

UNIVERSIDADE FEDERAL DE VIÇOSA

**EXPLORANDO O TRANSPORTE DE SPIN ENTRE UM METAL NORMAL E O
MODELO DE KITAEV**

Lucas Vigiano dos Santos
Magister Scientiae

**VIÇOSA - MINAS GERAIS
2025**

LUCAS VIGIANO DOS SANTOS

**EXPLORANDO O TRANSPORTE DE SPIN ENTRE UM METAL NORMAL E O
MODELO DE KITAEV**

Dissertação apresentada à Universidade Federal de Viçosa, como parte das exigências do Programa de Pós-Graduação em Física, para obtenção do título de *Magister Scientiae*.

Orientador: Antonio Ribeiro de Moura

**VIÇOSA - MINAS GERAIS
2025**

**Ficha catalográfica elaborada pela Biblioteca Central da Universidade
Federal de Viçosa - Campus Viçosa**

T

S237e Santos, Lucas Vigiano dos, 2000-
2025 Explorando o transporte de spin entre um mental normal e o
modelo de Kitaev: correntes de spin em fases de líquido de spin /
Lucas Vigiano dos Santos. – Viçosa, MG, 2025.
1 dissertação eletrônica (83 f.): il. (algumas color.).

Inclui apêndices.

Orientador: Antonio Ribeiro de Moura.

Dissertação (mestrado) - Universidade Federal de Viçosa,
Departamento de Física, 2025.

Referências bibliográficas: f. 79-83.

DOI: <https://doi.org/10.47328/ufvbbt.2025.183>

Modo de acesso: World Wide Web.

1. Spintrônica. 2. Correntes elétricas. 3. Kitaev, Modelo de.
4. Matéria condensada. I. Moura, Antonio Ribeiro de, 1984-.
II. Universidade Federal de Viçosa. Departamento de Física.
Programa de Pós-Graduação em Física. III. Título.

CDD 22. ed. 537.62

LUCAS VIGIANO DOS SANTOS

**EXPLORANDO O TRANSPORTE DE SPIN ENTRE UM METAL NORMAL E O
MODELO DE KITAEV**

Dissertação apresentada à Universidade Federal de Viçosa, como parte das exigências do Programa de Pós-Graduação em Física, para obtenção do título de *Magister Scientiae*.

APROVADA: 20 de fevereiro de 2025.

Assentimento:

Lucas Vigiano dos Santos
Autor

Antonio Ribeiro de Moura
Orientador

Essa dissertação foi assinada digitalmente pelo autor em 05/05/2025 às 21:01:48 e pelo orientador em 08/05/2025 às 12:46:00. As assinaturas têm validade legal, conforme o disposto na Medida Provisória 2.200-2/2001 e na Resolução nº 37/2012 do CONARQ. Para conferir a autenticidade, acesse <https://siadoc.ufv.br/validar-documento>. No campo 'Código de registro', informe o código **QC1Y.Y8A4.VSNQ** e clique no botão 'Validar documento'.

Dedico esse trabalho a tudo que sacrifiquei e a todos que se sacrificaram por mim.

AGRADECIMENTOS

Agradeço primeiramente à quem me deu um norte e oportunidade de enxergar que existe um futuro além do pôr do Sol de Guaraciaba, Janine minha prima e meu tio Antônio, ou melhor, tio Toninho. Juntamente, agradeço a toda minha família, Liziane, Karla, Márcio, Matheus, Neiva, Tiago e todos que fizeram parte da minha vida. Agradeço a Neiva e Matheus Antunes, por serem essas pessoas incríveis que são. Agradeço minha irmã, Lidiara, por me dar forças em momentos difíceis, por me dar um objetivo em vida.

A minha mãe, Ivonete, por sempre estar comigo mesmo quando não estava nem consigo mesma. Ao meu pai, que do seu jeito fez o que conseguiu com o que a vida lhe ofereceu.

A todos meus amigos que me mantiveram forte, que estavam comigo quando eu mesmo não estava.

Especificamente agradeço a todos da República Matagal 2031, que foram minha família, Pedro, Douglas, Jonys, Isaac, Vitor, Gabriel e Cleiton.

Agradeço meus amigos que estiveram no meu dia-a-dia. Atílio que foi meu apoio em meus piores momentos, te devo minha vida, você é o melhor amigo que eu poderia pedir. Luís, que esteve em vários dias comigo no discord, Letícia por me mostrar que é possível compartilhar meus pensamentos e por estar sempre comigo. Felipe pelas conversas mais profundas que consegui ter, além de sempre se dispor a ajudar quando precisei. À Alecsander pelas conversas. Ao Murilo pelos momentos em Lavras e pelo companheirismo. Lorenzo, Gabriel, Mari, Tainá e Igor por todas as jogatinas que me impediram de enlouquecer. Amo todos vocês.

