1} \mathbf{R}, \quad (\text{A.176})$$

where

$$\mathbf{A}^{\uparrow}(\omega) = \begin{bmatrix} a_{\uparrow}(\omega) & -k_2^{\uparrow\downarrow} & k_1^{\uparrow\uparrow} & k_1^{\uparrow\downarrow} \\ -k_2^{\downarrow\uparrow} & a_{\downarrow}(\omega) & k_1^{\downarrow\uparrow} & k_1^{\downarrow\downarrow} \\ \bar{k}_1^{\uparrow\uparrow} & \bar{k}_1^{\uparrow\downarrow} & b_{\uparrow}(\omega) & -\bar{k}_2^{\uparrow\downarrow} \\ \bar{k}_1^{\downarrow\uparrow} & \bar{k}_1^{\downarrow\downarrow} & -\bar{k}_2^{\downarrow\uparrow} & b_{\downarrow}(\omega) \end{bmatrix} \quad (\text{A.177})$$

and

$$\mathbf{A}^\downarrow(\omega) = \begin{bmatrix} a_\downarrow(\omega) & -k_2^{\downarrow\uparrow} & k_1^{\downarrow\downarrow} & k_1^{\downarrow\uparrow} \\ -k_2^{\uparrow\downarrow} & a_\uparrow(\omega) & k_1^{\uparrow\downarrow} & k_1^{\uparrow\uparrow} \\ \bar{k}_1^{\downarrow\downarrow} & \bar{k}_1^{\downarrow\uparrow} & b_\downarrow(\omega) & -\bar{k}_2^{\downarrow\uparrow} \\ \bar{k}_1^{\uparrow\downarrow} & \bar{k}_1^{\uparrow\uparrow} & -\bar{k}_2^{\uparrow\downarrow} & b_\uparrow(\omega) \end{bmatrix}. \quad (\text{A.178})$$

This matrices contain the information of the system.

A.2.2 The density of states for the spinless QDs

In this section we will define the density of states ρ_{LL} , ρ_{RR} , ρ_{RL} and ρ_{LR} . The density of states for this case is defined by:

$$\rho_{QD}(\omega) = -\frac{1}{\pi} \text{Im} [\langle\langle d_\alpha; d_\alpha^\dagger \rangle\rangle]. \quad (\text{A.179})$$

For this, firstly let's do (for the left dot), $\rho_{LL} = -\frac{1}{\pi} \text{Im} [\langle\langle d_L; d_L^\dagger \rangle\rangle]$.

$$\begin{aligned} [d_L, d_L^\dagger]_+ &= [d_L, d_L^\dagger] \\ &= \left[((\cos \phi) d_\uparrow - (\sin \phi) d_\downarrow), \left((\cos \phi) d_\uparrow^\dagger - (\sin \phi) d_\downarrow^\dagger \right) \right] \\ &= (\cos^2 \phi) [d_\uparrow, d_\uparrow^\dagger] - (\cos \phi) (\sin \phi) [d_\uparrow, d_\downarrow^\dagger] - (\sin \phi) (\cos \phi) [d_\downarrow, d_\uparrow^\dagger] + (\sin^2 \phi) [d_\downarrow, d_\downarrow^\dagger] \end{aligned}$$

then, we have the LDOS for the left dot.

$$\begin{aligned} \rho_{LL} &= -\frac{1}{\pi} \text{Im} \left[(\cos^2 \phi) \langle\langle d_\uparrow; d_\uparrow^\dagger \rangle\rangle - (\cos \phi) (\sin \phi) \langle\langle d_\uparrow; d_\downarrow^\dagger \rangle\rangle - (\sin \phi) (\cos \phi) \langle\langle d_\downarrow; d_\uparrow^\dagger \rangle\rangle \right. \\ &\quad \left. + (\sin^2 \phi) \langle\langle d_\downarrow; d_\downarrow^\dagger \rangle\rangle \right] \end{aligned} \quad (\text{A.180})$$

or

$$\begin{aligned}\rho_{LL} &= -\frac{1}{\pi} \text{Im} \left[(\cos \phi)^2 \langle\langle d_\uparrow; d_\uparrow^\dagger \rangle\rangle + (\sin \phi)^2 \langle\langle d_\downarrow; d_\downarrow^\dagger \rangle\rangle \right. \\ &\quad \left. - (\cos \phi) (\sin \phi) \left(\langle\langle d_\uparrow; d_\downarrow^\dagger \rangle\rangle + \langle\langle d_\downarrow; d_\uparrow^\dagger \rangle\rangle \right) \right].\end{aligned}\quad (\text{A.181})$$

