



UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO NORTE
CENTRO DE CIÊNCIAS EXATAS E DA TERRA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA

Caio Vítor de S. Soares

**Visons em Líquidos de Spin de Kitaev com
Superfícies de Fermi de Majoranas**

Natal - RN

Abril de 2025

Caio Vítor de S. Soares

Visons em Líquidos de Spin de Kitaev com Superfícies de Fermi de Majoranas

Dissertação de mestrado apresentada ao Departamento de Física Teórica e Experimental do Centro de Ciências Exatas e da Terra da Universidade Federal do Rio Grande do Norte como requisito parcial para a obtenção do grau de Mestre em Física.

Orientador:

Prof. Dr. Rodrigo Gonçalves Pereira

Universidade Federal do Rio Grande do Norte - UFRN
Departamento de Física Teórica e Experimental - DFTE

Natal - RN

Novembro de 2024

Universidade Federal do Rio Grande do Norte - UFRN
Sistema de Bibliotecas - SISBI
Catalogação de Publicação na Fonte. UFRN - Biblioteca Central Zila Mamede

Soares, Caio Vitor de Souza.

Visons em Líquidos de Spin de Kitaev com Superfícies de Fermi de Majoranas / Caio Vitor de Souza Soares. - 2025.
77f.: il.

Dissertação (mestrado) - Universidade Federal do Rio Grande do Norte, Centro de Ciências Exatas e da Terra, Programa de Pós-Graduação em Física, Natal, 2025.

Orientação: Prof. Dr. Rodrigo Gonçalves Pereira.

1. Modelo de Kitaev - Dissertação. 2. Funções de Green - Dissertação. 3. Espalhamento na rede - Dissertação. 4. Rede Kagome - Dissertação. 5. Superfície de Fermi - Dissertação. 6. Visons - Dissertação. I. Pereira, Rodrigo Gonçalves. II. Título.

RN/UF/BCZM

CDU 53

Dissertação de Mestrado em Física intitulada *Visões em L quidos de Spin de Kitaev com Superfícies de Fermi de Majoranas* apresentada por Caio Vitor de Souza Soares a e aceita pelo Departamento de Física da Universidade Federal do Rio Grande do Norte, sendo aprovada por todos os membros da banca examinadora abaixo especificada:

Prof. Dr. Rodrigo Gonçalves Pereira

Universidade Federal do Rio Grande do Norte - UFRN

Departamento de Física - DF

(Presidente/Orientador)

Prof. Dr. Eric de Castro e Andrade

Universidade de São Paulo - USP

Instituto de Física - IF

(Examinador Externo)

Profa. Dra. Thereza Cristina de Lacerda Paiva

Universidade Federal do Rio de Janeiro - UFRJ

Instituto de Física - IF

(Examinadora Externa)

Natal - RN

Abril de 2025

"Happiness can be found, even in the darkest of times, if one only remembers to turn on the light." | Albus Dumbledore

Agradecimentos

Primeiramente, gostaria de agradecer a Deus pela oportunidade de fazer uma pós-graduação e por me dar forças para construir minha carreira acadêmica. Agradeço-o também por colocar em meu caminho as pessoas que contribuíram para esta enorme realização pessoal.

gostaria de agradecer aos meus pais, Gilberto e Eliane, ao meu irmão, Vinicius, a Elza e Ana Kamily, pelo apoio ao meu sonho de me tornar físico. Se aprendi a lutar pelo meu espaço, a ser respeitoso e *grato*, certamente minha família foi fundamental nisso.

A Rodrigo, meu orientador e maior inspiração como físico, sou muito grato pelos três anos de muitos ensinamentos, pelo cuidado e atenção e por me fazer sempre buscar a excelência. Tenho sorte de ter tido um orientador que enxerga a física da mesma forma que eu: com muito entusiasmo e simplicidade.

Quero agradecer a Leticia por me acompanhar nos altos e baixos das nossas jornadas acadêmicas e por ser a pessoa que sempre enxergou o melhor em mim. Isto, de fato, foi fundamental para que eu me tornasse uma pessoa melhor. Torço muito também pelo seu sucesso pessoal e realizações acadêmicas.

Sou muito feliz por ter tido colegas de grupo que me inspiraram bastante nesta jornada. Agradeço muito a Fabrizio, Rafael, Lu, Victor, Flávio, Hernan, Weslei e Tim. Desejo muito sucesso a todos e espero poder, muito em breve, retribuir o apoio que me deram.

Devo muito aos amigos que estiveram ao meu lado incondicionalmente, mesmo estando afastados espacialmente. A Paulo, Luigy e Lorenza, sou muito grato por ouvirem minhas ideias e pensamentos e concordarem que talvez não fossem assim tão absurdos. Agradeço também aos amigos que tenho a sorte de ter por perto há quase 15 anos, mas que foram fundamentais especialmente nestes últimos: André, Leo e Raul. Sou grato também aos amigos e maiores inspirações pessoais: Afonso, Oscar, Davi, Niedson, Flávio

e Bruno. Contemplo aqui também os colegas da EMUFRN por me ajudarem a lembrar o quão excepcional é ser um físico.

Devo também agradecer à curiosidade e inquietude de Caio de 2008, a Caio de 2017 por sonhar em fazer o bacharelado em física, a Caio de 2018 por acreditar neste sonho e Caio de 2019 a 2022 por desfrutá-lo ao máximo. Sou grato a Caio de 2023 pela ambição e a Caio de 2024 pela resiliência.

Faço agradecimentos especiais ao amigo Gabriel Wendell pela amizade, companheirismo e pelo poder computacional para gerar os dados plotados na figura 4.10 deste texto, ao professor Álvaro Ferraz, pelos cinco semestres de convivência em disciplinas que me ajudaram a chegar no mais alto nível e também à minha psicóloga, Pâmela Rabelo, por fazer seu trabalho de forma excepcional. Agradeço, Por fim, o apoio financeiro fornecido pela CAPES, sob a bolsa de número 88887.827350/2023-00.

Resumo

O modelo de Kitaev na rede honeycomb apresenta um estado fundamental com líquido de spin e é exatamente solúvel. Neste modelo existem excitações de férmions de Majorana, com ou sem gap, e excitações dos vórtices de fluxos Z_2 , também chamados de visons. Estas são excitações com gap. A energia para criar um par de visons sempre foi calculada numericamente com redes de tamanho finito, mas recentemente, uma expressão analítica válida no limite termodinâmico foi derivada utilizando métodos de funções de Green. Ter um método analítico é interessante pois, em regimes de parâmetros em que a dispersão de Majoranas é sem gap, os efeitos de tamanho finito são mais fortes, podendo prejudicar extrapolações dos valores numéricos do gap de visons para o limite termodinâmico. Neste trabalho, comparamos os dois métodos para calcular o gap de visons no modelo de Kitaev e os generalizamos para um outro modelo de spins $\frac{3}{2}$ na rede kagome, em que férmions de Majorana formam uma superfície de Fermi. Mostramos a existência de um regime em que o gap diminui com o aumento da superfície de Fermi.

Palavras-chave: Modelo de Kitaev, Funções de Green, Espalhamento na rede, Rede Kagome, Superfície de Fermi, Visions.

Abstract

The Kitaev honeycomb model is an exactly solvable model that has a spin liquid ground state. It can have gapped or gapless excitations from Majorana fermions and vortices of a Z_2 gauge field, also known as visons, which are always gapped. The energy to create a pair of visons has always been calculated numerically in finite-size lattices, but recently, an analytical expression valid in the thermodynamic limit was derived using Green's function methods. An analytical method might be interesting for, when the Majoranas dispersion is gapless, the finite-size effects are stronger and might spoil extrapolations of the numerical vison gaps to the thermodynamic limit. In this work, we compare both methods to calculate the vison gap in the Kitaev model and generalize them to another model of spins $\frac{3}{2}$ in the kagome lattice, in which Majorana fermions form a Fermi surface. We find a regime in which the vison gap decreases with the size of the Fermi surface.

Keywords: Kitaev model, Green's functions, Lattice scattering, Kagome lattice, Fermi surface, Visons.

Lista de Figuras

1.1	Spin frustrado na rede triangular.	2
1.2	Construção de emparelhamentos de spins em singletos na rede triangular. O estado RVB é uma superposição de várias dessas construções.	2
2.1	Rede triangular e sua rede recíproca. Os vetores das duas redes são mostrados. As possíveis escolhas da zona de Brillouin são mostradas em rosa. Os pontos de alta simetria Γ são destacados.	9
3.1	Vetores primitivos da rede honeycomb e célula unitária, destacada em azul.	19
3.2	A rede Honeycomb com os rótulos de cada um dos três tipos de link. . . .	19
3.3	Uma plaqueta na rede honeycomb, com os seis sítios para os quais teremos matrizes de Pauli na definição de W_p	20
3.4	Dispersão de Majoranas para o caso isotópico no modelo de Kitaev. As bandas se tocam nos vértices da zona de Brillouin.	26
3.5	Recorte da rede honeycomb com um par de vórtices adjacentes. O link em vermelho é o único $u_{ij} = 1$ em toda a rede.	27
3.6	(a): Energia do estado fundamental por sítio em função do inverso de μ . Os pontos vermelhos são valores para $\mu \bmod 3 = 0$ e a curva tracejada é uma extrapolação. (b): $\langle v^{(n)} \rangle$, $\langle v^{(p)} \rangle$ e $\langle v^{(u)} \rangle$ em função do tamanho do sistema.	31
3.7	Gap para criar um par de vórtices adjacentes em função do tamanho do sistema nos regimes de parâmetros isotópico e anisotópico.	31
3.8	Plot de contorno das dispersões para os casos isotópico e anisotópico. Neste último, o deslocamento dos cones de Dirac é mostrado.	32
3.9	Gap de visões em função do tamanho da rede para um regime com gap no modelo de Kitaev: $f(J_x = 2; 1; J_y = 1; 0; J_z = 1; 0)g$	32
3.10	Elementos de matriz de $g(z)$ para $f(J_x = 1; 0; J_y = 1; 0; J_z = 1; 0)g$	35

3.11	Elementos de matriz de $g(z)$ para $f_{J_x} = 1; 8; J_y = 1; 3; J_z = 1; 0$.	36
3.12	Phase shift obtidos nos casos isotópico e anisotópico.	36
4.1	A rede kagome.	38
4.2	As quatro configurações de fluxo independentes na rede kagome.	41
4.3	Comparação entre as energias das quatro configurações de fluxo. Usamos o método numérico da subseção 3.1, com $L = 15$. Aqui, $J_{\uparrow r} = J_{\downarrow r}^0 = J$.	41
4.4	As três subredes A, B, e C, os vetores primitivos da rede kagome e_1 e e_2 e suas combinações lineares r_1, r_2 e r_3 .	42
4.5	Os rótulos das seis diferentes ligações na rede kagome.	42
4.6	Dispersão dos Majoranas obtida com as constantes de acoplamento $J_1 = 1; 0; J_r = 0; 3; J^0 = 0; 8; J_r^0 = 0; 5; J_5 = 1; 4$. A configuração de fluxo usada foi $\bar{2}; \bar{2}$. (a): Corte das bandas de energia para $k_y = 0$. (b): Superfície de Fermi.	43
4.7	Criação de um par de vórtices entre $(\uparrow;)$ na configuração $\bar{2}; \bar{2}$. O link vermelho troca de sinal, alterando o fluxo nas duas plaquetas destacadas em cinza.	44
4.8	Bandas ϵ_3 e ϵ_4 na BZ para dois regimes de parâmetros. Com $J_5 = 0; 865$, vemos uma dispersão semelhante a do regime isotópico do modelo de Kitaev, com as bandas se tocando nos 6 vértices BZ na energia de Fermi. Com $J_5 = 0; 500$, as bandas se deslocam e cruzam a energia de Fermi em 3 regiões.	46
4.9	Tamanho da superfície de Fermi (quantificada pelo k_F) em função de J_5 . Os ajustes lineares são mostrados.	46
4.10	Gap para criar par de vórtices adjacentes em função do tamanho do sistema para diferentes valores de J_5 . Os pontos vermelhos são os em que J_5 é múltiplo de 3, e os azuis são para os demais valores de J_5 .	48
4.11	Partes real e imaginária do elemento g_{22} da função de Green local (4.1).	51
4.12	Phase shift para os seis regimes de parâmetros analisados. O deslocamento das singularidades na função de Green quando J_5 diminui faz aparecerem um pico e um vale entre $J_5 = 0; 5$ e $J_5 = 1; 5$.	51

4.13 (a): Gap do par visons em funcao de k_F . (a): gap do par de visons em funcao de J_5 nos regimes estudados. A ocorrência de um maximo em $J_5 = 0;865$ ou $k_F = 0$ e mostrada.	52
4.14 Valores numericos do gap do par de visons em funcao do tamanho do sistema para os pares $(\lambda; \mu)$ e $(\lambda; r)$	53
4.15 Phase shifts obtidos no calculo do gap para pares de plaquetas diferentes.	53
A.1 corte das Bandas de energia no modelo CYF com $\mu = 0$, obtidas variando J_5 com os demais acoplamentos sendo $(\lambda; 0; 0; 5; 1; 0; 0; 5g)$	62
A.2 corte das Bandas de energia no modelo CYF com $\mu = 0$, obtidas variando J_5 com os demais acoplamentos sendo $(\lambda; 0; 0; 5; 1; 0; 0; 5g)$	63
A.3 Superficies de Fermi obtidas variando J_5 com os demais acoplamentos sendo $(\lambda; 1; 0; 0; 5; 1; 0; 0; 5g)$	64

Sumario

Agradecimentos	ii
Resumo	ii
Abstract	v
Lista de Figuras	vi
1 Introducao	1
2 Sistemas Fermiônicos	6
2.1 Modelos de Rede	6
2.2 Funções de Green	10
2.3 Espalhamento por um potencial local	13
2.3.1 Phase Shifts	15
3 O Modelo de Kitaev	18
3.1 O modelo	18
3.2 Dispersão de Majoranas	23
3.3 Visions	26
3.3.1 Diagonalização no espaço real	27
3.3.2 Resultados numericos	29
3.4 Calculando gap dos visons analiticamente	31
3.4.1 Resultados analiticos	34
4 Liquido de Spin de Kitaev com Superfície de Fermi	37
4.1 O modelo Chua-Yao-Fiette (CYF)	37
4.1.1 Dispersão de Majoranas e superfície de Fermi	41

	x
4.2	Visões no modelo CYF 44
4.3	Discussão de Resultados 44
4.3.1	Resultados numéricos 46
4.3.2	Resultados analíticos 49
4.3.3	Visões entre diferentes plaquetas 51
5	Conclusões e Perspectivas 54
APÊNDICES 61	
A	Catálogo de Superfícies de Fermi 62

Captulo 1

Introducao

A teoria de Landau das fases da matéria [1] e, há muito tempo, um paradigma na física da matéria condensada. Esta teoria entende que uma fase pode ser caracterizada pela presença ou ausência de simetrias. Uma transição de fase ocorre sempre que há uma quebra de simetria. Um exemplo simples é a transição líquido-sólido: líquidos têm simetria completa de translação e rotação, enquanto sólidos quebram a simetria translacional quando se ordenam em uma estrutura cristalina. O paradigma de Landau prevê que um sistema com uma determinada simetria pode ter um estado fundamental que espontaneamente quebra esta simetria, por exemplo uma fase ferromagnética em um modelo de spins interagentes (Ising, Heisenberg). Uma quebra espontânea de simetria deve ser acompanhada de um parâmetro de ordem que caracteriza a fase. Sendo assim, uma fase ferromagnética pode ser diferenciada da paramagnética pelo valor esperado da magnetização local, que só será nito no primeiro caso.

Entretanto, a atenção da comunidade de matéria condensada moderna se voltou para modelos com propriedades não explicadas pelos conceitos de quebra espontânea de simetria e parâmetro de ordem local. O modelo de Heisenberg antiferromagnético na rede quadrada em temperatura $T = 0$ tem estado fundamental semiclassico de Néel [2], mas o mesmo modelo na rede triangular (ou qualquer outra rede não bipartida) deve apresentar frustração: quando duas interações entre spins não conseguem ser satisfeitas simultaneamente. Em uma plaqueta triangular, se dois spins conseguirem se alinhar antiparalelamente, um terceiro teoricamente pode assumir qualquer direção. Veja a figura 1:1, retirada de [3].

Na tentativa de prever o estado fundamental do modelo de Heisenberg antifer-

Figura 1.1: Spin frustrado na rede triangular.

romagnético da rede triangular, P. Anderson propôs o estado RVB (Resonant Valence Bond) [4], uma superposição de vários possíveis emparelhamentos de spins em singletos, como o da figura 1.2, retirada de [3]. Este deve ter magnetização local nula, apesar do alto grau de correlação entre os spins. Os primeiros estados excitados acima de um estado fundamental de spins $\frac{1}{2}$ ordenados pode ser obtida desemparelhando um único par de spins. No estado de Néel, isto resulta em excitações de spin 1, os magnons, previstos pela teoria de ondas de spin linear. A ausência de ordem de longo alcance no estado RVB faz com que o mesmo procedimento de origem a pares de excitações de $\frac{1}{2}$ spin chamados spinons [5], um exemplo de excitações fracionárias.