Obrigado Rian, que foi de extrema importância em momentos que me sentia sozinho na vida, você foi meu primeiro amigo de verdade.

Às agências de fomento, principalmente FAPEMIG e ao departamento de física da UFV pelo profissionalismo e disponibilidade. Ao meu orientador Antônio pela disposição e pelo conhecimento que adquiri, além da inspiração, trabalhar contigo será para sempre uma experiência marcante em minha carreira. O presente trabalho foi realizado com apoio da Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior – Brasil (CAPES) – Código de Financiamento 001.

"Quanto mais me impediam de ser, mais eu ia sendo tudo aquilo que eu não podia ser."

(Jonathan Tadeu)

RESUMO

SANTOS, Lucas Vigiano dos, M.Sc., Universidade Federal de Viçosa, fevereiro de 2025. **EXPLORANDO O TRANSPORTE DE SPIN ENTRE UM METAL NORMAL E O MODELO DE KITAEV**. Orientador: Antonio Ribeiro de Moura.

Esta dissertação de mestrado investiga a injeção de corrente de spin na interface entre um metal normal e o modelo de favo de mel de Kitaev, um sistema topologicamente não trivial, caracterizado por interações exóticas de spin e potenciais fases de líquidos de spin quânticos (LSQs), com ênfase nas propriedades de transporte de spin e nas características dos LSQs. O estudo analisa o torque de transferência de spin (*spin-transfer torque*) na interface devido ao acúmulo de potencial químico de spin na parte condutora, utilizando diversas ferramentas da física da matéria condensada e teoria quântica de campos, dentro da aproximação de teoria de resposta linear. Os resultados são comparados com aqueles obtidos para a interface entre um metal normal e um modelo ferromagnético usual com interações do tipo Heisenberg na mesma rede hexagonal. A investigação da dinâmica da corrente de spin contribui para a compreensão da relação entre dispositivos spintrônicos e LSQs, com possíveis aplicações na computação quântica de próxima geração e em tecnologias baseadas em spin. Os resultados revelam que a corrente de spin assume valores não negligenciáveis apenas quando o acúmulo de potencial químico de spin na região condutora excede a diferença de energia entre os setores topológicos, sendo observada mesmo em temperaturas próximas de $T=0$ — fenômenos ausentes no modelo ferromagnético usual. Além disso, propõe-se o comportamento da corrente de spin como um método para detectar e diferenciar as fases de LSQ, oferecendo uma abordagem para a caracterização desses estados quânticos exóticos.

Palavras-chave: Corrente de spin. Torque de transferência de spin. Modelo de Kitaev. Líquidos de spin quânticos. Interface metal normal–isolante topológico. Transporte de spin. Teoria de resposta linear. Matéria condensada. Computação quântica. Spintrônica.

ABSTRACT

SANTOS, Lucas Vigiano dos, M.Sc., Universidade Federal de Viçosa, February, 2025. **EXPLORING SPIN TRANSPORT BETWEEN A NORMAL METAL AND KITAEV'S MODEL.** Adviser: Antonio Ribeiro de Moura.

This master's dissertation investigates spin current injection at the interface between a normal metal and the Kitaev honeycomb model, a topologically nontrivial system characterized by exotic spin interactions and potential quantum spin liquid (QSL) phases, with an emphasis on spin transport properties and the characteristics of QSLs. The study analyzes the spin-transfer torque at the interface due to the accumulation of spin chemical potential in the conducting region, employing various tools from condensed matter physics and quantum field theory, within the linear response theory approximation. The results are compared with those obtained for the interface between a normal metal and a conventional ferromagnetic model with Heisenberg-type interactions on the same hexagonal lattice. The investigation of spin current dynamics contributes to the understanding of the relationship between spintronic devices and QSLs, with potential applications in next-generation quantum computing and spin-based technologies. The results reveal that the spin current assumes non-negligible values only when the spin chemical potential accumulation in the conducting region exceeds the energy difference between topological sectors, being observed even at temperatures close to $T=0$ — a phenomenon absent in the conventional ferromagnetic model. Furthermore, the behavior of the spin current is proposed as a method to detect and distinguish QSL phases, offering an approach for characterizing these exotic quantum states.

Keywords: Spin current. Spin-transfer torque. Kitaev model. Quantum spin liquids. Normal metal–topological insulator interface. Spin transport. Linear response theory. Condensed matter physics. Quantum computing. Spintronics.