Now, for ρ_{RR}

$$\rho_{RR} = -\frac{1}{\pi} \text{Im} \left[\langle\langle d_R; d_R^\dagger \rangle\rangle \right]. \quad (\text{A.182})$$

Analyzing the commutator. Substituting the terms d_R by the terms of transformation, we have

$$\begin{aligned}[d_R, d_R^\dagger]_+ &= \left[((\sin \phi) d_\uparrow + (\cos \phi) d_\downarrow), \left((\sin \phi) d_\uparrow^\dagger + (\cos \phi) d_\downarrow^\dagger \right) \right]_+ \\ &= (\sin^2 \phi) [d_\uparrow, d_\uparrow^\dagger] + (\sin \phi) (\cos \phi) [d_\uparrow, d_\downarrow^\dagger] + (\cos \phi) (\sin \phi) [d_\downarrow, d_\uparrow^\dagger] \\ &\quad + (\cos^2 \phi) [d_\downarrow, d_\downarrow^\dagger]\end{aligned}\quad (\text{A.183})$$

Then, we have the LDOS for the right dot

$$\begin{aligned}\rho_{RR} &= -\frac{1}{\pi} \text{Im} \left[(\sin \phi)^2 \langle\langle d_\uparrow; d_\uparrow^\dagger \rangle\rangle + (\cos \phi)^2 \langle\langle d_\downarrow; d_\downarrow^\dagger \rangle\rangle \right. \\ &\quad \left. + (\sin \phi) (\cos \phi) \left(\langle\langle d_\uparrow; d_\downarrow^\dagger \rangle\rangle + \langle\langle d_\downarrow; d_\uparrow^\dagger \rangle\rangle \right) \right].\end{aligned}\quad (\text{A.184})$$

Now, for the crossed terms.

$$\rho_{RL} = -\frac{1}{\pi} \text{Im} \left[\langle\langle d_R; d_L^\dagger \rangle\rangle \right], \quad (\text{A.185})$$

$$\begin{aligned}[d_R, d_L^\dagger]_+ &= \left[((\sin \phi) d_\uparrow + (\cos \phi) d_\downarrow), \left((\cos \phi) d_\uparrow^\dagger - (\sin \phi) d_\downarrow^\dagger \right) \right]_+ \\ &= (\sin \phi) (\cos \phi) [d_\uparrow, d_\uparrow^\dagger] - (\sin^2 \phi) [d_\uparrow, d_\downarrow^\dagger] + (\cos^2 \phi) [d_\downarrow, d_\uparrow^\dagger] - (\cos \phi) (\sin \phi) [d_\downarrow, d_\downarrow^\dagger]\end{aligned}$$

The LDOS

$$\begin{aligned}\rho_{RL} = & -\frac{1}{\pi} \text{Im} \left[(\cos \phi)^2 \langle\langle d_\downarrow; d_\uparrow^\dagger \rangle\rangle - (\sin \phi)^2 \langle\langle d_\uparrow; d_\downarrow^\dagger \rangle\rangle \right. \\ & \left. + (\sin \phi) (\cos \phi) \left(\langle\langle d_\uparrow; d_\uparrow^\dagger \rangle\rangle - \langle\langle d_\downarrow^\dagger; d_\downarrow \rangle\rangle \right) \right].\end{aligned}\quad (\text{A.186})$$

And now for the last term (crossed).