Figura 1.2: Conguracao de emparelhamentos de spins em singletos na rede triangular. O estado RVB é uma superposição de várias dessas congurações.

Apesar de, no fim das contas, o estado RVB não ter se estabelecido como estado fundamental do modelo de Heisenberg antiferromagnético na rede triangular [6], ele é entendido como o protótipo de um líquido quântico de spin (QSL) [3, 7], o principal objeto de estudo desta dissertação. Uma primeira definição diz que QSLs são sistemas de spins altamente correlacionados, mas com estado fundamental sem ordem de longo alcance mesmo em temperatura $T = 0$. Estas fases podem ocorrer em sistemas com redes que permitem frustração dos spins. Os estados fundamentais de QSLs são altamente

emaranhados, ou seja, não podem ser escritos ou representados por um estado produto de suas partes. Isto implica em uma das principais propriedades dos QSLs, de suporte a excitações não locais: excitações que não podem ser criadas isoladamente por operadores locais. Estas são ditas conexas se sua energia não muda quando as separamos espacialmente. O código torico é um prototipo de QSL com estados fundamentais altamente emaranhados, cujas excitações, as partículas, são não locais e conexas. Um outro exemplo de sistema (mas não de QSL) que suporta excitações não locais é o modelo Ising na cadeia fechada [8]: pares de paredes de domínio têm um custo energético para serem criadas, mas não custam energia para se deslocarem. Uma outra propriedade dos QSLs é a emergência de uma estrutura de calibre e de excitações fracionárias, como os spinons no estado RVB. Os QSLs podem ser classificados quanto ao grupo de simetria da estrutura de calibre emergente, sendo os principais $SU(2)$, $U(1)$ e Z_2 . Um tipo importante de excitações não locais de líquidos de spin são os vortices do campo de calibre do QSL. Os vortices do líquido de spin Z_2 são chamados de visons e são sempre excitações gap [9].

Um modelo paradigmático com estado fundamental de líquido de spin em $D=2$ é o modelo de Kitaev da rede honeycomb [10, 11]. Este é um modelo com interações Ising anisotópicas entre spins $\frac{1}{2}$ vizinhos que foi inicialmente proposto como um modelo importante no contexto de computação quântica topológica, mas que também tem relevância experimental com isolantes de Mott com forte acoplamento spin-órbita que pode realizar as interações anisotópicas entre spins $\frac{1}{2}$ efetivos [12]. Alguns dos principais candidatos são óxidos de I^{4+} [13] e o α - RuCl_3 [14]. O modelo de Kitaev é um QSL em que os graus de liberdade de spin se fracionizam em férmions de Majorana, como em [15], em um plano de fundo de campos de calibre Z_2 estáticos. O espectro de Majoranas pode ou não ter gap, sendo o caso isotópico sem campo magnético um caso de dispersão gap. A atuação com um operador de spin (ou par de Majoranas) em um sítio cria um par de visons adjacentes no plano de fundo de Z_2 . O gap para criar diferentes configurações de visons foi calculado em [10]. No caso isotópico, com todos os acoplamentos iguais a J , foi encontrada uma energia de $v = 0.267J$ para criar vortices adjacentes, utilizando diagonalização numérica do Hamiltoniano com redes de tamanho finito. Apesar da energia do estado fundamental deste modelo poder ser encontrada exatamente no limite termodinâmico, a energia das configurações com vortices, por quebrarem simetria

de translação, aparentavam poder ser calculadas apenas em redes finitas.

Recentemente foi proposto em [16] um método empregando funções de Green para calcular o gap de vícios adjacentes no modelo de Kitaev. Este método consiste em interpretar a criação de um par de vícios como a introdução de um potencial de espalhamento de curto alcance. Um valor no limite termodinâmico de $\nu = 0.263313(6)$ para o caso isotópico foi encontrado. No modelo de Kitaev, quando a dispersão de Majoranas tem gap, a energia para criar vícios converge rapidamente com o tamanho da rede, mas quando a dispersão não tem gap, existem efeitos de tamanho finito que nos obrigam a olhar para redes bem maiores. Sendo assim, na fase sem gap o método analítico de [16] é uma alternativa melhor em relação ao método numérico. Com uma ferramenta assim, o interesse em modelos de spin com fracionalização em Majoranas com dispersões sem gap ressurgiu, uma vez que o método em [16] é possivelmente generalizável.

Uma possibilidade de dispersão de Majoranas surge se houver uma superfície de Fermi. Estes podem ser interessantes pois, apesar de líquidos de spin serem isolantes de carga, grandezas como calor específico e condutividade térmica respeitam leis de potência na temperatura consistentes com a teoria de líquido de Fermi [17]. Em [18, 19] é apresentado um modelo de spin $\frac{3}{2}$ na rede kagome em que pode haver uma superfície de Fermi, sendo um bom candidato para estudarmos as propriedades de vícios. Outros modelos de QSL com superfícies de Fermi são [20, 21, 22].

Este trabalho seguirá a seguinte estrutura: No capítulo 2 iremos introduzir as ferramentas analíticas que inspiraram o método desenvolvido em [16]. O capítulo 3 vai apresentar em detalhes a solução e propriedades do modelo de Kitaev nas seções 3.2. Na seção 3.3 vamos estudar o método numérico para diagonalização de um Hamiltoniano no espaço real e calcular o gap de vícios para dois regimes de parâmetros do modelo: o isotópico e um outro anisotópico. Na seção 3.4 vamos usar o método analítico para encontrar o valor dos gaps nesses dois mesmos regimes e comparar com os resultados numéricos. O capítulo 4 segue a mesma estrutura do capítulo anterior. Na seção 4.1 vai apresentar o modelo de Chua-Yao-Fiette [18], mostrando o mapeamento de spins em férmions de Majorana, como são as configurações de fluxo que podem dar o estado fundamental e o quão rica pode ser a dispersão de Majoranas. Nas seções 4.2 e 4.3 falar sobre vícios neste modelo. Exploraremos uma faixa de regimes em que há uma superfície de Fermi com tamanho que pode variar apenas com um dos parâmetros do

Hamiltoniano. Aplicaremos o método de diagonalização numérica na rede de tamanho finito e generalizaremos o método de [16] para calcular o valor gap de visons adjacentes no limite termodinâmico. Vamos estudar como este gap deve variar com o tamanho da superfície de Fermi. Por fim, o capítulo 5 vai falar das conclusões sobre o trabalho, dificuldades e possíveis perspectivas que este projeto deixa.

Capítulo 2

Sistemas Fermiônicos

Ao longo deste trabalho, estudaremos modelos de spins em redes bidimensionais, cujas soluções são mapeamentos para modelos de férmions livres. Portanto, neste capítulo vamos introduzir algumas técnicas analíticas envolvidas na descrição de sistemas fermiônicos e outras técnicas de mecânica quântica. Um sistema metálico é o principal sistema físico que pode ser entendido por um modelo de férmions livres. Começaremos estudando modelos de férmions numa rede, focando em como são os níveis (bandas) de energia e sua ocupação. Depois, olhando para um sistema fermiônico mais geral (partículas livres numa caixa quadrada), introduziremos o formalismo das funções de Green. Por fim, vamos fazer um resumo de importantes resultados de teoria de espalhamento para mecânica quântica, com o objetivo de calcular a mudança da energia do estado fundamental de um sistema de férmions sob a presença de potencial espalhador local, em termos da função de Green livre.

2.1 Modelos de Rede

As propriedades eletrônicas de sólidos cristalinos metálicos podem ser entendidas por um modelo em que os elétrons de condução são livres para vagar, sobre um plano de fundo de íons positivos [23, 24]. Estes íons devem estar distribuídos espacialmente em uma forma organizada e periódica, que geralmente podemos descrever matematicamente como uma rede. Uma rede de Bravais é um tipo de rede para o qual cada ponto deve ser indistinguível, isto é, observar o mesmo ambiente ao seu redor. A propriedade fundamental que estas têm é a de simetria de translação: em uma rede de Bravais d -dimensionais,

podemos escrever vetores \mathbf{a}_i , cada um conectando um ponto \mathbf{a} de seus primeiros vizinhos, tal que qualquer translaco

$$\mathbf{A}_d = \sum_{i=1}^{\chi^d} m_i \mathbf{a}_i \quad (2.1)$$

leva a um outro ponto indistinguvel do primeiro. Em duas dimenses, existem apenas 5 redes de Bravais, que se distinguem pelo grupo associado as suas simetrias de rotaco e pela diferena relativa entre as direes dos vetores primitivos. Podem-se construir redes mais complexas a partir de uma rede de Bravais, por exemplo, sobrepondo duas ou mais redes de Bravais equivalentes. Dizemos que os pontos que pertencem a uma das redes de Bravais sobrepostas formam uma subrede.

 chamada clula unitria uma regio da rede desejavelmente pequena, que pode gerar a rede inteira por translaces \mathbf{A}_d . A clula unitria primitiva  uma que envolve em seu volume apenas um ponto da rede de Bravais. Uma escolha interessante de clula primitiva  a clula de Wigner-Seitz, que  centrada em um ponto da rede e  delimitada por planos que interceptam ao meio as distncias do ponto a cada um de seus vizinhos. A clula de Wigner-Seitz tem a convenincia de carregar a mesma simetria do grupo de rotaco da rede. A clula unitria primitiva de uma rede com uma ou mais subredes deve, portanto, conter um stio de cada subrede, mas na prtica ainda envolve apenas um stio da rede de Bravais original.

Uma formulaco em mecnica quntica das possveis energias e provveis posices dos eltrons num metal pode ser obtida modelando a rede de ons como um potencial atrativo e perdico $V(\mathbf{r})$, tal que

$$V(\mathbf{r} + \mathbf{A}_d) = V(\mathbf{r}) : \quad (2.2)$$

Se considerarmos que os eltrons so independentes e no interagem entre si, e o nico potencial que estes experienciam. Desta forma,  possvel mostrar que as soluces da equaco de Schrdinger

$$\frac{1}{2m} \nabla^2 \psi(\mathbf{r}) + V(\mathbf{r}) \psi(\mathbf{r}) = E(\mathbf{k}) \psi(\mathbf{r}) \quad (2.3)$$

para as funes de onda de um eltron so da forma

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}) u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}); \quad (2.4)$$

com $u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r} + \mathbf{A}_d) = u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$. Este importante resultado é chamado teorema de Bloch.

Do ponto de vista matemático, a definição das redes de Bravais exige que estas tenham extensão infinita. Entretanto, obviamente, sólidos cristalinos são corpos finitos. Para lidar com isto, usamos condições periódicas de contorno, entendendo que, se usarmos redes suficientemente grandes, as propriedades físicas dos sólidos serão razoavelmente bem descritas. No caso de um material em $d = 2$ ¹, se tivermos L_i células unitárias nas direções dos vetores \mathbf{a}_i , condições periódicas de contorno são contempladas se

$$\mathbf{A}_2 + n_1 L_1 \mathbf{a}_1 + n_2 L_2 \mathbf{a}_2 = \mathbf{A}_2; \quad (2.5)$$

em que n_1 e n_2 são inteiros. Dizemos neste caso que a rede está como disposta na superfície de um toro. Os valores possíveis de \mathbf{k} são

$$\mathbf{k} = \frac{m_1}{L_1} \mathbf{b}_1 + \frac{m_2}{L_2} \mathbf{b}_2; \quad (2.6)$$

em que os vetores \mathbf{b}_i , obtidos de $\mathbf{a}_i \cdot \mathbf{b}_j = 2\pi \delta_{ij}$, formam no espaço recíproco também uma rede de Bravais, com pontos obtidos por translações análogas a (21). Existem então $N = L_1 L_2$ valores possíveis de \mathbf{k} , todos dentro da célula unitária primitiva da rede recíproca, que recebe o nome de zona de Brillouin. É sempre suficiente contarmos os modos em uma única zona, e portanto definimos como primeira zona de Brillouin (BZ) a célula de Wigner-Seitz da rede recíproca. Na figura 2 há um exemplo da rede de Bravais em $d = 2$ associada ao grupo de simetria C_6 , a rede triangular, bem como sua rede recíproca e possíveis escolhas da zona de Brillouin [24]. Veja que a rede recíproca é também uma rede triangular.

Podemos entender a função de onda $\psi(\mathbf{k} + \mathbf{B}_2)$, com $\mathbf{k} \in \text{BZ}$, como outra solução da equação de Schrödinger (2) para o mesmo \mathbf{k} , mas certamente com um autovalor de energia diferente. O conjunto dos níveis de energia $E_{\mathbf{k}}$ (\mathbf{k}) são dispersões que dão a estrutura de bandas do material, sendo ordenadas da menor para a maior energia, para cada valor de \mathbf{k} . A quantidade de modos possíveis dentro do BZ cresce com o tamanho da

¹Os modelos de rede que trabalharemos são em duas dimensões, por isso a decisão de especificar a dimensão aqui.

(a) Rede real

(b) Rede recproca

(c) Primeira zona de Brillouin

Figura 2.1: Rede triangular e sua rede recproca. Os vetores das duas redes são mostrados. As possíveis escolhas da zona de Brillouin são mostradas em rosa. Os pontos de alta simetria da BZ são destacados.

rede, entretanto, na mesma proporção, cresce também a quantidade de elétrons que podem ocupar estes modos, de forma que a fração de estados ocupados na zona de Brillouin não depende do tamanho da rede, mas da quantidade de elétrons por sítio ou célula unitária primitiva. É sempre razoável então entender $\epsilon_j(\mathbf{k})$ como funções contínuas de \mathbf{k} , mesmo que esses a princípio fossem discretos, já que no limite termodinâmico, $L_i \gg 1$; δ_i , \mathbf{k} é contínuo.

Com respeito a sua estatística em sistemas quânticos de várias partículas, elétrons são férmions. Estes portanto obedecem ao princípio de exclusão de Pauli, que obriga-os a sempre ocupar estados com números quânticos diferentes, que aqui se entende de banda j ². Dos N estados disponíveis em cada banda, a probabilidade de um com momento na banda de índice j estar ocupado na temperatura T é determinada pela distribuição de Fermi-Dirac

²Vamos ignorar o grau de liberdade de spin, já que os modelos fermiônicos que surgirão nos capítulos seguintes são todos de férmions sem spin.

$$n_F(E_j(k)) = \frac{1}{\exp\left(\frac{E_j(k) - \mu}{k_B T}\right) + 1}; \quad (2.7)$$

onde μ é o potencial químico e k_B a constante de Boltzmann. No limite $T \rightarrow 0$, temos $\mu = E_F$ e (2.7) se reduz a $\theta(E_j(k) - E_F)$, o que deixa explícita a interpretação física de E_F como sendo a energia que separa os estados ocupados dos vazios. A superfície de Fermi é definida por

$$E(k) = E_F \quad (2.8)$$

e chamada superfície de Fermi, que ilustra na estrutura de bandas onde estão os níveis ocupados.