Sumário

1	Introdução	10
2	Magnetismo e líquidos de spin	13
3	Fundamentos	18
3.1	Segunda quantização	18
3.1.1	Campos quânticos	19
3.1.2	Operadores bosônicos	22
3.1.3	Operadores fermiônicos	23
3.2	Interações	24
3.3	Evolução temporal	25
3.4	Mudanças de base e diagonalização	26
3.4.1	Caso bosônico	26
3.4.2	Caso fermiônico	28
3.5	Representações de spin	29
3.5.1	Representação de Holstein-Primakoff	29
3.5.2	Representação de Majorana	31
3.5.3	Operadores de Majorana	31
3.5.4	Representação de Kitaev	33
3.6	Teoria de resposta linear	34
3.6.1	Formalismo de interação	34
3.6.2	Matriz S	37
3.6.3	Funções de Green ($T=0$)	38
3.6.4	Aproximação linear	40
4	Descrição do modelo	42
4.1	Modelagem para corrente de spin	42
4.2	Função retardada	45
4.2.1	Aproximação de baixas temperaturas	46
4.2.2	Susceptibilidade	48
5	Modelo de Kitaev	50
5.1	Hamiltoniano de Kitaev	51
5.2	Simetrias e campos de calibre	52
5.3	Estado fundamental do setor sem fluxo	54
5.4	Funções correlação de spin	57
5.4.1	Mapeamento no setor sem fluxo	57
5.4.2	Aproximação adiabática	60
5.5	Função de Green não perturbada	61
5.6	Função de Green magnética	62

5.6.1	Função de Green retardada	63
6	Corrente de spin	66
6.1	Corrente de spin na interface entre a rede hexagonal FM e condutor normal . . .	66
6.1.1	Corrente de spin	67
6.2	Corrente de spin na interface entre o modelo de Kitaev e condutor normal . . .	69
6.2.1	Aproximação de cones de Dirac	70
7	Resumo e conclusão	76
A	Relação entre \tilde{F}_{ij}^{-+} e \tilde{F}_{ij}^{+-}	78
B	Cálculo da susceptibilidade no FM usual	78
	Referências	83

1 Introdução

A investigação e caracterização de sistemas quânticos estão se tornando um componente essencial da pesquisa em física devido ao interesse crescente da comunidade científica em descobrir novos materiais. Isso se deve, em parte, ao papel significativo que a física quântica desempenha na transformação social; estimativas indicam que os avanços na área representam aproximadamente 30% do Produto Interno Bruto (PIB) mundial, direta ou indiretamente [1].

Nesse contexto, a demanda por uma estrutura teórica que possa descrever sistemas compostos por múltiplos corpos se torna cada vez mais evidente. A complexidade desses sistemas requer uma abordagem rigorosa e abrangente para compreender e prever seu comportamento, uma vez que sua influência é crucial em uma variedade de aplicações tecnológicas.

A teoria quântica, concebida pelos pioneiros da física moderna, estabeleceu os fundamentos essenciais que sustentam as investigações atuais em física da matéria condensada. No entanto, a transição da modelagem de sistemas de um único corpo para sistemas compostos por múltiplos corpos representa um desafio monumental. Resolver uma hamiltoniana para mais de 10^{23} funções de onda interagentes é uma tarefa hercúlea, comparável ao mito de Sísifo, especialmente considerando a complexidade já presente em problemas envolvendo apenas três corpos.

Mesmo que fosse possível alcançar tal feito, permanece em debate se as soluções das equações de Schrödinger poderiam capturar, ou até mesmo indicar, fenômenos como a supercondutividade. Como destacado por P. W. Anderson em sua obra "*More Is Different*" [2], muitos dos fenômenos observados em sistemas de muitos corpos emergem de maneira coletiva, uma perspectiva que desafia diretamente a abordagem convencional centrada em soluções individuais das equações fundamentais.

Além disso, desafia também nossa concepção da realidade e suas particularidades. O primeiro impacto da física quântica remonta à filosofia de Parmênides, que proclamava "o ser é e o não ser não é", pois Einstein já havia delineado um caminho ao estabelecer a conexão entre as excitações (ondas) eletromagnéticas e suas contrapartes de partículas, conhecidas como fótons. Essa compreensão lançou luz sobre a dualidade onda-partícula, uma concepção fundamental na física quântica. Um paralelo claro pode ser observado no domínio acústico, onde as ondas sonoras podem ser equiparadas a modos vibracionais representados por partículas, utilizando a relação de de Broglie, ou seja, o mesmo fenômeno pode ser representado por ondas ou partículas. Essas partículas correspondentes às ondas sonoras são conhecidas como fônons, ilustrando a natureza unificada das descrições ondulatórias e corpusculares dos fenômenos físicos.

O segundo golpe, embora mais sutil, é igualmente significativo, pois desafia a concepção aristotélica de uma essência fixa nos objetos da realidade, uma visão metafísica que presume que as coisas são e continuarão sendo como são. Nada ilustra melhor o conceito de *tornar-se* do que a física dos materiais e objetos. Um material condutor, por exemplo, pode transformar-se em um supercondutor. Portanto, a quântica tem um caráter intimamente dialético, ou seja, uma abordagem filosófica que reconhece a natureza dinâmica e em constante mudança da realidade, enfatizando a interconexão e interdependência dos fenômenos.