$$\rho_{LR} = -\frac{1}{\pi} \text{Im} \left[\langle\langle d_L; d_R^\dagger \rangle\rangle \right], \quad (\text{A.187})$$

$$\begin{aligned}[d_L, d_R^\dagger]_+ = & \left[((\cos \phi) d_\uparrow - (\sin \phi) d_\downarrow), \left((\sin \phi) d_\uparrow^\dagger + (\cos \phi) d_\downarrow^\dagger \right) \right]_+ \\ = & (\cos \phi) (\sin \phi) [d_\uparrow, d_\uparrow^\dagger] + (\cos^2 \phi) [d_\uparrow, d_\downarrow^\dagger] - (\sin^2 \phi) [d_\downarrow, d_\uparrow^\dagger] - (\sin \phi) (\cos \phi) [d_\downarrow, d_\downarrow^\dagger]\end{aligned}$$

Then

$$\begin{aligned}\rho_{LR} = & -\frac{1}{\pi} \text{Im} \left[(\cos \phi)^2 \langle\langle d_\uparrow; d_\downarrow^\dagger \rangle\rangle - (\sin \phi)^2 \langle\langle d_\downarrow; d_\uparrow^\dagger \rangle\rangle + (\cos \phi) (\sin \phi) \langle\langle d_\uparrow; d_\uparrow^\dagger \rangle\rangle \right. \\ & \left. - (\sin \phi) (\cos \phi) \langle\langle d_\downarrow; d_\downarrow^\dagger \rangle\rangle \right]\end{aligned}\quad (\text{A.188})$$

or

$$\begin{aligned}\rho_{LR} = & -\frac{1}{\pi} \text{Im} \left[(\cos \phi)^2 \langle\langle d_\uparrow; d_\downarrow^\dagger \rangle\rangle - (\sin \phi)^2 \langle\langle d_\downarrow; d_\uparrow^\dagger \rangle\rangle \right. \\ & \left. + (\cos \phi) (\sin \phi) \left(\langle\langle d_\uparrow; d_\uparrow^\dagger \rangle\rangle - \langle\langle d_\downarrow; d_\downarrow^\dagger \rangle\rangle \right) \right]\end{aligned}\quad (\text{A.189})$$

Then, we have the four equations for the density of state as presented below

$$\rho_{LL} = -\frac{1}{\pi} \text{Im} \left[(\cos \phi)^2 \langle\langle d_\uparrow; d_\uparrow^\dagger \rangle\rangle + (\sin \phi)^2 \langle\langle d_\downarrow; d_\downarrow^\dagger \rangle\rangle - (\cos \phi) (\sin \phi) \left(\langle\langle d_\uparrow; d_\downarrow^\dagger \rangle\rangle + \langle\langle d_\downarrow; d_\uparrow^\dagger \rangle\rangle \right) \right], \quad (\text{A.190})$$

$$\rho_{RR} = -\frac{1}{\pi} \text{Im} \left[(\cos \phi)^2 \langle\langle d_\downarrow; d_\downarrow^\dagger \rangle\rangle + (\sin \phi)^2 \langle\langle d_\uparrow; d_\uparrow^\dagger \rangle\rangle + (\sin \phi) (\cos \phi) \left(\langle\langle d_\uparrow; d_\downarrow^\dagger \rangle\rangle + \langle\langle d_\downarrow; d_\uparrow^\dagger \rangle\rangle \right) \right], \quad (\text{A.191})$$

$$\rho_{RL} = -\frac{1}{\pi} \text{Im} \left[(\cos \phi)^2 \langle\langle d_\downarrow; d_\uparrow^\dagger \rangle\rangle - (\sin \phi)^2 \langle\langle d_\uparrow; d_\downarrow^\dagger \rangle\rangle + (\sin \phi) (\cos \phi) \left(\langle\langle d_\uparrow; d_\uparrow^\dagger \rangle\rangle - \langle\langle d_\downarrow; d_\downarrow^\dagger \rangle\rangle \right) \right], \quad (\text{A.192})$$

$$\rho_{LR} = -\frac{1}{\pi} \text{Im} \left[(\cos \phi)^2 \langle\langle d_\uparrow; d_\downarrow^\dagger \rangle\rangle - (\sin \phi)^2 \langle\langle d_\downarrow; d_\uparrow^\dagger \rangle\rangle + (\cos \phi) (\sin \phi) \left(\langle\langle d_\uparrow; d_\uparrow^\dagger \rangle\rangle - \langle\langle d_\downarrow; d_\downarrow^\dagger \rangle\rangle \right) \right]. \quad (\text{A.193})$$