2.2 Funções de Green

Nesta seção vamos introduzir o formalismo de funções de Green em mecânica quântica [25] e como podemos usá-las para extrair informações sobre nosso sistema físico. Olhando para um sistema de muitos elétrons mais geral (mas ainda sem spin), de Hamiltoniano

$$H = \sum_i \left(\frac{p_i^2}{2m} + V(r_i) \right) = H_0 + \sum_i V(r_i); \quad (2.9)$$

em que $V(r_i)$ é o potencial a que cada elétron está submetido. Imaginando, para fins de normalização, que os elétrons se encontram confinados a uma caixa cúbica de lado L , as soluções de H_0 para as funções de onda de muitos elétrons são

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = L^{-3/2} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}}; \quad (2.10)$$

em que os \mathbf{k} 's assumem valores discretos. É conveniente introduzir o formalismo de segunda quantização [26] para lidar com sistemas de muitas partículas. Os operadores de criação e destruição de férmions com vetor de onda são $a_{\mathbf{k}}^\dagger$ e $a_{\mathbf{k}}$, e respeitam a álgebra

$$\{a_{\mathbf{k}}, a_{\mathbf{k}'}^\dagger\} = \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}; \quad (2.11)$$

$$[a_{\mathbf{k}}, a_{\mathbf{k}'}] = [a_{\mathbf{k}}^\dagger, a_{\mathbf{k}'}^\dagger] = 0; \quad (2.12)$$

Operadores diagonais na representação de momento podem ser escritos em termos do operador número $n_k = a_k^\dagger a_k$ que, para respeitar o princípio de exclusão, devem ter autovalores 0 ou 1. Esses operadores atuam em vetores de estado com número de partículas variável, chamado espaço de Fock. Um estado de muitas partículas pode ser criado a partir do estado de vácuo $|0\rangle$, definido por $a_k |0\rangle = 0$; $\forall k$; por sucessivas aplicações de operadores de criação para cada partícula:

$$|k_1; k_2; \dots; k_r\rangle = a_{k_1}^\dagger a_{k_2}^\dagger \dots a_{k_r}^\dagger |0\rangle \quad (2.13)$$

Nosso Hamiltoniano em termos de operadores fermiônicos é

$$H = \sum_k E_0(k) n_k + \sum_{k,q} V(q) a_{k+q}^\dagger a_k \quad (2.14)$$

com

$$E_0(k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \quad (2.15)$$

$$V(q) = \frac{1}{L^3} \int V(r) e^{iqr} d^3r \quad (2.16)$$

Para calcular valores esperados de observáveis, teremos que calcular termos da forma $\langle 0 | a_k^\dagger a_k^n | 0 \rangle$, onde $|0\rangle$ e $|n\rangle$ pertencem ao conjunto de autoestados de H . Isso nos motiva a definir a função de Green de uma partícula, através da qual podemos escrever diversas quantidades físicas de nosso interesse:

$$G(k; t) = \langle 0 | T a_k(t) a_k^\dagger(0) | 0 \rangle \quad (2.17)$$

em que a dependência temporal dos operadores é dada por $a_k(t) = e^{iHt} a_k e^{-iHt}$, como na representação de Heisenberg, T é o operador de ordenamento temporal, cuja aplicação num conjunto de operadores os ordena do menor para o maior instante de tempo (da direita para a esquerda). Toda a informação contida no Hamiltoniano está também contida na função de Green, entretanto, na prática, trabalhar com a última é quase sempre mais interessante. $G(k; t)$ é uma medida da correlação entre partículas com mesmo k em instantes de tempo diferentes. Pode ser calculado explicitamente:

$$G(k; t) = \begin{cases} \sum_{j \in BZ} \frac{1}{E_j(k^0) - E + i} e^{-i(E_j(k^0) - E + i)t} & t > 0 \\ 0 & t < 0 \end{cases} \quad (2.18)$$

É bastante comum lidarmos com a transformada de Fourier temporal da função de Green, que se torna uma função da energia. Se inclui um potencial periódico, a base de autoestados pode ser $|j\rangle$, de momento k dentro da BZ e índice de banda j . Introduzindo um parâmetro infinitesimal real e positivo para tornar solúvel a integração, temos

$$G(k; E + i) = \sum_{j \in BZ} \int_0^{\infty} G(k; t) e^{i(E + i)t} dt \quad (2.19)$$

$$= \sum_{j \in BZ} \frac{1}{E - E_j(k^0) + i} \quad (2.20)$$

com $E_j(k^0) = \langle j | H | j \rangle$. Perceba que

$$\text{Im} G(k; E) = - \sum_{j \in BZ} \delta(E - E_j(k^0)) \quad (2.21)$$

Podemos então escrever um primeiro observável importante para o decorrer deste trabalho, a densidade de estados, em termos da função de Green:

$$\rho(E) = - \frac{1}{\pi} \text{Im} \sum_k G(k; E) \quad (2.22)$$

A função de Green associada ao Hamiltoniano livre é

$$G_0(E + i) = \frac{1}{E - H_0 + i} \quad (2.23)$$

Veja que esta é uma função com polos nos autovalores E_j . Uma definição análoga da função de Green total $G(E)$ é encontrada trocando H_0 por H . A função de Green total G contém informação sobre o sistema perturbado, que é o que nos interessa resolver, mas em teoria de perturbação o problema se desenvolve em séries de potências de G_0 , por isto ela acaba sendo útil. Para obter a função de Green, basta conhecer o Hamiltoniano e tomar seu inverso. No espaço de momentos, temos então

$$\langle k | G_0(E) | k' \rangle = \frac{1}{E - E_0(k)} \delta(k - k') = G_0(k; E) \delta(k - k') \quad (2.24)$$

2.3 Espalhamento por um potencial local

O problema de espalhamento [25, 27] em mecânica quântica tenta descrever o que deve acontecer a uma partícula ao encontrar uma região influenciada por um potencial $V(r)$ e depois abandonar essa região. O Hamiltoniano do problema é

$$H = H_0 + V(r) = \frac{p^2}{2m} + V(r) \quad (2.25)$$

Esta é uma questão que geralmente é tratada com teoria de perturbação dependente do tempo, imaginando que $V(r)$ é ligado por um breve intervalo de tempo. A relação de transição entre os estados assintóticos inicial $|i\rangle$ e final $|f\rangle$ é descrita pela matriz de espalhamento

$$S_{fi} = \langle f | T_{in} | i \rangle \delta(E_f - E_i) \quad (2.26)$$

em que T_{in} é chamada matriz de transição, que contém a aproximação em primeira ordem do potencial V . A equação diz que a onda incidente pode não sofrer mudança alguma, ou sofrer algum tipo de espalhamento, determinado por T_{in} . É razoável supor que os estados $|i\rangle$ e $|f\rangle$ serão ondas planas, portanto terão mesmo autovalor de energia $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$. Seja $|k_i\rangle$ a onda incidente, tal que $H_0 |k_i\rangle = E |k_i\rangle$ e $|k_f\rangle$ a onda resultante do possível espalhamento, com $H_0 |k_f\rangle = E |k_f\rangle$. Podemos relacionar estes estados por

$$(E - H_0)(|k_f\rangle - |k_i\rangle) = V(r)|k_i\rangle$$

Vamos introduzir um fator real e positivo para possibilitar a inversão do operador ao lado esquerdo. Perceba que isto é então a função de Green livre $G_0(E - i\epsilon) = (E - H_0 - i\epsilon)^{-1}$. A equação para $|k_f\rangle$ se torna

$$|k_f\rangle = |k_i\rangle + G_0(E - i\epsilon) V(r) |k_i\rangle \quad (2.27)$$

conhecida como equação de Lippmann-Schwinger. A partir das soluções, podemos relacionar os operadores T e $V(r)$ por $T |k_i\rangle = V(r) |k_i\rangle$. Perceba que (2.27) é uma

relação de recursividade para $j \rightarrow i$. aplicando, por exemplo, $V(r)$ a esquerda, temos³

$$\begin{aligned} V(r) j \rightarrow i &= V(r) j k i + V(r) G_0 V(r) j \rightarrow i \\ &= [V(r) + V(r) G_0 T] j k i \\ &= T j k i ; \end{aligned}$$

obtendo uma relação de recursividade agora entre os operadores:

$$T = V(r) + V(r) G_0 T \quad (2.28)$$

Isto nos dá uma série perturbativa no potencial e na função de Green livre: uma das formas da série de Born. Expandindo, temos

$$T = V(r) + V(r) G_0 V(r) + V(r) G_0 V(r) G_0 V(r) + \quad (2.29)$$

No espaço de momentos, é possível mostrar que

$$T(k) j k i = V(q=0) + \sum_q V(k-q) G_0(q; E) V(q-k) + \quad (2.30)$$

Esta série, de modo geral, só é útil truncando-a e calculando efeitos de alguma ordem específica em V . Entretanto, se considerarmos um potencial de espalhamento local e de curto alcance, por exemplo, uma delta de Dirac na posição do centro espalhador, a dependência em q nos potenciais em (2.29) deve sumir, pois

$$V(r) = V(r) \delta(r) \Rightarrow V(q) = \frac{1}{L^3} V \quad (2.31)$$

(2.29) se torna

$$T(k) = \frac{1}{L^3} V + \frac{V}{L^3} \sum_q G_0(q; E) + \frac{V}{L^3} \sum_q G_0(q; E) G_0(q; E) + \quad (2.32)$$

é útil definir a função de Green local

³vamos omitir o argumento E da função de G_0 para menor poluição visual, mas vamos retorná-lo mais adiante quando precisarmos.

$$g_0(E) = \frac{1}{L^3} \sum_k G_0(k; E) : \quad (2.33)$$

Isto permite que calculemos isoladamente a soma em momentos dentro da soma na equação (2.32) e uma série geométrica em $V g_0$, que nos permite obter um valor exato para a matriz de transição, que não depende mais dos momentos, mas apenas de

$$\begin{aligned} T(E) &= \frac{V}{L^3} \sum_{n=0}^{\infty} [V g_0(E)]^n \\ &= \frac{V}{L^3} \frac{1}{1 - V g_0(E)} : \end{aligned} \quad (2.34)$$

O fato do potencial ser local faz com que toda a dependência em momentos que na definição de g_0 . Desta forma, podemos calcular (2.33) isoladamente e depois inserir em $T(E)$.

2.3.1 Phase Shifts

A equação de Lippmann-Schwinger no espaço real nos dá soluções ψ_i que geralmente são escritas como expansões de ondas parciais. Nestas soluções seus argumentos cam em termos de parâmetros adimensionais chamados phase shifts sendo o índice associado ao canal de momento angular na expansão. No caso de um potencial de curto alcance, é relevante apenas o termo δ_0 de ondas $l=0$, a partir do qual alguns teoremas podem ser derivados. Um deles é o teorema de Friedel [28], que relaciona a mudança na densidade de estados dos férmions na presença da impureza com a derivada de $\delta_0(E)$. Um outro é o teorema de Fumi [29], que diz que a mudança na energia do estado fundamental (ou da energia livre em temperatura $T = 0$) devida a presença do potencial de espalhamento é dada por

$$F(T=0) = - \frac{1}{L^3} \int_{E_{\min}}^{E_F} \delta_0(E) dE : \quad (2.35)$$

E_{\min} é a energia mínima do sistema em questão (geralmente escreve-se este limite inferior como $1/L$), tal que a integração é feita sobre os estados ocupados.

A matriz T pode ser escrita em termos de phase shift [25, 30] por

$$T(E \pm i) = \frac{2}{m} \frac{e^{2i\phi_0(E)} - 1}{2ip} \quad (2.36)$$

Desta forma, podemos escrever a phase shift em termos da matriz T :

$$\frac{T(E + i)}{T(E - i)} = \frac{e^{2i\phi_0(E)} - 1}{e^{-2i\phi_0(E)} - 1} = e^{2i\phi_0(E)} \quad (2.37)$$

ou

$$2i\phi_0(E) = \ln \frac{T(E + i)}{T(E - i)} \quad (2.38)$$

Um fato importante é que se E é real, então

$$g_0(E + i) = g_0(E - i); \quad T(E + i) = T(E - i) \quad (2.39)$$

Usando isto e (2.34), encontramos finalmente a phase shift em termos da função de Green:

$$\phi_0(E) = \text{Im} \int \ln [1 - V g_0(E + i)] g \quad (2.40)$$

Podemos assim usar o teorema de Fumi para saber qual a mudança na energia do estado fundamental provocada pela impureza em termos da função de Green livre. Basta conhecer o Hamiltoniano livre, tomar sua inversa e, se o potencial de espalhamento não tiver dependência em momento, podemos calcular (32) e inserir diretamente a phase shift. O procedimento feito em [31] leva em consideração a possibilidade da função de Green e do potencial serem matrizes, com índices e 0 . Estes podem ser, por exemplo, índices de bandas. Neste caso devemos escrever a phase shift em termos de um determinante da matriz T , quando com

$$F = \frac{1}{E_{\min}} \int_{E_{\min}}^{E_F} \text{Im} \int \ln [\det (I - V g_0; \phi_0(E + i))] g dE \quad (2.41)$$

Em [30, 32, 33] há mais discussões envolvendo o teorema de Fumi. Existe uma chamada "forma forte" deste teorema [33], que é sua generalização para temperaturas finitas. Uma outra forma de chegar a este teorema é como é feito na seção 4.1-F de [30], usando funções de Green de Matsubara e o teorema de linked-cluster para a energia livre.

A soma de Matsubara é transformada exatamente na integral (35). Este é o caminho escolhido em [16] para fazer a conta analítica que dá a energia para criar um par de visons no modelo de Kitaev.

Captulo 3

O Modelo de Kitaev

Neste captulo vamos estudar o modelo de Kitaev da rede honeycomb. Apresentaremos as caractersticas do modelo e os truques para sua soluco exata. Discutiremos seu estado fundamental e o que caracteriza suas fases com e sem gap . Introduziremos as duas principais tcnicas para calcular o gap de visons: numrica na rede com tamanho finito e analtica no limite termodinmico, mostrando seus resultados no modelo de Kitaev e entendendo como estas podem ser generalizadas para outros modelos semelhantes.

3.1 O modelo

O modelo de Kitaev [10] considera interaes entre spins $\frac{1}{2}$ que vivem nos stios de uma rede honeycomb. Esta e uma rede triangular com duas subredes que chamaremos de A e B. A figura 3:1 mostra uma possvel escolha de clula unitria que, trasladando-se pelos vetores primitivos $\mathbf{a}_1 = \frac{1}{2} \cdot \frac{\sqrt{3}}{2}$ e $\mathbf{a}_2 = \frac{1}{2} \cdot \frac{\sqrt{3}}{2}$, pode gerar a rede inteira. Trabalharemos sempre com uma rede de clulas unitrias com condies perdicas de contorno, sendo L_1 e L_2 a quantidade de clulas unitrias nas direes dos vetores \mathbf{a}_1 e \mathbf{a}_2 respectivamente.

Rotulamos as trs diferentes direes da rede, como indicado na figura 3:3al que as interaes entre spins so do tipo Ising (produtos de matriz de Pauli) com seus primeiros vizinhos, determinada exatamente pelo ttulo da ligao entre o par de stios. Ou seja, se os stios i e j so primeiros vizinhos e esto no link $\langle i, j \rangle$, o Hamiltoniano e

Figura 3.1: Vetores primitivos da rede honeycomb e célula unitária, destacada em azul.

$$H = \sum_{\text{links-x}} J_x \sum_i^x \sum_j^x X_{ij} + \sum_{\text{links-y}} J_y \sum_i^y \sum_j^y X_{ij} + \sum_{\text{links-z}} J_z \sum_i^z \sum_j^z X_{ij} \quad (3.1)$$

Figura 3.2: A rede Honeycomb com os rótulos de cada um dos três tipos de link.

Podemos ainda escrevê-la de forma mais compacta definindo o operador bilinear nos i, j que carrega a interação em si, que chamaremos de operador de link:

$$K_{ij} = J_{ij} X_{ij}; \text{ se } (i, j) \text{ é um link-} \quad (3.2)$$

quando com

$$H = \sum_{\text{links-}} \sum_{i,j} K_{ij} X_{ij} \quad (3.3)$$

O fato de o modelo ser exatamente solúvel parte da definição dos operadores W_p , que são produtos de matrizes de Pauli em torno de uma plaqueta, como designado na figura 3.

$$W_p = \prod_{i \in 2p} Y_i = \begin{matrix} X & Y & Z & X & Y & Z \\ 1 & 2 & 3 & 4 & 5 & 6 \end{matrix} \quad (3.4)$$

Figura 3.3: Uma plaqueta na rede honeycomb, com os seis stios para os quais teremos matrizes de Pauli na de nicação de W_p .

Os W_p comutam todos entre si, pois duas plaquetas necessariamente compartilham um numero par de stios: 2 se forem vizinhas e 0 se estiverem afastadas. Isto implica no vnculo

$$\prod_p W_p = 1; \quad (3.5)$$

Usando propriedades das σ_i , notamos que os W_p podem ser escritos tambem como produtos dos operadores de link:

$$W_p = \sigma_1^x \sigma_2^y \sigma_3^z \sigma_4^x \sigma_5^y \sigma_6^z = K_{12} K_{23} K_{34} K_{45} K_{56} K_{61}; \quad (3.6)$$

pois, se olharmos por exemplo para um par de σ_{ij} , teremos

$$\begin{aligned} K_{23} K_{34} &= \sigma_2^x \sigma_3^x \sigma_3^y \sigma_4^y \\ &= \sigma_2^x (i \sigma_3^z) \sigma_4^y \end{aligned}$$

Isto e bastante util pois o Hamiltoniano e de nido exatamente em termos dos K_{ij} ; portanto

$$[W_p; H] = 0; \quad (3.7)$$

e temos entao um conjunto de operadores que nao tem dinamica: sao conservados. Encontrar autoestados de H deve entao se resumir a procurar em uma configuracao especifica dos W_p em toda a rede. Chamamos cada um destes subespacos de "setor de fluxo" ou "configuracao de fluxo". Perceba que $(W_p)^2 = 1$, ou seja, este e um operador com

autovalores $w_p = \pm 1$. São destes autovalores de W_p que tiramos a interpretação de fluxo:

$$w_p = e^{i\theta_p} \quad (3.8)$$

Para plaquetas hexagonais, os w_p podem ser 0 ou ± 1 . Por serem dois possíveis valores, dizemos que W_p é um operador que mede fluxo \mathbb{Z}_2 . Se imaginarmos a rede honeycomb disposta num toro, se tivermos N células unitárias, temos também N plaquetas hexagonais. Portanto, considerando o vínculo (3) deve haver 2^{N+1} possíveis setores de fluxo. A boa notícia é que, para redes bipartidas, como a honeycomb, há um teorema de Lieb [34] que garante que a configuração de fluxo que dá o estado fundamental é exatamente aquela em que $w_p = 1$; 8p.