Para abordar de maneira eficaz sistemas compostos por múltiplos corpos, é vantajoso aban-

donar a descrição em termos de funções de onda individuais para cada partícula. Em vez disso, uma abordagem mais conveniente é formular uma descrição que dependa apenas do número de partículas em cada estado quântico. Isso é alcançado através da utilização de operadores que criam ou destroem uma partícula em um determinado estado de energia, inspirados nos conceitos do oscilador harmônico quântico e seus operadores escada. Essa formulação, juntamente com suas implicações, será abordada de forma mais detalhada na seção dedicada à segunda quantização.

Dentre os vários ramos da física da matéria condensada, será destacado neste trabalho a Spintrônica. Desde o emblemático experimento de Stern-Gerlach em 1922, que evidenciou uma das propriedades quânticas do spin, houve avanços significativos na compreensão e aplicação desse conceito. A modelagem de materiais magnéticos, que está intimamente ligada ao spin, recebeu contribuições fundamentais de Heisenberg. Ele introduziu um hamiltoniano efetivo que, embora simplificado em relação às interações complexas entre superposições de funções de onda, captura de forma precisa a interação spin-spin em certos materiais, conhecida como interação de troca: $H_{i,j} = J\vec{S}_i \cdot \vec{S}_j$. Dependendo do sinal da constante de troca J , podemos distinguir modelos para materiais ferromagnéticos ou antiferromagnéticos.

Para os materiais ferromagnéticos ($J < 0$) unidimensionais de spin $1/2$, onde os spins são organizados em uma cadeia ao longo de um eixo com uma distância fixa entre eles, o estado fundamental corresponde ao estado em que todas as componentes z dos spins apontam na mesma direção. Isso pode ser visualizado como uma linha de vetores apontando para cima ou para baixo. Um estado de energia mais alta pode ser interpretado como aquele em que apenas um spin está invertido, aumentando a energia global. No entanto, é demonstrável que esse estado com apenas um spin invertido não é um autoestado da hamiltoniana original. Em vez disso, ele é uma superposição de estados com apenas um spin trocado, e essa mudança se propaga ao longo da cadeia. Essa configuração é uma das maneiras pelas quais surgem as ondas de spin, que podem ser descritas por partículas emergentes chamadas mágnons. Note que mágnons não são partículas no sentido usual da palavra; são modos coletivos de vibrações quantizadas. Utilizando o formalismo de segunda quantização, temos um estado fundamental sem nenhum mágnon e o próximo estado com um mágnon na rede.

As investigações sobre correntes de spin têm recebido considerável destaque, especialmente após as descobertas do efeito Hall de spin e do efeito Hall de spin inverso, que permitiram a conversão entre corrente de spin e corrente de carga. Esses avanços abriram novas possibilidades para o desenvolvimento de tecnologias baseadas em spin.

Consequentemente, têm surgido modelos teóricos cada vez mais sofisticados, visando incorporar fenômenos complexos, como a supercondutividade, ou especulações sobre fenômenos ainda não detectados. Esses esforços refletem o contínuo interesse em compreender e explorar as propriedades fundamentais dos sistemas de spin, bem como sua aplicabilidade em dispositivos e tecnologias inovadoras.

Um modelo proposto por Kitaev em 2006 [4] tem atraído considerável interesse devido à sua solução analítica. Vale ressaltar que são raros os modelos interagentes que possuem

solução analítica, justificando a atenção que esse modelo tem recebido. Esse modelo, conhecido como modelo de honeycomb de Kitaev, é definido em uma rede bidimensional hexagonal na qual ocorrem três tipos distintos de conexões entre os sítios. Em cada conexão, apenas uma componente do spin interage. Por essas características, o modelo inicialmente teria um caráter teórico, o que poderia ser chamado de *toy model*. Porém, além de suas facetas únicas, como a emergência de uma fase de líquido de spin, ele se demonstra interessante como possível perturbação de hamiltonianas mais complexas e como um horizonte para o desenvolvimento de materiais que de alguma maneira possam ser representados por este modelo.

O líquido de spin, fase em que o arranjo de spins não apresenta nenhum tipo de ordem magnética em $T = 0$, constitui um expoente interessante para diversas pesquisas. Devido à sua natureza desordenada, a determinação de um parâmetro que permita a medição dessa fase é uma tarefa árdua. O cálculo da corrente de spin, por demonstrar assinaturas do transporte devido a determinadas excitações, desponta como uma alternativa para tais medições.

Portanto, esse trabalho tem como principal objetivo estudar o transporte de corrente de spin em uma interface entre o modelo de Kitaev e um metal condutor em fase normal. Almejando esse objetivo, é necessário adentrar no mundo bidimensional de Kitaev a fim de compreender essa estrutura que, embora simples à primeira vista, armazena um novo universo em uma fava de mel.

2 Magnetismo e líquidos de spin

O magnetismo, diferentemente da eletricidade, já era conhecido por diversas civilizações antes mesmo da Era Comum, como, por exemplo, na Grécia Antiga, na cidade de Magnésia. Tales de Mileto, filósofo pré-socrático, realizou estudos relacionados a pedras que se atraíam, possivelmente em sua busca pela *arkhé* (substância primária), que ele identificava como a umidade (ou água). Contudo, é difícil afirmar com precisão sobre seus trabalhos, pois o conhecimento a respeito de Tales advém principalmente da tradição oral e de relatos indiretos, preservados em parte pelo Império Bizantino. Esses registros foram difundidos apenas após a queda do império, movimento que influenciou o Renascimento.

Abordar os relatos dos primeiros usos do magnetismo na China em 2000 antes da Era Comum na produção de bússolas até a descoberta da indução magnética seria necessário também abordar parte de toda história escrita. Por esse motivo iremos nos restringir a recapitular conceitos importantes do magnetismo em sistemas quânticos.

A capacidade dos materiais de apresentar magnetização espontânea fomentou não somente o interesse mas o investimento de diversas pesquisas. Por exemplo, Pierre Curie demonstrou que os materiais chamados de ferromagnéticos possuem tal magnetização apenas abaixo de certas temperaturas, específicas de cada material ferromagnético. A explicação inicial partia de momentos magnéticos microscópicos que a partir de suas interações alinhavam formando um campo magnético total.

Classicamente, uma partícula com carga q e massa M se movendo em um círculo de raio R a uma velocidade v possui momento angular $L = MRv$. Dado que a corrente formada pela carga pontual $I = q/T$, sendo $T = 2\pi R/v$ o período de uma volta, podemos encontrar o momento magnético gerado; $\mu = IA$, A sendo a área da espira formada pela trajetória da partícula. Portanto o momento magnético é $\vec{\mu} = \gamma\vec{L}$, em que $\gamma = q/2M$ é chamado de razão giromagnética.

A energia de interação deste momento magnético com um campo magnético é:

$$U = -\vec{\mu} \cdot \vec{B}. \quad (2.1)$$

Após as descobertas atômicas que revolucionaram as formulações físicas, como o átomo de Schrödinger e os experimentos de Stern-Gerlach, a origem do magnetismo nos materiais foi melhor compreendida. Os momentos magnéticos microscópicos de fato surgem de elétrons não pareados nas camadas eletrônicas, possuindo momento angular total $\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$, na qual \vec{L} é o momento angular orbital (ou extrínseco) e \vec{S} o momento angular de Spin (ou intrínseco). O momento magnético total, em termos do magneton de Bohr, $\mu_B = e\hbar/2m = 9.27 \times 10^{-24} \text{ Am}^2$ no sistema SI e $\mu_B = e\hbar/2mc = 9.27 \times 10^{-21} \text{ Gcm}^3$ em CGS, é dado por:

$$\vec{\mu} = -g\mu_B\vec{J}, \quad (2.2)$$

tal que g é o chamado fator de Landé fornecido pela equação:

$$g = 1 + \frac{J(J+1) + S(S+1) - L(L+1)}{2J(J+1)} \quad (2.3)$$

O momento angular orbital ($L = 0$) é anulado em íons com camadas semicombinadas devido à simetria da distribuição eletrônica e ao emparelhamento dos elétrons nos orbitais. Na configuração semicombinada, como $3d^5$ em Mn^{2+} e Fe^{3+} , os elétrons ocupam os orbitais de forma simétrica e com spins paralelos, conforme o princípio de Hund. Isso faz com que as contribuições individuais dos momentos angulares orbitais (\vec{l}) se cancelem mutuamente[3]. Além disso, a interação com o campo cristalino em sistemas ligados pode reforçar esse *quenching* orbital, resultando em $L = 0$ e deixando o momento magnético do íon dominado apenas pelo momento de spin (S).

Vale ressaltar que devido ao princípio de exclusão de Pauli é necessário uma função de onda total antissimétrica, obrigando a função de onda espacial ser simétrica caso os spins sejam anti-paralelos e vice-versa. Além disso, como a interação entre átomos ou íons diferentes é proporcionada pela superposição entre as funções de onda eletrônicas, a energia dessa interação será diferente nas configurações de spins alinhados ou anti-alinhados, pois fornecerá interações coulombianas diferentes dependendo da distribuição de cargas conectadas com a distribuição de probabilidade eletrônicas. Essa é a origem da chamada interação de troca.