Para obter uma solução analítica do modelo de Kitaev, podemos mapear os operadores de Pauli σ_j , para cada sítio j , em quatro férmions de Majorana $b_j^x; b_j^y; b_j^z; c_j$. Esses novos operadores são hermitianos: $(b_j^x)^y = b_j^x$, $(c_j)^y = c_j$ e respeitam a álgebra de férmions análoga a (211). É importante de notar também que $(b_j^x)^2 = (c_j)^2 = 1$. Esse mapeamento, apesar de dobrar o espaço de Hilbert do Hamiltoniano, é útil pois veremos que H será quadrático em férmions c_j ; se tornando um problema que sabemos resolver. Para contornar o aumento não físico do espaço de Hilbert, vamos impor um vínculo através do operador $D_j = b_j^x b_j^y b_j^z c_j$: se M é o subespaço estendido, em que os $b_j^x; b_j^y; b_j^z; c_j$ atuam, e M é o subespaço físico, tal que $M \subset M$; os estados físicos, ou seja, que são possíveis autoestados do Hamiltoniano original, são tais que

$$D_j |j\rangle_{\text{físico}} = |j\rangle_{\text{físico}}; \quad (3.9)$$

Veja que D_j têm autovalores ± 1 , então o vínculo de fato seleciona metade da dimensão de M . O mapeamento para férmions de Majorana é feito da seguinte forma:

$$\begin{aligned} \tilde{c}_j^x &= i b_j^x c_j; \\ \tilde{c}_j^y &= i b_j^y c_j; \\ \tilde{c}_j^z &= i b_j^z c_j; \end{aligned} \quad (3.10)$$

Ao reescrever o Hamiltoniano na forma fermiônica, teremos um operador que atua em M com matrizes de Pauli $\tilde{\alpha}$, $\tilde{\beta}$, e $\tilde{\gamma}$ que, quando restritas ao subespaço físico M , devem

satisfazer a mesma álgebra que a^x, a^y, a^z . Isso fica claro tomando

$$\tilde{\gamma}_j^x \tilde{\gamma}_j^y \tilde{\gamma}_j^z = i b_j^x b_j^y b_j^z c_j = i D_j;$$

que é equivalente a

$$\tilde{\gamma}_j^x \tilde{\gamma}_j^y \tilde{\gamma}_j^z = i;$$

já que os D_j atuam como a identidade em M . Estamos prontos para escrever então um Hamiltoniano de férmions para o modelo de Kitaev. Apesar de termos, para cada k_j , duas matrizes de Pauli, teramos a princípio quatro férmions, mas os Majoranas sempre aparecerão em pares da mesma ligação. Se definirmos então os operadores hermitianos $\hat{U}_{ij} = i b_i b_j$, associados a cada link (i, j) , os K_{ij} se tornam

$$\begin{aligned} K_{ij} &= \tilde{\gamma}_i \tilde{\gamma}_j \\ &= (i b_i c_i) (i b_j c_j) \\ &= -i b_i b_j c_i c_j \\ &= -i \hat{U}_{ij} c_i c_j; \end{aligned}$$

que é quadrático em férmions c_j . Chamaremos estes de férmions dinâmicos. O Hamiltoniano fica então

$$H_U = i \sum_{\langle ij \rangle} J_{ij} \hat{U}_{ij} c_i c_j; \quad (3.11)$$

em que agora temos uma soma simples sobre primeiros vizinhos $\langle ij \rangle$ e o sub-índice de J_{ij} indica que teremos o acoplamento correspondente ao link que conecta o par de sítios (i, j) . Os operadores \hat{U}_{ij} comutam todos entre si e têm autovalores $u_{ij} = \pm 1$. Além disso, estes são operadores antissimétricos $u_{ij} = -u_{ji}$. Os observáveis $H; W_p$ são todos invariantes pela transformação $c_j \rightarrow b_j c_j$, pois todos envolvem produtos de quantidades pares dos férmions de Majorana. Perceba que é exatamente o operador D_j que é capaz de realizar essa transformação, por isto dizemos que este realiza uma transformação de calibre \mathbb{Z}_2 . Entretanto, os u_{ij} invertem de sinal com a atuação desta mudança de calibre: os u_{ij} ligados ao sítio em que o operador D_j atua invertem de sinal. Os u_{ij} podem ser entendidos como campos de calibre. Se escrevermos

$$W_p = \sum_{\langle ij \rangle \in \mathcal{P}} \hat{c}_{ij}; \quad (3.12)$$

com a convenção de que o sítio pertence sempre a subrede A e a subrede B, é evidente que diferentes escolhas dos \hat{c}_{ij} em toda a rede podem gerar uma mesma configuração de fluxos. Assim, podemos escolher uma configuração específica dos campos de gauge simplesmente trocando estes em (3.1) por seus autovalores s_{ij} . Chegamos então a um modelo efetivo que descreve férmions de Majorana livres em um plano de fundo de fluxos Z_2 estáticos. Os autoestados do Hamiltoniano do modelo de Kitaev podem ser escritos na forma $| \kappa \rangle = | M \rangle | G \rangle$, em que $| G \rangle$ é uma configuração específica dos \hat{c}_{ij} pela rede e $| M \rangle$ é um estado no espaço de Fock para os férmions complexos, cada um formado por uma combinação de dois Majoranas [35]. Para gerar o estado fundamental, podemos simplesmente tomar $| G_0 \rangle$, que corresponde a padronizar $c_{ij} = 1 \ \forall \langle ij \rangle$. Isso nos dá

$$H_0 = i \sum_{\langle ij \rangle} J_{ij} c_i c_j; \quad (3.13)$$

que agora tem simetria de translação.

3.2 Dispersão de Majoranas

Podemos diagonalizar H_0 usando a transformada de Fourier dos férmions de Majorana. Isto funciona sempre em que há simetria de translação no sistema, sendo aplicável a nossa rede honeycomb no toro. Vamos trocar os índices de sítio no Hamiltoniano por índices de posição da célula unitária e de subrede (R; S). A transformada de Fourier de um operador de férmion de Majorana no sítio de célula unitária \mathbf{r} e na subrede $\mathcal{S} \in \{A, B\}$ é

$$c_{\mathbf{r}, \mathcal{S}} = \frac{1}{\sqrt{N_c}} \sum_{\mathbf{k}} e^{i \mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} c_{\mathbf{k}, \mathcal{S}}; \quad (3.14)$$

Para cada sítio da subrede A, temos três primeiros vizinhos na subrede B, sendo um deles na mesma célula unitária e outros dois em células vizinhas, que podemos alcançar com translações por vetores da rede $\mathbf{e}_{1,2}$. A posição dessas células unitárias vizinhas, em relação a uma de posição \mathbf{r} , é então $\mathbf{r} + \mathbf{e}_\alpha$, com $\alpha \in \{0, 1, 2\}$; sendo $\mathbf{e}_0 = (0; 0)$. O

Hamiltoniano H_0 , com essas notações,

$$\begin{aligned} H_0 &= \frac{i}{N_c} \sum_{\langle R, R' \rangle} J_{RR'} c_{R,A} c_{R',B} \\ &= \frac{i}{N_c} \sum_{\mathbf{k}; \mathbf{k}^0} \sum_{\mathbf{r}} J_{\mathbf{r}; \mathbf{r}^0} e^{i(\mathbf{k} + \mathbf{k}^0) \cdot \mathbf{r}} e^{i\mathbf{k}^0 \cdot \mathbf{a}} c_{\mathbf{k}A} c_{\mathbf{k}^0B} \end{aligned}$$

Vamos definir o fator $J_{\mathbf{r}; \mathbf{r}^0} = i^P \sum_{\mathbf{r}'} J_{\mathbf{r}; \mathbf{r}'} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}}$, que depende apenas das posições relativas \mathbf{a} entre células unitárias. O subndice em $J_{\mathbf{r}; \mathbf{r}^0}$ indica a posição relativa de \mathbf{r}^0 entre o respectivo par de sítios. O fato dos $J_{\mathbf{r}; \mathbf{r}^0}$ serem reais implica que

$$J_{\mathbf{r}; \mathbf{r}^0}^* = J_{\mathbf{r}^0; \mathbf{r}} \quad (3.15)$$

Perceba também que $\frac{1}{N_c} \sum_{\mathbf{r}} e^{i(\mathbf{k} + \mathbf{k}^0) \cdot \mathbf{r}} = \delta_{\mathbf{k} + \mathbf{k}^0, 0}$, que é coerente com (3.5). Ficamos então com

$$H_0 = \sum_{\mathbf{k}} h(\mathbf{k}) c_{\mathbf{k}A} c_{-\mathbf{k}B};$$

entretanto, é mais intuitivo enxergar as interações que H_0 descreve usando uma representação de uma matriz 2×2 com os índices sendo as subredes do sistema. vamos definir então

$$h(\mathbf{k}) = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ c_{\mathbf{k}A} & c_{\mathbf{k}B} \end{pmatrix} A; \quad (3.16)$$

e teremos

$$H_0 = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} \text{tr} [h(\mathbf{k})]; \quad h(\mathbf{k}) = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ c_{\mathbf{k}A} & c_{\mathbf{k}B} \end{pmatrix} A; \quad (3.17)$$

O espectro de H_0 são então os autovalores de $h(\mathbf{k})$:

$$E(\mathbf{k}) = \pm \sqrt{c_{\mathbf{k}A}^2 + c_{\mathbf{k}B}^2}; \quad (3.18)$$

As somas $\sum_{\mathbf{k}}$ são feitas sobre todos os modos dentro da zona de Brillouin, que podemos parametrizar por

$$\mathbf{k} = \frac{k_1}{2} \mathbf{b}_1 + \frac{k_2}{2} \mathbf{b}_2; \quad k_1, k_2 \in [0, 2]; \quad (3.19)$$

Como a rede honeycomb é uma rede de Bravais triangular, sua recíproca é exatamente a

da figura 2:1, com vetores $b_1 = \frac{2}{\sqrt{3}} \hat{p}_3; 1$ e $b_2 = \frac{2}{\sqrt{3}} \hat{p}_3; 1$. Matematicamente pode ser útil usar a parametrização (319), que corresponde a zona de Brillouin com forma de paralelogramo. É mais interessante usar a BZ hexagonal quando quisermos visualizar, por exemplo as dispersões e suas simetrias. Sendo assim, é útil saber que $k_1 + k_2$ e $k_y = \frac{k_1 - k_2}{\sqrt{3}}$. A relação (315) impõe um vínculo entre pontos opostos na zona de Brillouin, tal que apenas metade da zona já comporta a quantidade total de modos necessária para obter todo o espectro. Isto é consequência de que cada par de férmions de Majorana descreve um modo de férmion complexo, mas sicamente a quantidade total de modos fermiônicos deve ser a mesma. Uma possibilidade seria fazer as somas sobre metade da zona de Brillouin, entretanto, vamos preferir somar sobre a zona inteira e perceber que

$$E_+(k) = E_-(k); \quad (3.20)$$

ou seja, basta olharmos para uma metade do espectro, por exemplo, para $E_+(k)$. Temos então uma dispersão que é função contínua de k^2 em $k \in 2 \text{ BZ}$ e que depende dos parâmetros $J_x; J_y$ e J_z . O objeto importante aqui é

$$\epsilon(k) = 2i [J_x e^{ik_1} + J_y e^{ik_2} + J_z]; \quad (3.21)$$

Estaremos na fase *sergap* se existe pelo menos um valor de k tal que $\epsilon(k) = 0$, que pode ser satisfeita se os parâmetros satisfazem as desigualdades

$$|J_a| \leq |J_b| + |J_c|; a, b, c \in \{x, y, z\}; \quad (3.22)$$

O caso isotópico, $J_x = J_y = J_z = J$, está nesse regime *sergap*. Este caso pode ser familiar ao leitor: é simplesmente um modelo de tight-binding na rede honeycomb, que é usado como modelo para o grafeno [36]. Os pontos em que $\epsilon(k) = 0$ são, nesse caso, os pontos K e K^0 da zona de Brillouin. A dispersão de Majoranas no caso isotópico é mostrada na figura 34. Em baixas energias, é possível mostrar que a dispersão é linear em $|k|$, ou seja, as bandas superior e inferior $E_{\pm}(k)$ formam cones que se tocam em $E_{\pm} = E_F = 0$. Estes são chamados cones de Dirac, pois se assemelham a relação de dispersão de uma partícula relativística sem massa, $E = pc$ que é linear no momento.

A energia do estado fundamental por célula unitária pode ser calculada exatamente

Figura 3.4: Dispersão de Majoranas para o caso isotópico no modelo de Kitaev. As bandas se tocam nos vértices da zona de Brillouin.

no limite termodinâmico, já que há simetria de translação. Ela é

$$\frac{E_0^{(a)}}{N} = \frac{1}{(2\pi)^2} \int_0^{2\pi} dk_1 \int_0^{2\pi} dk_2 j(k)j : \quad (3.23)$$

No caso isotópico, encontramos $E_0^{(a)} = N \cdot 1.5746J$. Neste trabalho vamos sempre trabalhar com a quantidade de algarismos significativos que nos dá resultados em até quatro casas decimais. Na prática, todos os cálculos serão feitos com 5 algarismos significativos, mas para não sobrecarregar a notação, omitiremos os zeros à direita sempre que parecerem redundantes.

3.3 Visons

Além das possíveis excitações fermiônicas, temos também as possíveis excitações associadas a sair de \mathbb{C}_0 para uma outra configuração de fluxos. Dizemos que quando um operador de plaqueta tem $w_p = -1$, esta carrega um vison ou vortice de Z_2 . Por causa do vínculo (3.5), visons só podem ser criados em pares. Podemos criar um par de vortices adjacentes trocando o sinal de um único ω_{ij} na rede, como exemplificado na figura 3. Para isto, há um custo energético finito μ_v . Para o modelo de Kitaev, vamos sempre calcular o gap de visons entre plaquetas que compartilham um link.

Figura 3.5: Recorte da rede honeycomb com um par de vortices adjacentes. O link em vermelho é o único $u_{ij} = 1$ em toda a rede.

3.3.1 Diagonalização no espaço real

No caso de uma escolha qualquer \mathbf{q} , não necessariamente teremos simetria de translação. Isto nos obriga a trabalhar com H_u no espaço real, usando uma rede de tamanho finito. Este desenvolvimento é importante, por exemplo para calcular ν para criar vortices. Até a publicação de [16] esta era a forma mais eficiente para calcular ν . O procedimento consiste em escrever uma matriz que computa todas as interações entre os férmions de Majorana, depois fazer uma transformação para férmions complexos e escrever um Hamiltoniano em forma canônica em termos de operadores que de fato atuam nos estados $|M(\mathbf{q})\rangle$. Vamos mudar a notação dos índices de sítio nos férmions de Majorana: $c_i \rightarrow c(m_1; m_2)$; tal que o sítio i é o sítio de posição $m_1 a_1 + m_2 a_2$. Especificaremos os u_{ij} de forma semelhante $u_{ij} \rightarrow u(m_1; m_2)$; com i sempre na subrede A. O tamanho finito da rede é parametrizado pelos números de células unitárias $L_{1,2}$, nas direções de $a_{1,2}$. As condições periódicas de contorno nos dizem que

$$c(m_1 + L_1; m_2) = c(m_1; m_2) ; c(m_1; m_2 + L_2) = c(m_1; m_2) :$$

Com essa notação, o Hamiltoniano fica

$$H = i \sum_{m_1; m_2} c_A(m_1; m_2) [J_x u_x(m_1; m_2) c_B(m_1 + 1; m_2) + J_y u_y(m_1; m_2) c_B(m_1; m_2 + 1) + J_z u_z(m_1; m_2) c_B(m_1; m_2)] : \quad (3.24)$$

O vetor contendo todos os N fermions de Majorana e

$$C = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ @ & c_A \\ & c_B \end{pmatrix} A ; \quad c = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ c(1;1) & \\ c(2;1) & \\ \vdots & \\ c(L_1;1) & \\ c(1;2) & \\ \vdots & \\ c(L_1;L_2) & \end{pmatrix} \quad (3.25)$$

e de iremos os N fermions complexos como

$$f(m_1; m_2) = \frac{1}{2} [c_A(m_1; m_2) - ic_B(m_1; m_2)] : \quad (3.26)$$

Essa de nicaõ nos da uma matriz de transformaçao de fermions reais para complexos:

$$T = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ @ & I_N \\ & iI_N \end{pmatrix} A ; \quad (3.27)$$

tal que

$$C = T \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ @ & f \\ & f^y \end{pmatrix} A \quad (3.28)$$

com f sendo um vetor com os fermions complexos em cada celula unitaria. O Hamiltoniano ca, dessa forma, escrito como

$$H = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 1 \\ f^y @ & H_{AA} & H_{AB} & A \\ & H_{BA} & H_{BB} & \\ & & & f^y @ \end{pmatrix} A ; \quad (3.29)$$

com as matrizes H contendo as interações entre stios das subredes 0 , sendo obtidas de (3.24). Finalmente, podemos aplicar uma transformaçao unitaria que diagonaliza nos levando a uma forma canônica:

$$\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ @ & a \\ & a^y \end{pmatrix} A = U \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ @ & f \\ & f^y \end{pmatrix} A \quad (3.30)$$

e teremos

$$H = \sum_{\alpha} \epsilon_{\alpha} a_{\alpha}^{\dagger} a_{\alpha} \quad (3.31)$$

Os ϵ_{α} são todos os autovalores positivos de H . A energia do estado fundamental para o sistema em questão é

$$E_0^{(G)} = \sum_{\alpha=1}^N \epsilon_{\alpha} \quad (3.32)$$

Isto pode nos dar a energia do estado fundamental do modelo de Kitaev $E_0^{(0)}$, se o Hamiltoniano inicial tiver $u(m_1; m_2) = 1/8 m_1 m_2$. A figura 3:6a mostra um teste para este método, com valores da energia do estado fundamental por célula unitária no caso isotópico. O valor obtido extrapolando a curva foi $E_0^{(n)} = N = 1:5745$. Compare com o obtido por (3.23). Esta extrapolação foi feita tomando um ajuste polinomial em $1/N$ até segunda ordem e tomando com o valor de ordem 0, entendendo que no limite $1/N \rightarrow 0$ os termos que acompanham as demais potências de $1/N$ se anularão. A partir daqui, esta sempre será a forma que tomaremos extrapolações para $N \rightarrow \infty$.