O primeiro contato com as complexas distribuições eletrônicas é suficiente para explicar a árdua dificuldade em realizar os cálculos para interação de troca. Porém, para um grande número de materiais, é possível condensar a interação em uma constante de troca J (não confundir com momento angular total), obtendo um modelo efetivo que depende da interação dos momentos magnéticos de spin. Usando as equações (2.1) e (2.2):

$$\sum H_{i,j} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j, \quad (2.4)$$

No qual, $\langle i,j \rangle$ indica que estão sendo considerados apenas os sítios i e j vizinhos. O hamiltoniano de Heisenberg, apresentado acima, para valores positivos de J , minimiza a energia com os spins alinhados, resultando em um ordenamento ferromagnético. Em contraste, para valores negativos de J , obtém-se um ordenamento antiferromagnético. Ambas as situações estão ilustradas na figura abaixo.



Figura 2.1: A esquerda um ordenamento ferromagnético e a direita antiferromagnético.

Focando apenas no caso ferromagnético unidimensional de spin 1/2, podemos verificar se a configuração mostrada acima corresponde ao estado fundamental do hamiltoniano de Heisenberg, reescrevendo-o como:

$$H = -J \sum_i \frac{S_i^+ S_{i+1}^- + S_i^- S_{i+1}^+}{2} + S_i^z S_{i+1}^z, \quad (2.5)$$

no qual foi adotado condições periódicas, ou seja, o último spin é vizinho do primeiro.

Deseja-se testar se o estado com todos spins apontados para cima é autoestado, para isso definimos tal estado como:

$$|GS\rangle = |\uparrow_1, \uparrow_2, \dots, \uparrow_N\rangle. \quad (2.6)$$

O cálculo se torna imediato utilizando os seguintes resultados:

$$S_i^z |\uparrow_i\rangle = \frac{\hbar}{2} |\uparrow_i\rangle, \quad S_i^z |\downarrow_i\rangle = -\frac{\hbar}{2} |\downarrow_i\rangle; \quad (2.7a)$$

$$S_i^+ |\uparrow_i\rangle = 0, \quad S_i^+ |\downarrow_i\rangle = \hbar |\uparrow_i\rangle; \quad (2.7b)$$

$$S_i^- |\uparrow_i\rangle = \hbar |\downarrow_i\rangle, \quad S_i^- |\downarrow_i\rangle = 0. \quad (2.7c)$$

Portanto a aplicação no estado anterior gera

$$H|GS\rangle = -J \sum_i \left(\frac{\hbar}{2}\right)^2 |GS\rangle = -JN \left(\frac{\hbar}{2}\right)^2 |GS\rangle. \quad (2.8)$$

Não somente $|GS\rangle$ é autoestado da hamiltoniana com energia $E_0 = -JN \left(\frac{\hbar}{2}\right)^2$ como também é estado fundamental, pois a troca de um spin acrescentará energia resultando em um estado mais energético. Porém é necessário cautela para os próximos passos, já que o estado com apenas um dos spins trocados não é autoestado da hamiltoniana de Heisenberg, contrariando conclusões apressadas. De fato, o autoestado excitado é uma combinação de estados com diferentes spins trocados da forma:

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_i e^{qri} |\uparrow_1, \dots, \downarrow_i, \dots, \uparrow_N\rangle, \quad (2.9)$$

com energia $E = E_0 + J\hbar^2(1 - \cos(q))$, N é o número de sítios e o parâmetro de rede foi tomado como $a = 1$. Assim, as excitações descrevem ondas de spin. Esses componentes permitem entender a emergência em sistemas de matéria condensada. Realizando um paralelo com a dualidade entre onda e partícula, pode-se esperar que existam excitações coletivas com comportamento corpuscular que definem pseudo-partículas com spin $S = 1$, referente a quantidade de spin adicionada ou retirada do sistema ao trocar o spin de um sítio na rede. Essas pseudo-partículas são chamadas de mágnons. A descrição de sua emergência e utilidade serão abordadas nos capítulos seguintes.

Para os valores negativos de J , ou seja, o modelo antiferromagneto (AF), ilustrado na figura (2.1), encontramos uma situação bem diferente. O estado do sistema com todos spins anti-paralelos não é um autoestado da hamiltoniana, portanto não pode ser o estado fundamental do sistema. Mesmo para $T = 0$, o AF unidimensional não possui ordenamento espontâneo dos spins, possuindo flutuações quânticas que inibem qualquer ordem magnética. Além disso, as excitações emergentes transportam spins diferentes, dando origem a fracionalizações no sistema. Esta fase da matéria é convencionalmente chamada de líquido de spin. Estes resultados não decorrem diretamente do estado ordenado não ser autoestado do hamiltoniano, cuja demonstração não será abordada aqui.

A fase de líquido de spin quântico (LSQ) é caracterizada pela ausência de qualquer forma de ordenamento magnético, mesmo a temperatura nula. Atualmente, é conhecido que os LSQ exibem excitações fracionalizadas, que podem, por exemplo, transportar de forma separada o spin e a carga dos elétrons, apenas ordem de curto alcance (*short-range order-SRO*) e campos de calibre emergentes [5]. Além disso, ao contrário das fases de spin da matéria convencional, o estado de líquido de spin exibe um alto grau de emaranhamento entre as pseudo-partículas, características topológicas e emergências de Anyons. Com isso, os materiais com fase de LSQ despertam um grande interesse para aplicações em computadores quânticos [6].