3.3.2 Resultados numéricos

Para calcular χ_v basta então calcular (3.2), tendo especificado em (3.4), por exemplo, $u_z(0; 0) = 1$, e subtrair de $E_0^{(0)}$:

$$\chi_v^{(n)} = E_0^{(2)} - E_0^{(0)} \quad (3.33)$$

Em [37] há uma discussão detalhada sobre um vínculo de paridade do número de férmions $a_{\alpha}^{\dagger} a_{\alpha}$ que estados físicos devem satisfazer. Criar um par de vórtices altera essa paridade, por isso, a rigor, pode ser necessário incluir mais um modo fermiônico na energia do estado fundamental:

$$E_0^{(G)} = 2 \sum_{\alpha=1}^N \epsilon_{\alpha} \quad (3.34)$$

¹O índice superior (0) será usado para indicar se há ou não vórtices no setor de fluxos em que (3.2) foi efetuada.

O gap dos visons para estados físicos e não físicos são, respectivamente

$$\begin{aligned} \delta_{\nu}^{(p)} &= E_0^{(2)} - E_0^{(0)} + 2\epsilon_0^{(0)} ; \\ \delta_{\nu}^{(u)} &= E_0^{(2)} + 2\epsilon_0^{(2)} - E_0^{(0)} : \end{aligned} \quad (3.35)$$

A figura 3:6b nos mostra $\delta_{\nu}^{(n)}$, $\delta_{\nu}^{(p)}$ e $\delta_{\nu}^{(u)}$ para $f_{J_x} = 1; 0; J_y = 1; 0; J_z = 1; 0g$, calculados em redes com vários valores de L ($L = L_1 = L_2$). Quando $L \bmod 3 = 0$, temos um comportamento diferente dos demais valores de $\delta_{\nu}^{(n)}$. Isto ocorre pois os modos com coordenadas exatamente em K e K^0 são permitidos, e estes têm exatamente energia 0. Por este motivo, também $\epsilon_0^{(2)} = \epsilon_0^{(0)}$ e $\delta_{\nu}^{(p)} = \delta_{\nu}^{(u)}$. Como o que nos interessa é obter um valor para δ_{ν} no limite termodinâmico, observando que, a medida que L cresce, todas as curvas parecem convergir para um mesmo valor, $\delta_{\nu} = 0; 26$, vamos daqui para frente trabalhar apenas com os $\delta_{\nu}^{(n)}$. Extrapolando para $L \rightarrow \infty$ as curvas vermelha e azul da figura 3:7, que correspondem a $\delta_{\nu}^{(n)}$ para L múltiplo e não múltiplo de 3 respectivamente, chegamos a $\delta_{\nu} = 0; 2638$ para a vermelha e $\delta_{\nu} = 0; 2634$ para a azul. Tomaremos nosso resultado numérico para o gap de visons como a média desses dois valores $\delta_{\nu}^{(n)} = 0; 2636$.

Se escolhermos um regime de parâmetros anisotrópico, por exemplo $f_{J_x} = 1; 8; J_y = 1; 3; J_z = 1; 0g$, o efeito para gaps calculados em redes com $L \bmod 3 = 0$ não está mais presente. Isto é esperado, pois a ausência de simetria C_6 faz com que os cones de Dirac na dispersão de Majoranas se desloquem de K e K^0 . Veja a figura 3:8. O regime $f_{J_x} = 1; 8; J_y = 1; 3; J_z = 1; 0g$ ainda tem dispersão sem gap pois respeita a (3.22), mas com cones de Dirac assimétricos por rotações no plano $(k_x; k_y)$. A figura 3:7 mostra $\delta_{\nu}^{(n)}$ para este regime. Perceba que não temos mais curvas suaves de maneira que fosse razoável fazer a mesma extrapolação que no caso isotrópico, entretanto os pontos parecem convergir para um determinado valor. Vamos usar um outro critério para definir $\delta_{\nu}^{(n)}$ neste caso: pegaremos uma média dos gaps para $L = 78; 79; 80$, obtendo $\delta_{\nu}^{(n)} = 0; 1860$.

Os regimes com gap na dispersão de Majoranas do modelo de Kitaev são particularmente pouco interessantes quando estamos falando de visons. O fato do espectro não ter gap de modo geral, implica que os $\delta_{\nu}^{(n)}$ convergem muito rapidamente, como na figura 3:9. No modelo de Kitaev, uma dispersão de Majoranas com gap pode ser obtida com uma escolha de acoplamentos que não respeite (2.23) ou inserindo o termo de interação efetiva para um campo magnético fraco, com acoplamento $\gamma > 0$ [38].

(a)

(b)

Figura 3.6: (a): Energia do estado fundamental por sitio em funcao do inverso de Os pontos vermelhos sao valores para $\text{mod } 3 = 0$ e a curva tracejada e uma extrapolacao. (b): $\frac{(n)}{v}$, $\frac{(p)}{v}$ e $\frac{(u)}{v}$ em funcao do tamanho do sistema.

(a) f 1; 0; 1; 0; 1:0g

(b) f 1; 8; 1; 3; 1:0g

Figura 3.7: Gap para criar um par de vortices adjacentes em funcao do tamanho do sistema nos regimes de parâmetros isotopico e anisotropico.

3.4 Calculando gap dos visons analiticamente

Nesta secao vamos nos basear no desenvolvimento feito no captulo 2 e em [16] para calcular o gap de energia para criar um par de visons adjacentes no modelo de Kitaev. A ideia e tratar o problema de criar vortices, quebrando a simetria de translacao da rede, como um problema de espalhamento por um potencial de curto alcance, que ja sabemos resolver. O potencial espalhador e um dos termos da soma em (16), que troca o sinal de u_{ij} para criar os visons. Vamos escolher, assim como no caso numerico, trocar o sinal de um u_z , que pode ser uma celula unitaria como na figura 35, que tomaremos como a de indice 0. Sendo (33) o Hamiltoniano no espaco real sem a presenca de vortices,

Figura 3.8: Plot de contorno das dispersões para os casos isotópico e anisotópico. Neste último, o deslocamento dos cones de Dirac mostrado.

Figura 3.9: Gap de visons em função do tamanho da rede para um regime com gap no modelo de Kitaev: $J_x = 2; 1; J_y = 1; 0; J_z = 1; 0$

podemos escrever

$$H_0 = i \sum_{\langle ij \rangle \in (0A; 0B)} J_{ij} c_i c_j + i \sum_z J_z c_{0A} c_{0B} \quad (3.36)$$

Desta forma, quando criamos os vortices, o último termo troca de sinal. Nosso potencial local \hat{V} é

$$\hat{V} = -2i \sum_z J_z c_{0A} c_{0B} \quad (3.37)$$

e o Hamiltoniano com o qual trabalharemos é

$$H_{2v} = H_0 + \hat{V} \quad (3.38)$$

Já conhecemos H_0 no espaço de momentos, da equação (3.3). A transformada de

Fourier de \hat{V} e

$$\begin{aligned}\hat{V} &= \frac{2iJ_z}{N_c} \sum_{k;k^0} c_{kA} c_{k^0B} \\ &= \frac{1}{2N_c} \sum_{k;k^0} (c_{kA}; c_{k^0B}) @ \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 1 \\ 2iJ_z & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 2iJ_z & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} @ \begin{pmatrix} c_{kA} \\ c_{k^0B} \end{pmatrix} \\ &= \frac{1}{2} c_0^T (2J_z - y) c_0;\end{aligned}\quad (3.39)$$

onde

$$c_0 = @ \begin{pmatrix} c_{0A} \\ c_{0B} \end{pmatrix} = \frac{1}{N_c} \sum_k \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_{kA} \\ c_{k^0B} \end{pmatrix}; \quad (3.40)$$

Temos entao

$$H_{2v} = \frac{1}{2} \sum_k h(k) + \frac{1}{2} c_0^T (2J_z - y) c_0; \quad (3.41)$$

Veja que em \hat{V} ha uma matriz que nao tem dependencia em momentos, o que nos permite ter que calcular apenas a funcao de Green livre local, em termos de (3.42):

$$g(E) = \frac{1}{N} \sum_k \frac{1}{E - h(k)}; \quad (3.42)$$

O gap para criar o par de vortices adjacentes no modelo de Kitaev, dado pelo teorema de Fumi, e

$$\nu = \frac{1}{2\pi} \int_0^{E_{\max}} \nu(E) dE; \quad (3.43)$$

com

$$\nu(E) = \text{Im} \int \ln[\det(I - 2J_z - y)g(E + i0)] g; \quad (3.44)$$

analogo a (241). E_{\max} neste caso e a largura de banda, determinada pelo regime de acoplamentos do Hamiltoniano. E importante se atentar ao fato de que c_0 e uma matriz 2×2 , assim como \hat{V} . As somas em momento em $g(E)$ podem ser transformadas em integrais. Assim, os elementos de matriz que devemos calcular sao

$$g_0(z) = \frac{1}{(2\pi)^2} \int_0^{2\pi} \int_0^{2\pi} dk_1 dk_2 \frac{1}{z - h(k)}; \quad (3.45)$$

Estas integrais, na pratica, serao calculadas numericamente. No apendice A de [16] e

feita uma simplificação em que podemos reduzir os 4 elementos de matriz ao cálculo de uma integral de uma variável, reduzindo bastante os custos computacionais para avaliar as (345). Esta simplificação é consequência das propriedades das matrizes de Pauli, das quais o Hamiltoniano do modelo de Kitaev pode ser escrito como uma combinação linear. Para ter uma ferramenta mais facilmente generalizável para outros modelos, vamos seguir com a forma em termos dos elementos de matriz separados (35).

3.4.1 Resultados analíticos

Calculamos, usando o método descrito na seção anterior, gaps de energia para criar vórtices adjacentes no modelo de Kitaev para dois conjuntos de parâmetros: o isotópico e $J_x = 1; 8; J_y = 1; 3; J_z = 1; 0g$. Para cada um destes casos, calculamos numericamente as integrais sobre $k_1; k_2$ de cada elemento de matriz (35) das funções de Green locais, usando o método de integração de Gauss-Kronrod, para $0z \quad E_{\max} = J_x + J_y + J_z$ com iterações de passo; 01 e interpolamos os dados usando o método de spline cúbica, para obter funções contínuas da variável z . O parâmetro de convergência usado nas integrações foi $\epsilon = 10^{-3}$. Estas funções estão na figura: 30 para o caso isotópico e 31 para o anisotópico. Perceba que nos elementos diagonais, a parte imaginária se anula quando $|z| > E_{\max}$, o que é de se esperar de uma função de densidade de estados. Os shifts obtidos nos dois regimes de parâmetros estão na figura 32. O gap dos visons é obtido da integral em (343) do phase shift, que nos dois casos calculamos numericamente também com o método de Gauss-Kronrod. Os valores obtidos, desta forma, para gaps $\nu^{(a)}$ do par de visons adjacentes nos dois casos estão na tabela 3. Além destes resultados, a tabela também mostra, para os dois mesmos regimes, gaps $\nu^{(n)}$ mostrados na subseção 3.1 e também as energias dos estados fundamentais por célula unitária obtidas da equação (323) (analíticos) e da (332) (numéricos).

Todos os valores obtidos nos nossos métodos analíticos concordam com os numéricos até pelo menos a segunda casa decimal. As energias do estado fundamental por sítio analíticas no modelo de Kitaev já eram resultados conhecidos e fáceis de obter, para quaisquer valores dos acoplamentos. Os valores $E_0^{(n)} = N$ nos mostram que calcular os $E_0^{(G)}$ em redes de tamanho finito e tomar extrapolações para o limite termodinâmico é um método bastante confiável. Assim, é razoável supor que os $\nu^{(n)}$ que calculamos seriam confiáveis o suficiente para compararmos com o do método analítico.

De fato, o método da seção 3 se mostrou bastante eficiente para calcular gap de um par de visons. O fato de que basta conhecer o Hamiltoniano do modelo e a forma do potencial \hat{V} faz com que esse método seja facilmente generalizável para outros modelos exatamente solúveis pelo truque de escrever o Hamiltoniano de forma quadrática em fermions. Um tipo de dispersão sempre diferente da que vimos neste capítulo poderia ser a presença de uma superfície de Fermi de Majoranas. Se houver um modelo de spins numa rede, exatamente solúvel pelos mesmos truques do modelo de Kitaev: uso de operadores estáticos e mapeamento de operadores de spin em fermions de Majorana, podemos tentar generalizar os métodos deste capítulo para estudar, por exemplo como o gap de visons se relaciona com as propriedades de uma superfície de Fermi. Responder este e outros questionamentos será o objetivo do seguinte capítulo.

$f J_x; J_y; J_z g$	$E_0^{(n)} = N$	$E_0^{(a)} = N$	$\frac{(n)}{v}$	$\frac{(a)}{v}$
f 1; 0; 1; 0; 1; 0 g	1; 5745	1; 5746	0; 2636	0; 2623
f 1; 8; 1; 3; 1; 0 g	2; 2226	2; 2226	0; 1860	0; 1856

Tabela 3.1: Energias do estado fundamental por sítio e valores do gap de visons no modelo de Kitaev, calculados pelas diferentes técnicas numéricas (índice "n") e analíticas (índice "a").

Figura 3.10: Elementos de matriz $d_{ij}(z)$ para $f J_x = 1; 0; J_y = 1; 0; J_z = 1; 0 g$

Figura 3.11: Elementos de matriz de $d_{\alpha}(z)$ para $f J_x = 1; 8; J_y = 1; 3; J_z = 1; 0g$.

(a) $f 1; 0; 1; 0; 1; 0g$

(b) $f 1; 8; 1; 3; 1; 0g$

Figura 3.12: Phase shifts obtidos nos casos isotópico e anisotópico.

Capítulo 4

Líquido de Spin de Kitaev com Superfície de Fermi

O modelo de Kitaev abriu portas para a procura de outros modelos de spin que pudessem ser exatamente solúveis pelos mesmos truques: operadores de plaqueta estáticos e mapeamento das matrizes de spin de para férmions de Majorana. Em redes com número de coordenação maior que 3, para haver uma quantidade de graus de liberdade que seja compatível com a quantidade de Majoranas ideal para a solução analítica, o comum é escrever um modelo de spins mais alto. Neste capítulo vamos trabalhar com o modelo de Chua-Yao-Fiette (CYF), proposto em [18], que foi motivado pelo interesse em encontrar uma fase de líquido de spin com superfície de Fermi de spinons na Herbertsmithita [39]. O modelo CYF tem fases de líquido de spin em que a dispersão de Majoranas pode ser com ou sem gap, podendo neste caso ter uma superfície de Fermi. Seguiremos a mesma estrutura do capítulo anterior, discutindo as propriedades do modelo e posteriormente generalizando as técnicas para calcular a energia para criar visons. Mostraremos como o gap de visons pode variar em função do tamanho da superfície de Fermi neste modelo.