Historicamente, foram teorizados pela primeira vez em 1973 por Philip W. Anderson, com base no modelo de antiferromagnetismo em redes bidimensionais, como parte de sua investigação sobre os sistemas de rede triangular e frustração magnética [8]. Utilizando o modelo de *Resonating Valence Bond* (RVB), é possível expressar o estado fundamental como uma combinação de configurações de dímeros por meio de um estado de spin variacional que preserva as simetrias de translação e rotação, minimizando a energia do estado fundamental [5, 40]. Entretanto, Anderson falhou em confirmar a hipótese de LSQ no modelo antiferromagnético triangular usual com sua abordagem RVB. Como as flutuações quânticas ou térmicas tornam o estado fundamental mais degenerado, o sistema escolhe um estado ordenado por meio do processo denominado *order-by-disorder*, enquanto a frustração age para suprimir a ordem de longo alcance (*long-range order-LRO*). Portanto, a consideração de apenas primeiros vizinhos se mostrou insuficiente para exibir LSQ. Ao levar em conta interações com vizinhos mais distantes ou outras redes frustradas, como o modelo Kagomé, pode ser obtido um LSQ aproximado [12].

Posteriormente, como demonstrado por F. D. M. Haldane, no limite de baixas energias, o sistema AF é aproximadamente descrito pelo Modelo Sigma Não-Linear (*non-linear sigma model-NLSM*) com simetria $O(3)$, em que se obtém um termo topológico incluído [7]. Cadeias unidimensionais AF, como a discutida acima, não possuem magnetização para $T \geq 0$, como consequência do teorema de Mermin-Wagner, e tem alta dependência do valor do spin para as excitações de mais baixa energia. No formalismo de integral de caminho para spins inteiros, o termo topológico da fase Berry tem menor relevância, resultando em modos de Goldstone convencionais com lacuna de energia transportando spin $S = 1$. Porém, para spins semi-inteiros, o termo topológico desempenha um papel forte, em que diferentes caminhos interferem significativamente, gerando excitações não convencionais sem lacuna de energia que transportam spin $S = 1/2$, chamados de spinons. Utilizando *ansatz* de Bethe, é possível encontrar uma solução exata para a cadeia AF com $S = 1/2$, esclarecendo a natureza dos estados de LSQ nesses sistemas [9]. Além disso, experimentos de espalhamento inelástico de nêutrons confirmaram a existência de LSQs em cadeias AF [10, 11].

Por mais que as propostas iniciais por Anderson sejam fortemente relacionadas com sistemas 2D, no atual cenário, não existe consenso sobre as observações experimentais de líquidos de spin para sistemas com $D > 1$ [5]. Seguindo a proposta inicial de Anderson, sistemas frustrados tem sido grande foco dos estudos e potenciais candidatos para detecção experimental.

Além da ausência de qualquer tipo de ordem, os LSQs são eletricamente isolantes, que torna o desenvolvimento de experimentos para detecção dessa fase peculiar da matéria um grande desafio. Por isso, diversos artigos se debruçam em correntes térmicas e de spin para identificar excitações em LSQ. Por exemplo, a confirmação da corrente de spin transportada por spinons, na cadeia de spin formada por Sr_2CuO_3 , foi realizada através do efeito Seebeck de spin [13]. Existem diversas propostas de combinações de camadas de materiais diferentes para realizar experimentos de spintrônica, como sugerido por S. Chatterjee e S. Sachdev em que a relação entre diferença de potencial elétrico e corrente de spin é usada para caracterizar diferentes tipos de excitações em LSQ [14], assim como propostas para detecção de spinons em isolantes Mott [15].

Além do modelo de Heisenberg, diversos outros foram desenvolvidos para incorporar outras interações que não a de troca. Em 2006, Kitaev avançou a busca por LSQs apresentando um modelo bidimensional interagente com solução exata [4], que será discutido mais profundamente nos capítulos seguintes. Desde sua proposta, surgiram outros modelos tipo-Kitaev com spins maiores separados por classes diferentes [16, 17, 18, 19, 20]. Apesar da artificialidade do modelo de Kitaev em primeiro momento, sendo considerado um *toy model*, sua proposta influenciou diversos pesquisadores a buscarem materiais que possibilitem sua detecção experimental. Recentemente, surgiram materiais candidatos para realização experimental dos LSQs bidimensionais, porém, com interações além daquela proposta por Kitaev, que levam a estados fundamentais ordenados em temperaturas baixas [21, 22, 23]. O composto $\alpha - \text{RuCl}_3$ é atualmente considerado um dos principais candidatos para a realização experimental do modelo de Kitaev em sistemas com spin 1/2 [24, 25, 26, 27, 28].