4.1 O modelo Chua-Yao-Fiette (CYF)

No modelo CYF, temos spins $\frac{3}{2}$ que moram nos vértices de uma rede kagome (figura 4:1), tal que as interações são determinadas pelo tipo de plaqueta triangular na qual estão os pares de spins, ou seja, α ou β . Tratando-se de spin $\frac{3}{2}$, é conveniente usarmos uma representação dos operadores de spin S^x , S^y e S^z através das matrizes σ^i : matrizes 4×4

Figura 4.1: A rede kagome.

que respeitam algebra de Cli ord f i; j g = 2 ij e portanto, semelhante as matrizes de Pauli, têm autovalores 1. Elas são

$$\begin{aligned}
 1 &= \frac{1}{3} f S^y; S^z g & 2 &= \frac{1}{3} f S^z; S^x g \\
 3 &= \frac{1}{3} f S^x; S^y g & 4 &= \frac{1}{3} (S^x)^2 - (S^y)^2 \\
 5 &= (S^z)^2 - \frac{5}{4} & ab &= \frac{1}{2i} a; b :
 \end{aligned} \tag{4.1}$$

O Hamiltoniano do modelo CYF e

$$H = J \sum_{\langle ij \rangle} S_i^1 S_j^2 + J_r \sum_{\langle ij \rangle} S_i^3 S_j^4 + J^0 \sum_{\langle ij \rangle} S_i^{15} S_j^{25} + J_r^0 \sum_{\langle ij \rangle} S_i^{35} S_j^{45} + J_5 \sum_i S_i^5 \tag{4.2}$$

Temos os cinco parâmetros $J ; J_r ; J^0 ; J_r^0 ; J_5$, que possibilitam que o modelo tenha um espectro bastante rico. Perceba que tem simetria de rotação de 180 do eixo z e simetria de reversão temporal (que veremos em breve que se quebrada espontaneamente no estado fundamental), além da simetria de rotação por 3 (simetria C_3) da própria rede. Se ainda tivermos $J = J^0$ e $J_r = J_r^0$, o Hamiltoniano passa a ter simetria C_6 . Aqui, semelhante ao modelo de Kitaev de spins na rede honeycomb, também podemos definir operadores W_p associados as plaquetas tal que

$$[W_p; H] = 0; \quad 8p: \tag{4.3}$$

Entretanto, na rede kagome temos três tipos de plaquetas e seus operadores são

$$W = \frac{1}{2} (S_i^x S_j^x + S_j^x S_k^x) \tag{4.4}$$

$$W_r = \begin{matrix} 34 & 34 & 34 \\ i & j & k \end{matrix}, \quad (4.5)$$

$$W_7 = \begin{matrix} 23 & 14 & 23 & 14 & 23 & 14 \\ i & j & k & l & m & n \end{matrix}. \quad (4.6)$$

Vamos então introduzir uma representação das matrizes em termos de férmions de Majorana. No total, teremos seis férmions $\psi_i^1, \psi_i^2, \psi_i^3, \psi_i^4; c_i, d_i$, o que dobra o tamanho do espaço de Hilbert, portanto devemos restringir estados pertencentes ao espaço físico pelo vínculo

$$D_{ij} = \psi_i^1 \psi_j^2 - \psi_i^3 \psi_j^4; \quad (4.7)$$

com $D_i = \psi_i^1 \psi_i^2 - \psi_i^3 \psi_i^4; c_i, d_i$. As matrizes σ_i^a escritas em termos dos Majoranas com

$$\sigma_i^a = i \psi_i^a c_i; \quad (4.8)$$

$$\sigma_i^5 = i \psi_i^a d_i; \quad (4.9)$$

$$\sigma_i^5 = i c_i d_i; \quad (4.10)$$

com $a = 1; 2; 3; 4$ e o Hamiltoniano portanto se torna quadrático nos Majorana dinâmicos c_i e d_i :

$$H_u = i \sum_{h,j} J_{ij} \psi_{ij}^0 c_i c_j + J_{ij}^0 \psi_{ij}^0 d_i d_j + i J_5 \sum_i c_i d_i; \quad (4.11)$$

com $J_{ij} = J_r; J$, $J_{ij}^0 = J_r^0; J^0$; dependendo de onde moram os sítios j . Os ψ_{ij} são operadores associados aos links na rede, de forma semelhante aos do modelo de Kitaev. Eles têm autovalor ± 1 e são definidos como

$$\psi_{ij} = \begin{cases} \psi_i^1 \psi_j^2; & \text{se } h; j \in 2 \\ \psi_i^3 \psi_j^4; & \text{se } h; j \in 2r \end{cases} \quad (4.12)$$

e

$$[\psi_{ij}; H] = 0; \quad (4.13)$$

Assim, podemos trabalhar em uma única condição de calibre trocando todos os ψ_{ij} por seus autovalores $\psi_{ij} = \pm 1$. Perceba que H_u é mais complicado que H_u de (3.11) pois tem um termo que acopla férmions c_i e d_i . A consequência disso é que matrizes que trabalharemos mais adiante serão bem maiores, tanto no espaço real como de momentos.

Os autovalores dos W_p neste modelo também são $\omega_p = \pm 1$, mas são de nidos de

uma forma que distingue entre os diferentes tipos de plaquetas da rede kagome. Vamos especificar as configurações de fluxo em termos dos w_p 's, associados a cada plaqueta

$$w_p = e^{i \cdot p} = \prod_{h,j \in \partial p} i u_{ij} : \quad (4.14)$$

Perceba que, devido a paridade da quantidade de links em cada tipo de plaqueta e ao produto dos u_{ij} ser sempre 1, teremos

$$w_p = \begin{cases} 2; 2; 2; 2; 2; 2; & p = 6; \\ 0; & p = 7; \end{cases} \quad (4.15)$$

Além disso, sob reversão temporal (que corresponde a trocar o sinal de todos os fluxos das plaquetas triangulares mudam, mas os das hexagonais não!) w_r e w_g não mudam, mas w_b muda, quebrando a simetria de reversão temporal. Ou seja, um estado caracterizado pela configuração de fluxos $w_r; w_g; w_b$ deve ter a mesma energia que o seu conjugado por reversão temporal $w_r; w_g; -w_b$. É possível verificar que existem apenas quatro configurações não equivalentes por reversão temporal, são elas:

$$\begin{cases} 2; 2; 2; 2; 2; 2; & ; & 2; 2; 2; 2; 2; 2; & ; \\ 2; 2; 2; 0; & ; & 2; 2; 2; 0; & ; \end{cases} \quad (4.16)$$

indicadas na figura 4.2. Isto é mais uma complicação em relação ao modelo de Kitaev, em que havia apenas uma configuração de fluxos que corresponde ao estado fundamental. Como a rede kagome não é uma rede bipartida (como a honeycomb, por exemplo), o teorema de Lieb [34] não é válido aqui. Neste modelo, a configuração que corresponde ao estado fundamental depende do valor relativo das constantes t_r, t_g, t_b , como é demonstrado na figura 4.3. Podemos verificar que, por exemplo, quando $t_b = 0$, a configuração favorecida é $2; 2; 2; 0$. Devemos nos atentar a estes detalhes quando criarmos visons no modelo CYF, pois precisamos garantir que estamos em um regime das constantes de acoplamento e de fluxos que de fato dá o estado de menor energia.

(a) (b) (c) (d)

Figura 4.2: As quatro configurações de fluxo independentes na rede kagome.

Figura 4.3: Comparação entre as energias das quatro configurações de fluxo. Usamos o método numérico da subseção 3.1, com $L = 15$. Aqui, $J_{\uparrow,r} = J_{\downarrow,r}^0 = J$.

4.1.1 Dispersão de Majoranas e superfície de Fermi

A rede kagome é uma rede triangular com três sítios na base. Uma possível escolha de célula unitária primitiva é o triângulo \triangle . Podemos escolher os vetores e_1 e e_2 como na figura 4.4, tal que a posição de uma célula unitária qualquer é $R = me_1 + ne_2$. Cada vértice do triângulo pertence então a uma das três sub-redes que chamaremos A, B e C. O número de coordenação da kagome é $z_k = 4$ pois cada sítio de A, B ou C sempre faz duas ligações dentro da mesma célula unitária e as outras duas com sítios das células vizinhas. Tomaremos a convenção de que u_{ij} são positivos quando saem de um sítio A ou entram em um sítio C. A figura 4.5 mostra uma classificação¹ para os u_{ij} quanto as sub-redes dos sítios que estão naquele link e se estão na mesma célula unitária ou não. Sendo assim, a configuração $\frac{1}{2}; \frac{1}{2}; \frac{1}{2}$ pode ser reproduzida tomando todos os $u_{ij} = 1$. Já por exemplo a $\frac{1}{2}; \frac{1}{2}; 0$, difere apenas nos $u_{66} = -1$. É importante salientar que essa convenção não é útil para as configurações de fluxo em que $\phi = \pi$, pois

¹Essa classificação pode ser redundante com a de nomenclatura posterior dos u_{ij} , mas é bastante útil na prática para distinguir entre as diferentes configurações de fluxo e para quando falarmos de vortices.

para reproduz-las e necessário escolher uma célula unitária com pelo menos 6 sítios. É útil também definir os vetores r_i (combinações lineares dos e_i), que indicam três células vizinhas a cada outra célula unitária da rede, sendo $r_2 = e_1$, $r_3 = e_2$ e $r_1 = e_2 - e_1$. Então, por exemplo, cada sítio B de uma célula na posição R interage com um sítio de C dentro do mesmo e também com um outro no de posição $R + r_3$.

Figura 4.4: As três subredes A , B , e C , os vetores primitivos da rede kagome e_1 e e_2 e suas combinações lineares r_1 , r_2 e r_3 .

Figura 4.5: Os rótulos das seis diferentes ligações na rede kagome.

Considerando que a rede tem condições periódicas de contorno, nas quatro configurações de fluxo o sistema tem simetria de translação e podemos diagonalizar usando as transformadas de Fourier dos férmions c_i e d_i , que são idênticas a (3.14). Semelhante a (3.17), teremos aqui um $\mathcal{H}(k)$ que é uma matriz 6×6 , já que a rede tem três sítios na base e temos dois férmions de Majorana dinâmicos. Escolhendo, por exemplo, a configuração de fluxo $\frac{1}{2}; \frac{1}{2}; \frac{1}{2}$; explicitamente, temos

²Por este motivo vamos sempre preferir trabalhar com as configurações $\frac{1}{2}; \frac{1}{2}; \frac{1}{2}$ e $\frac{1}{2}; \frac{1}{2}; 0$, principalmente com a primeira.

$$h(k) = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ H_{cc} & H_{cd} \\ H_{cd}^\dagger & H_{dd} \end{pmatrix} A; \tag{4.17}$$

com

$$H_{cc} = i \begin{pmatrix} 0 & J + J_r e^{ik r_1} & J + J_r e^{ik r_2} \\ J + J_r e^{ik r_1} & 0 & J + J_r e^{ik r_3} \\ J + J_r e^{ik r_2} & J + J_r e^{ik r_3} & 0 \end{pmatrix} A; \tag{4.18}$$

$$H_{cd} = i \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ J_5 & 0 \\ 0 & J_5 \\ 0 & 0 & J_5 \end{pmatrix} A; \tag{4.19}$$

e H_{dd} é idêntica a H_{cc} apenas trocando as J_r por J_r^0 . A dispersão $\epsilon(k)$ de Majoranas nos dá seis bandas, mas que são vinculadas por $\epsilon(k) = \epsilon^*(k)$; com $b_2 \in [1; 6]$.

Para certos grupos de parâmetros, podemos ter superfície de Fermi, por exemplo, na configuração de fluxo $\frac{1}{2}; \frac{1}{2}$. A figura 4.6 mostra um caso bem geral, reproduzido de [19], em que a dispersão permite uma superfície de Fermi. A banda de energia ultrapassa o nível de Fermi em três regiões diferentes, formando "bolsoes" ao redor dos pontos K (ou K^0) na zona de Brillouin, o que é esperado pela simetria C_3 da rede. Caso houvesse uma simetria maior, com os J_r todos iguais, poderíamos ter bolsoes nos 6 vértices do hexágono.

(a)

(b)

Figura 4.6: Dispersão dos Majoranas obtida com as constantes de acoplamento $J_c = 1; 0$; $J_r = 0; 3$; $J^0 = 0; 8$; $J_r^0 = 0; 5$; $J_5 = 1; 4$. A configuração de fluxo usada foi $\frac{1}{2}; \frac{1}{2}$. (a): Corte das bandas de energia para $\mu = 0$. (b): Superfície de Fermi.

4.2 Visons no modelo CYF

Para pensar em visons nesse modelo, primeiro temos que lembrar que na rede Kagome há três tipos diferentes de plaquetas. Vamos a princípio olhar para a criação de visons entre $(\uparrow; \uparrow)$ adjacentes: isso pode ser obtido trocando o sinal de um único α_5 qualquer da rede, como na figura 4.7. Vamos trabalhar na configuração $(\uparrow; \uparrow)$, já que o nosso principal objetivo é encontrar alguma relação entre o gap dos visons e o tamanho da superfície de Fermi.

Figura 4.7: Criação de um par de vortices entre $(\uparrow; \uparrow)$ na configuração $(\uparrow; \uparrow)$. O link vermelho troca de sinal, alterando o fluxo nas duas plaquetas destacadas em cinza.

4.3 Discussão de Resultados

Aqui faremos uma discussão dos resultados obtidos ao tentar responder algumas perguntas sobre visons neste modelo. Para isto, vamos usar as mesmas técnicas usadas para encontrar o gap de visons no modelo de Kitaev: diagonalização numérica do Hamiltoniano no espaço real e cálculo analítico do gap usando funções de Green. As duas técnicas são facilmente generalizáveis para o modelo CYF, com apenas o cuidado de tratar-se de uma rede mais complexa, com mais subredes e três tipos de plaquetas, e que teremos um Hamiltoniano no espaço dos momentos que corresponde a uma matriz 6×6 , bem maior que no caso do modelo de Kitaev.

O leitor pode pensar que, semelhante ao modelo anterior, o grupo de parâmetros mais razoável para começar a trabalhar seria o caso isotópico, talvez apenas com $\delta = 0$. Isto de fato simplifica o problema pois teremos que trabalhar com duas matrizes 3×3 , H_{cc} e H_{dd} , ao invés de uma 6×6 . Entretanto, a dispersão neste caso nos dá uma banda chata na energia igual a zero. Isso não é pouco interessante para entendermos a relação entre visons e a superfície de Fermi, quanto é péssimo para o cálculo do phase shift pois

as funções de Green terão singularidades em $E = 0$.

O grupo de parâmetros base que será utilizado é $d_r = J_r^0 = 1; 0$ e $J = J^0 = 0; 5$, com J_5 variável. As superfícies de Fermi correspondentes a estes regimes estão no apêndice A. Veja que neste caso, mudar apenas o coeficiente para modular o tamanho da superfície de Fermi. Essa faixa de valores para J_5 foi escolhida pois, primeiro, o estado fundamental está na configuração de spins $\uparrow\downarrow; \uparrow\downarrow$. Além disso, temos um ponto bastante interessante em $J_5 = 0; 865$, em que os bolsões, além de estarem nos seis vértices da zona de Brillouin, são tão pequenos que podemos comparar com a dispersão de cones de Dirac do modelo Kitaev³. Isso é excelente para nos dar um ponto de partida. Variando J_5 partindo deste ponto, tanto crescendo quanto decrescendo, faz com que as superfícies de Fermi aumentem para pequenos bolsões circulares. Note que quando nos afastamos muito do regime $J_5 = 0; 865$ os bolsões deixam de ser aproximadamente circulares. Nosso critério para definir o tamanho das superfícies de Fermi e definir os vetores de onda de Fermi é como metade da distância entre as bordas dos bolsões no total que quando esses são aproximadamente circulares coincidem com os raios dos círculos. A figura 4:8 mostra as bandas ϵ_3 e ϵ_4 para o caso $J_5 = 0; 865$ e um outro com uma superfície de Fermi maior, de $J_5 = 0; 500$. Estas bandas sempre se tocam em momentos nos vértices da zona de Brillouin, entretanto veja que para $J_5 = 0; 865$ o toque das bandas é sempre no nível de Fermi, semelhante a dispersão da figura 4:3. Já para $J_5 = 0; 500$, este toque ocorre em energias acima ou abaixo de $E = E_F = 0$, provocando a existência de uma superfície de Fermi maior.

A figura 4:9 mostra como dk_F varia em função de J_5 . Note que há uma relação quase linear, com k_F crescendo quando nos afastamos de $J_5 = 0; 865$. Ajustes lineares feitos à esquerda e à direita deste valor mostram variações de k_F com J_5 com coeficientes lineares parecidos. Se há um comportamento monótono das dispersões com k_F , ele deve se manifestar tanto à esquerda, quanto à direita de $J_5 = 0; 865$. Limitamo-nos ao intervalo $0; 400 < J_5 < 1; 450$ pois, para além deste, o estado fundamental não está mais na configuração de spins $\uparrow\downarrow; \uparrow\downarrow$.

³Um valor mais preciso para o regime em que a dispersão se assemelha mais ainda com os cones de Dirac e simetria C_6 do modelo de Kitaev isotópico é $J_5 = 0; 8660254$.

Figura 4.8: Bandas ϵ_3 e ϵ_4 na BZ para dois regimes de parâmetros. Com $J_5 = 0;865$, vemos uma dispersão semelhante a do regime isotópico do modelo de Kitaev, com as bandas se tocando nos 6 vértices da BZ na energia de Fermi. Com $J_5 = 0;500$, as bandas se deslocam e cruzam a energia de Fermi em 3 regiões.

Figura 4.9: Tamanho da superfície de Fermi (quantificada pelo χ_F) em função de J_5 . Os ajustes lineares são mostrados.

4.3.1 Resultados numéricos

Fizemos diagonalizações exatas dos Hamiltonianos no espaço real com redes de tamanho finito, com L variando entre 10 e 70, sendo L^2 o número de células unitárias da rede kagome. Para o caso $J_5 = 0;865$, observando a figura 4.8a, constatamos um comportamento bastante semelhante a 4.8a. O efeito de tamanho finito para quando L é múltiplo de 3 também comparece aqui, mas mesmo assim também observamos que as duas curvas, para $\chi_F^{(n)}$ com $L \bmod 3 = 0$ (vermelha) e $L \bmod 3 \neq 0$ (azul), devem convergir para valores bem próximos e parece razoável fazer extrapolações para $L \rightarrow \infty$. Considerando então os gaps calculados em redes a partir de $L = 30$ (assumindo que os valores para em redes muito pequenas são menos confiáveis) encontramos $\chi_F = 0;1514$ para a curva com L múltiplo de 3 e $\chi_F = 0;1519$ para os demais valores de L . Tomaremos

então a média entre esses dois como o valor numérico⁽ⁿ⁾ final do gap para este caso.

Realizamos a mesma análise para outros cinco casos com superfícies de Fermi maiores, que estão mostrados em 14. Verificamos que o comportamento diferente do gap para quando L é múltiplo de 3 ainda está presente, mas observamos também aparentes oscilações do comportamento das curvas, que nos desmotivam a fazer a mesma extrapolação que fizemos para o caso anterior. Estas oscilações devem ocorrer quando níveis de energia discretos cruzam o nível de Fermi. Em [40] há uma discussão sobre oscilações desta mesma natureza no efeito Casimir na rede: A energia de Casimir oscila com período que depende de um parâmetro de vetor de onda que característico da relação de dispersão. No nosso modelo, a mistura de efeitos de tamanho finito dificulta que armemos o período exato das oscilações, mas estas parecem ser de menor comprimento quanto maior a superfície de Fermi correspondente. A tabela 4 mostra valores de J_5 desses casos e seus respectivos $\epsilon_F = \frac{2}{k_F}$. De modo geral, para superfícies de Fermi de tamanhos muito grandes, os valores numéricos de ϵ_v oscilam de forma bastante caótica. Se o comprimento dessas oscilações for de um valor próximo a ϵ_F , então quanto maior a superfície de Fermi, menos chances os valores numéricos serão. Evidentemente, entendemos o caso $\epsilon_F = 0,865$ como tendo $\epsilon_F \rightarrow 1$, por isso não observamos oscilações. Portanto qualquer critério que se escolha para definir, nesses três últimos casos, um valor numérico⁽ⁿ⁾, nunca vai ser conveniente. Vamos simplesmente tomar uma média dos últimos três valores: os de $L = 68; 69; 70$. Estes estão na tabela 4

J_5	k_F	ϵ_F	$\epsilon_v^{(n)}$
0; 500	0; 780	08; 06	0; 0509
0; 600	0; 554	11; 34	0; 1091
0; 700	0; 340	18; 48	0; 1396
0; 750	0; 236	26; 62	0; 1478
0; 800	0; 133	47; 24	0; 1509
0; 865	0; 002	3141	0; 1517

Tabela 4.1: Valores do gap do par de visons no modelo CYF obtidos tomando a média dos dados para redes com tamanhos $L = 68; 69; 70$ e, para $J_5 = 0; 865$, fazendo uma extrapolação com $L \rightarrow 1$. Também mostramos os parâmetros associados ao tamanho da superfície de Fermi (k_F e ϵ_F) para cada regime.

Veja que em algumas das figuras 40, tanto a frequência como a amplitude com que os $\epsilon_v^{(n)}$ variam em função de L nos deixam pouco entusiasmados com o método numérico. É importante salientar também o custo computacional para diagonalizar as

matrizes, cujo tamanho é $6L^2 \times 6L^2$. Tudo isto nos motiva partir para o cálculo analítico, feito generalizando o desenvolvimento feito no capítulo anterior, que nos dá um valor do gap de visons no limite termodinâmico, para depois voltar e comparar com os valores numéricos.

(a) $J_5 = 0; 865$

(b) $J_5 = 0; 800$

(c) $J_5 = 0; 750$

(d) $J_5 = 0; 700$

(e) $J_5 = 0; 600$

(f) $J_5 = 0; 500$

Figura 4.10: Gap para criar par de visons adjacentes em função do tamanho do sistema para diferentes valores de J_5 . Os pontos vermelhos são os em que múltiplo de 3, já os azuis são para os demais valores de

4.3.2 Resultados analíticos

A conta analítica da seção 34 para o gap de visons adjacentes pode ser facilmente generalizada para o modelo CYF. Usando as convenções de célula unitária e índices de subrede estabelecidas anteriormente para a rede kagome, se criarmos um par de visons entre (7;), estaremos trocando o sinal de um link que conecta o sítio da subrede B com um da C numa mesma célula unitária. Assim, a matriz do potencial de espalhamento local deve ser

$$V = \begin{matrix} & \begin{matrix} 0 \\ \vdots \\ 0 \end{matrix} & \begin{matrix} 0 \\ 0 \\ 2iJ \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{matrix} & \begin{matrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{matrix} & \begin{matrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 2iJ^0 \end{matrix} & \begin{matrix} 1 \\ \vdots \\ 0 \end{matrix} \\ \begin{matrix} \vdots \\ \vdots \\ \vdots \\ \vdots \\ \vdots \\ \vdots \end{matrix} & & & & & \end{matrix} : \quad (4.20)$$

Usando (417) Podemos escrever nossa função de Green livre local

$$g_0(z) = \frac{1}{(2\pi)^2} \int_0^{2\pi} dk_1 \int_0^{2\pi} dk_2 \frac{1}{z - \epsilon(k)}; \quad (4.21)$$

que agora também é uma matriz 6 x 6. Assim, semelhante a (43), nosso gap de visons analítico no modelo CYF pode ser encontrado calculando

$$v = - \int_0^{E_{\max}} v(E) dE \quad (4.22)$$

e

$$v(E) = \text{Im} \int \ln[\det(I - V g(E + i\epsilon))] g; \quad (4.23)$$

Para os mesmos regimes de parâmetros da seção anterior, calculamos os valores analíticos do gap do par de visons entre (7;) no modelo CYF. Semelhante ao que fizemos para o modelo de Kitaev, aqui realizamos as integrações em k_2 de (4.21) usando o método numérico de Gauss-Kronrod, com $n = 4$ e passo 0.01. As funções de Green locais têm muitos elementos de matriz, mas os elementos diagonais, por exemplo, têm todos o mesmo per I. A figura 4.11 mostra os elementos g_{22} . Aqui observamos singularidades de Van Hove [41] nas densidades de estados, que podem ser visualizadas nas

partes imaginárias das ϵ_{22} . Essas são singularidades que aparecem quando existem pontos de sela na estrutura de bandas. Para $J_5 = 0;865$ existem apenas quatro singularidades de Van Hove. A medida que diminuímos J_5 , o movimento das bandas faz com que surjam novas singularidades, que vão se separando. Veja a [fig. 2](#): deve haver pontos de sela em todas as bandas nas regiões $k_x = \frac{2}{3}$ (bordas da zona de Brillouin). Para $J_5 = 0;865$, as bandas ϵ_4 e ϵ_5 (ou ϵ_2 e ϵ_3) se sobrepõem perfeitamente nas proximidades de $k_y = \frac{2}{3}$ (e exatamente em $k_x = 0;865!$), de maneira que se haja de fato quatro pontos de sela. Quando variamos J_5 esses trechos das bandas se separam, aumentando a quantidade de pontos de sela para seis. Observe também como a densidade de estados ao redor de $\epsilon = 0$ vai aumentando com J_5 decrescendo, uma assinatura do aumento da superfície de Fermi nesta direção.

Os phase shifts para esses seis regimes estão na [fig. 12](#). Os ϵ dos v são parecidos, mas o caso $J_5 = 0;500$ se destaca por ter pontos de máximo e mínimo de amplitude semelhante. Como v é uma integral do phase shift este ϵ de v resulta num gap bem menor que os demais. Os valores analíticos $\epsilon_v^{(a)}$ destes regimes citados estão na [tabela 2](#). Calculamos também valores de $\epsilon_v^{(n)}$ e $\epsilon_v^{(a)}$ para outros regimes, com $J_5 > 0;865$, para ver se há variação monotônica do gap dos visons com o tamanho das superfícies de Fermi. Esses mesmos dados estão também na [fig. 3.4](#)

Temos então, no modelo CYF, uma faixa de regimes de parâmetros em que o gap de visons varia monotonicamente com o tamanho da superfície de Fermi. De acordo com nossos resultados, o gap para criar vórtices adjacentes é máximo quando $J_5 = 0;865$ e diminui quando k_F aumenta. É importante notar que, nestes regimes, as direções em que k_F aumenta também nos aproximam dos limites em que a configuração de $ux_0 = \frac{1}{2}; \frac{1}{2}$; ainda nos dá o estado fundamental. Se crássemos visons fora desses limites, não estaremos calculando um valor que faz sentido físico com a energia de um estado excitado, que pode até ser negativa. Por isto, pode fazer sentido que o gap para $J_5 = 1;450$ e $J_5 = 0;500$ sejam tão pequenos, mas o fato de ϵ ser máximo quando $k_F = 0$ é uma evidência que corrobora muito que o valor do gap decresce com o tamanho da superfície de Fermi.

(a) $J_5 = 0; 865$

(b) $J_5 = 0; 800$

(c) $J_5 = 0; 750$

(d) $J_5 = 0; 700$

(e) $J_5 = 0; 600$

(f) $J_5 = 0; 500$

Figura 4.11: Partes real e imaginaria do elemento g_{22} da funcao de Green local (41).

(a) $J_5 = 0; 865$

(b) $J_5 = 0; 800$

(c) $J_5 = 0; 750$

(d) $J_5 = 0; 700$

(e) $J_5 = 0; 600$

(f) $J_5 = 0; 500$

Figura 4.12: Phase shift para os seis regimes de parâmetros analisados. O deslocamento das singularidades na funcao de Green quando ϵ diminui faz aparecerem um pico e um vale entre $E = 0; 5$ e $E = 1; 5$.

4.3.3 Visions entre diferentes plaquetas

Outra pergunta que podemos fazer e se ha diferenca entre g_{rr} para criar visions entre o par de plaquetas $(7;)$ e o par $(7; r)$. Vamos usar o mesmo regime dos r , que pode ser interessante pois $J = 2J_r$ e $J^0 = 2J_r^0$. Pelo metodo numerico no espaco real,

J_5	k_F	$\bar{v}^{(a)}$	$\bar{v}^{(n)}$
0; 500	0; 780	0; 0497	0; 0509
0; 600	0; 554	0; 1073	0; 1091
0; 700	0; 340	0; 1394	0; 1396
0; 750	0; 236	0; 1466	0; 1478
0; 800	0; 133	0; 1499	0; 1509
0; 865	0; 002	0; 1521	0; 1517
1; 030	0; 325	0; 1451	0; 1463
1; 230	0; 728	0; 1030	0; 1032
1; 330	0; 930	0; 0657	0; 0652
1; 450	1; 194	0; 0111	0; 0129

Tabela 4.2: Valores numericos e analiticos para o gap de visons adjacentes no modelo CYF na faixa de regimes de parâmetros; $600 \leq J_5 \leq 1; 450$, com os respectivos k_F .

(a)

(b)

Figura 4.13: (a): Gap do par visons em funcao de k_F . (a): gap do par de visons em funcao de J_5 nos regimes estudados. A ocorrência de um máximo em $J_5 = 0; 865$ ou $k_F = 0$ e mostrada.

podemos criar um gap entre $(7; r)$, semelhante ao processo da figura 4.7, mas trocando o sinal de u_{u_6} qualquer na rede.

As figuras 4.14 mostram os valores numericos do gap em funcao de L calculados com $J_5 = 0; 865$. O comportamento dos dados com L multiplo de 3 ou não são bem semelhantes nos dois casos, com os valores formando curvas suaves que claramente convergem para um valor assintótico. Esta semelhança era esperada, uma vez que estamos no regime de parâmetros e conseqüentemente o tamanho da superficie de Fermi. As curvas de L são, e claro, as mesmas de 4.10a. Extrapolando as curvas de 4.14b por polinômios em L^{-1} , para as curvas azul e vermelha e tomando a media dos valores obtidos, encontramos $\bar{v}^{(n)} = 0; 1046$. Este regime de parâmetros, apesar de ser o mais simples que podemos investigar, ilustra bem o que acontece de modo geral para $J_a = J^0 > J_r = J_r^0$, em redes

de tamanhos suficientemente grandes:

$$\nu(7;) > \nu(7; r): \quad (4.24)$$

Podemos usar nosso método analítico para verificar o resultado. Se quisermos utilizar a mesma forma da matriz (420), na prática, fazemos a troca $J_r \rightarrow J_r^0$, que é basicamente uma rotação por $\frac{\pi}{6}$ na rede. Isto é importante pois esta matriz, de forma condizente com nossa definição de $\epsilon(k)$, foi obtida com a escolha do triângulo como célula unitária. Os elementos diagonais das funções de Green locais para os dois casos são iguais a (411a). Os phase shifts para os dois casos estão na figura 14. Usando os mesmos métodos da seção anterior para calcular as integrais (424) e (422), o gap entre $\nu(7; r)$ encontrado no limite termodinâmico é $\nu^{(a)} = 0,1078$, que também concorda com (4:24). No limite termodinâmico, estes valores seriam idênticos para pares com qualquer um dos três ou r adjacentes a um hexágono, uma vez que dependem só da diferença entre os $J_{,r}$. Obviamente, para o caso em que todos os $J_{,r}$ são iguais, não haveria diferença entre $\nu(7;)$ e $\nu(7; r)$.

(a)

(b)

Figura 4.14: Valores numéricos do gap do par de visons em função do tamanho do sistema para os pares $(7;)$ e $(7; r)$.

(a) $(7;)$ (b) $(7; r)$

Figura 4.15: Phase shifts obtidos no cálculo do gap para pares de plaquetas diferentes.

Captulo 5

Conclusões e Perspectivas

Nós avaliamos duas técnicas para calcular o par de visons em dois modelos de líquido de spin com dispersões de Majorana sem gap. O método analítico para calcular o gap no limite termodinâmico, inspirado por [16], foi uma excelente aplicação dos conceitos de teoria de espalhamento e de muitos corpos do capítulo 2, principalmente estudados em [25, 30]. O método de diagonalização numérica no espaço real, embora tenha sofrido com diferentes efeitos de tamanhos finitos das redes, se mostrou bastante confiável para redes suficientemente grandes, quando comparamos os valores obtidos com os do método analítico. Conseguimos aplicar as duas técnicas ao modelo CYF [18], encontrando uma faixa de regimes de parâmetros do Hamiltoniano em que o gap tem valor máximo quando a dispersão dos Majoranas se assemelha aos cones de Dirac do modelo de Kitaev, mas decresce quando variamos estes parâmetros para aumentar o tamanho da superfície de Fermi. Em [42] há uma discussão sobre o modelo de Kitaev submetido a outras interações, no qual o fechamento do gap de visons é um critério para separação entre a fase QSL e outras fases. No modelo CYF, vimos que o gap de visons fecha quando vamos dos regimes de parâmetros que dão o estado fundamental na configuração $\frac{1}{2}$; e aumentamos a superfície de Fermi. Isto pode indicar que QSLs com superfícies de Fermi muito grandes são difíceis de estabilizar.

O espectro do modelo CYF é bastante rico. Pode ser interessante tentar calcular o gap de visons em uma das outras três configurações de fluxo, já que estas permitem dispersões de Majoranas diversas. Um caso interessante é a superfície de Fermi como a da figura 3 de [43], que é permitida quando tomamos alguns dos parâmetros de acoplamento negativos. Esta superfície de Fermi de "guarda chuva" se distingue das redondas

e pequenas que lidamos neste trabalho: ela não tem curvatura e isto pode acarretar em comportamentos bem diferentes de algumas propriedades físicas, como as correlações de spin [44]. Uma superfície de Fermi deste tipo pode ser obtida no modelo CYF com os parâmetros $\mu = 1; \mu = 1; \mu = 1; \mu = 0$, mas tem estado fundamental na configuração de vórtices $(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}; 0)$, que como mencionamos anteriormente, precisa ser escrita em uma rede de célula unitária com pelo menos 6 sítios.

De modo geral, uma das dificuldades do trabalho foi tentar calcular o gap em outras configurações de vórtice, que não a $(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}; 0)$. Para estudar como ν varia com a superfície de Fermi, já que nesta configuração era o suficiente, mas há mais para se explorar. Uma alternativa pode ser acrescentar no Hamiltoniano termos que deslocam as energias dos estados fundamentais de cada configuração de vórtice sem alterar a dispersão de Majoranas. Esses termos podem ser somas sobre operadores de plaquetas que, na prática, vão somar ou subtrair constantes nas energias deslocando o estado fundamental para a configuração desejada. Veja por exemplo a equação (5) de [18]. Com algo assim, talvez possamos calcular o gap de vórtices em uma configuração de vórtices qualquer, ainda usando a $(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}; 0)$ como plano de fundo. Entretanto, o valor calculado para o gap, por exemplo, para o caso da superfície de Fermi de "guarda chuva", usando os dois métodos, foi bem diferente. Sendo assim, o problema não deve ser resolvido somando uma mesma constante nos dois casos, mas talvez ajustando os operadores de plaquetas considerando as nas quais vórtices foram criados.

Outro problema que pode ser atacado no futuro é entender como é a dependência da energia em função da distância de separação entre dois vórtices. Em [45] há um resultado, pelo mesmo método numérico da subseção 3.1, para a energia do par de vórtices no modelo de Kitaev quando eles são separados em alguma direção na rede honeycomb. Para o determinado regime de parâmetros, a energia oscila e converge para um valor finito com a distância de separação. Pode ser interessante questionar se, para um modelo com superfície de Fermi, a energia entre os vórtices em função da distância é do tipo lei de potência com oscilações que dependem de ν , em analogia a oscilações de Friedel [30, 44]. Tentamos reproduzir isso no modelo CYF, mas os efeitos de tamanho finito são fortes: para diferentes tamanhos de rede, as energias em função da distância entre dois vórtices variam muito, dificultando alguma conclusão.

Expandir o método analítico para o cálculo do gap de vórtices espacialmente sepa-

rados também pode ser algo interessante, porém bastante complicado. Isso implicaria em usar um potencial que não é mais local, que como vimos na seção 6, é requisito fundamental para escrever uma expressão exata para a matriz $\Gamma(E)$ e conseqüentemente para o gap de visons. Por fim, seria interessante entender fisicamente o motivo do gap dos visons diminuir com o tamanho da superfície de Fermi. Usando a interpretação do problema de criar visons como um problema de espalhamento, talvez seja possível formular uma expressão analítica para o gap como função de k_F em um modelo com superfície de Fermi mais simples.

Referências Bibliográficas

- [1] L. D. Landau, "On the theory of phase transitions," *Zh. eksp. teor. Fiz* vol. 7, no. 19-32, p. 926, 1937.
- [2] E. Manousakis, "The spin- $\frac{1}{2}$ heisenberg antiferromagnet on a square lattice and its application to the cuprous oxides," *Reviews of Modern Physics* vol. 63, no. 1, p. 1, 1991.
- [3] Y. Zhou, K. Kanoda, and T.-K. Ng, "Quantum spin liquid states," *Reviews of Modern Physics* vol. 89, no. 2, p. 025003, 2017.
- [4] P. W. Anderson, "Resonating valence bonds: A new kind of insulator?" *Materials Research Bulletin* vol. 8, no. 2, pp. 153-160, 1973.
- [5] P. W. Anderson, "The resonating valence bond state in La_2CuO_4 and superconductivity," *science* vol. 235, no. 4793, pp. 1196-1198, 1987.
- [6] S. R. White and A. Chernyshev, "Néel order in square and triangular lattice heisenberg models," *Physical review letters* vol. 99, no. 12, p. 127004, 2007.
- [7] L. Savary and L. Balents, "Quantum spin liquids: a review," *Reports on Progress in Physics* vol. 80, no. 1, p. 016502, 2016.
- [8] S. Sachdev, "Quantum phase transitions," *Physics world* vol. 12, no. 4, p. 33, 1999.
- [9] X.-G. Wen, "Mean-field theory of spin-liquid states with finite energy gap and topological orders," *Physical Review B* vol. 44, no. 6, p. 2664, 1991.
- [10] A. Kitaev, "Anyons in an exactly solved model and beyond," *Annals of Physics* vol. 321, pp. 2-111, jan 2006.

- [11] Y. Matsuda, T. Shibauchi, and H.-Y. Kee, "Kitaev quantum spin liquids," [arXiv preprint arXiv:2501.05608](#) 2025.
- [12] H. Takagi, T. Takayama, G. Jackeli, G. Khaliullin, and S. E. Nagler, "Concept and realization of kitaev quantum spin liquids," [Nature Reviews Physics](#) vol. 1, no. 4, pp. 264{280, 2019.
- [13] G. Jackeli and G. Khaliullin, "Mott insulators in the strong spin-orbit coupling limit: From heisenberg to a quantum compass and kitaev models," [Physical review letters](#) vol. 102, no. 1, p. 017205, 2009.
- [14] K. Plumb, J. Clancy, L. Sandilands, V. V. Shankar, Y. Hu, K. Burch, H.-Y. Kee, and Y.-J. Kim, " -rucl 3: A spin-orbit assisted mott insulator on a honeycomb lattice," [Physical Review B](#) vol. 90, no. 4, p. 041112, 2014.
- [15] B. S. Shastry and D. Sen, "Majorana fermion representation for an antiferromagnetic spin-chain," [Physical Review B](#) vol. 55, no. 5, p. 2988, 1997.
- [16] A. Panigrahi, P. Coleman, and A. Tsvelik, "Analytic calculation of the vison gap in the kitaev spin liquid," [Physical Review B](#) vol. 108, no. 4, p. 045151, 2023.
- [17] M. Barkeshli, H. Yao, and S. A. Kivelson, "Gapless spin liquids: Stability and possible experimental relevance," [Physical Review B|Condensed Matter and Materials Physics](#) vol. 87, no. 14, p. 140402, 2013.
- [18] V. Chua, H. Yao, and G. A. Fiete, "Exact chiral spin liquid with stable spin fermi surface on the kagome lattice," [Physical Review B](#) vol. 83, no. 18, p. 180412, 2011.
- [19] H.-H. Lai and O. I. Motrunich, "Power-law behavior of bond energy correlators in a kitaev-type model with a stable parton fermi surface," [Physical Review B](#) vol. 83, no. 15, p. 155104, 2011.
- [20] H. Yao, S.-C. Zhang, and S. A. Kivelson, "Algebraic spin liquid in an exactly solvable spin model," [Physical review letters](#) vol. 102, no. 21, p. 217202, 2009.
- [21] K. Tikhonov and M. Feigel'man, "Quantum spin metal state on a decorated honeycomb lattice," [Physical review letters](#) vol. 105, no. 6, p. 067207, 2010.

- [22] G. Baskaran, G. Santhosh, and R. Shankar, \Exact quantum spin liquids with fermi surfaces in spin-half models,"[arXiv preprint arXiv:0908.1614](#), 2009.
- [23] A. Cracknell and K. C. Wong, \Fermi surface. its concept, determination, and use in the physics of metals," 1973.
- [24] S. H. Simon, *The Oxford solid state basics* OUP Oxford, 2013.
- [25] S. Doniach and E. Sondheimer, *Green's functions for solid state physicists* World Scientific, 1998.
- [26] A. Altland and B. D. Simons, *Condensed matter field theory* Cambridge university press, 2010.
- [27] J. J. Sakurai and J. Napolitano, *Modern quantum mechanics* Cambridge University Press, 2020.
- [28] J. Friedel, \Xiv. the distribution of electrons round impurities in monovalent metals," [The London, Edinburgh, and Dublin Philosophical Magazine and Journal of Science](#) vol. 43, no. 337, pp. 153{189, 1952.
- [29] F. Fumi, \Cxvi. vacancies in monovalent metals,"[The London, Edinburgh, and Dublin Philosophical Magazine and Journal of Science](#), vol. 46, no. 380, pp. 1007{1020, 1955.
- [30] G. D. Mahan, *Many-particle physics* Springer Science & Business Media, 2013.
- [31] B. S. DeWitt, \Transition from discrete to continuous spectra," [Physical Review](#) vol. 103, no. 5, p. 1565, 1956.
- [32] M. Maslov, M. Lemeshko, and A. G. Volosniev, \Impurity with a resonance in the vicinity of the fermi energy," [Physical Review Research](#) vol. 4, no. 1, p. 013160, 2022.
- [33] W. E. Liu, Z.-Y. Shi, M. M. Parish, and J. Levinsen, \Theory of radio-frequency spectroscopy of impurities in quantum gases,"[Physical Review A](#) vol. 102, no. 2, p. 023304, 2020.
- [34] E. H. Lieb, \Flux phase of the half- lled band," [Physical review letters](#) vol. 73, no. 16, p. 2158, 1994.

- [35] G. Baskaran, S. Mandal, and R. Shankar, "Exact results for spin dynamics and fractionalization in the kitaev model," [Physical review letters](#) vol. 98, no. 24, p. 247201, 2007.
- [36] A. H. Castro Neto, F. Guinea, N. M. Peres, K. S. Novoselov, and A. K. Geim, "The electronic properties of graphene," [Reviews of modern physics](#) vol. 81, no. 1, pp. 109{162, 2009.
- [37] F. Zschocke and M. Vojta, "Physical states and finite-size effects in kitaev's honeycomb model: Bond disorder, spin excitations, and nmr line shape," [Physical Review B](#), vol. 92, no. 1, p. 014403, 2015.
- [38] A. Y. Kitaev, "Fault-tolerant quantum computation by anyons," [Annals of physics](#) vol. 303, no. 1, pp. 2{30, 2003.
- [39] J. Helton, K. Matan, M. Shores, E. Nytko, B. Bartlett, Y. Yoshida, Y. Takano, A. Suslov, Y. Qiu, J.-H. Chung, et al., "Spin dynamics of the spin-1/2 kagome lattice antiferromagnet $\text{ZnCu}_3(\text{OH})_6\text{Cl}_2$," , vol. 98, no. 10, p. 107204, 2007.
- [40] K. Nakayama and K. Suzuki, "Dirac/weyl-node-induced oscillating casimir effect," [Physics Letters B](#) vol. 843, p. 138017, 2023.
- [41] L. Van Hove, "The occurrence of singularities in the elastic frequency distribution of a crystal," [Physical Review](#) vol. 89, no. 6, p. 1189, 1953.
- [42] S.-S. Zhang, G. B. Habsz, W. Zhu, and C. D. Batista, "Variational study of the kitaev-heisenberg-gamma model," [Physical Review B](#) vol. 104, no. 1, p. 014411, 2021.
- [43] B. Bauer, B. P. Keller, S. Trebst, and A. W. Ludwig, "Symmetry-protected non-fermi liquids, kagome spin liquids, and the chiral kondo lattice model," [Physical Review B](#), vol. 99, no. 3, p. 035155, 2019.
- [44] R. G. Pereira and S. Bieri, "Gapless chiral spin liquid from coupled chains on the kagome lattice," [SciPost Physics](#) vol. 4, no. 1, p. 004, 2018.

- [45] V. Lahtinen, "Interacting non-abelian anyons as majorana fermions in the honeycomb lattice model," [New Journal of Physics](#) vol. 13, no. 7, p. 075009, 2011.

Apêndice A

Catálogo de Superfícies de Fermi

Figura A.1: corte das Bandas de energia no modelo CYF com $\mu = 0$, obtidas variando J_5 com os demais acoplamentos sendo $(t_1, t_2, t_3, t_4, t_5) = (1, 0, 0, 5, 1; 0, 0, 5, 1; 0, 0, 5g)$

Figura A.2: corte das Bandas de energia no modelo CYF com $\alpha = 0$, obtidas variando J_5 com os demais acoplamentos sendo $(J_1, J_2, J_3, J_4, J_6) = (0, 0, 0, 5, 1; 0, 0, 5g)$

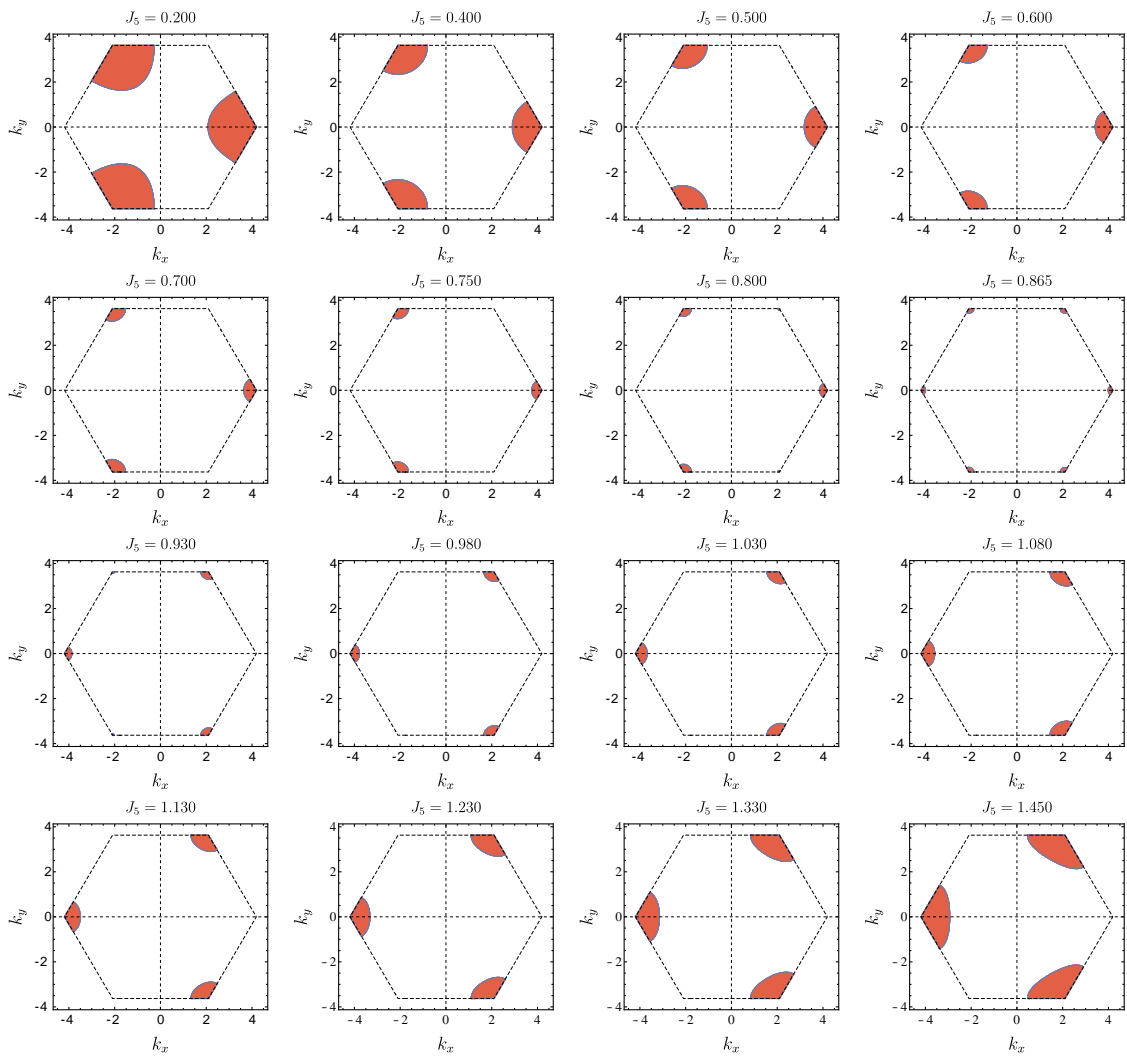


Figura A.3: Superfícies de Fermi obtidas variando J_5 com os demais acoplamentos sendo $t_1; 0; 0; 5; 1; 0; 0; 5g$