O modelo de Kitaev possui diversas propostas para medir as correntes térmicas e de spin, transportadas por excitações descritas via férmions de Majorana. J. Nasu e sua equipe, estudaram o problema utilizando simulações de Monte Carlo Quânticas, a fim de encontrar características do transporte térmico [29]. D. Takikawa buscou encontrar as assinaturas das excitações de LSQ de Kitaev no efeito Seebeck [30]. Além do mais, diversos trabalhos propõem, para compreender o transporte em modelos de Kitaev, um método de análise em três regiões, em que um pulso magnético é aplicado em um extremo, estimulando partículas de Majorana, e os resultados são observados no outro extremo, após a propagação na região intermediária. Este método foi empregado em modelos de Kitaev de spins 1/2 e 1 [31, 32], além de investigar aspectos térmicos [33] e o espalhamento dos Majoranas pelos fluxos excitados [34]. Concomitantemente, J. Aftergood e S. Takei sugerem a detecção de estados de líquido de spin quântico através do ruído em correntes de spin, mensurado em junções metálicas por meio de um efeito Hall inverso [55].

3 Fundamentos

3.1 Segunda quantização

Dado a quantidade exorbitante de constituintes de um sistema de matéria condensada, o cálculo e simetrização da função de onda total do material representa uma barreira enorme para trabalhos que busquem as características quânticas do mesmo. O leitor que se sentir desafiado a completar tal tarefa passará a existência, ou a vida, calculando inúmeras funções de onda. Sísifo, personagem da mitologia grega condenado no mundo dos mortos a carregar uma pedra até o topo da montanha apenas para vê-la rolar de volta para baixo, talvez encontre mais significado em sua tarefa.

A necessidade da construção de outro formalismo advém da característica dialética da natureza, em que o objeto de estudo determina a metodologia adequada para sua compreensão. Entretanto, não é necessário grandes reconstruções, como veremos neste capítulo. Antes é fundamental a revisão de alguns conceitos básicos.

Após as formulações e descobertas iniciais da quântica, uma das hamiltonianas mais importantes a ser estudada foi a do oscilador harmônico quântico, generalização direta do oscilador clássico. Seja a hamiltoniana em termos dos operadores de posição e momento;

$$\hat{H} = \frac{m\omega^2}{2}\hat{x}^2 + \frac{1}{2m}\hat{p}^2, \quad (3.1)$$

sendo m a massa da partícula, $\omega = \sqrt{\frac{K}{m}}$, K a constante elástica e os operadores seguem $[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar$. Para diagonalizar o hamiltoniano e encontrar seu espectro de energia, um método interessante é o chamado de operadores escada. Definindo os operadores:

$$\hat{a} = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\hat{x} - i\sqrt{\frac{1}{2m\hbar\omega}}\hat{p}, \quad (3.2a)$$

$$\hat{a}^\dagger = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\hat{x} + i\sqrt{\frac{1}{2m\hbar\omega}}\hat{p}, \quad (3.2b)$$

e portanto obtemos as regras de comutação

$$[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = 1, \quad [\hat{a}, \hat{a}] = [\hat{a}^\dagger, \hat{a}^\dagger] = 0 \quad (3.3)$$

Chamaremos \hat{a} e \hat{a}^\dagger de operadores de aniquilação e criação, por motivos que ficarão claros a seguir. Note que podemos reescrever o hamiltoniano como:

$$\hat{H} = \hbar\omega(\hat{a}^\dagger\hat{a} + \frac{1}{2}). \quad (3.4)$$

Definindo $\hat{a}^\dagger \hat{a} = \hat{n}$, se torna direta a demonstração que esse novo operador, denominado como operador número, comuta com o hamiltoniano, já que são iguais a menos de uma constante. Portanto podemos encontrar os autoestados do operador número para encontrar a base do hamiltoniano, ou seja;

$$\hat{n}|n\rangle = n|n\rangle, \hat{H}|n\rangle = E_n|n\rangle. \quad (3.5)$$

Usando a relação de comutação entre os operadores de aniquilação e criação, é possível demonstrar duas relações que serão úteis: $[\hat{n}, \hat{a}^\dagger] = \hat{a}^\dagger$ e $[\hat{n}, \hat{a}] = -\hat{a}$. Utilizando a primeira relação

$$\hat{n}(\hat{a}^\dagger|n\rangle) = (n+1)(\hat{a}^\dagger|n\rangle), \quad (3.6)$$

conclui-se a partir da última equação que o estado gerado pela aplicação do operador de criação também é autoestado do operador número, com autovalor $n+1$. Escrevemos então $\hat{a}^\dagger|n\rangle = C|n+1\rangle$, sendo C uma constante dada por:

$$\langle n|(1+\hat{n})|n\rangle = 1+n = |C|^2. \quad (3.7)$$

Desta forma, realizando os mesmos cálculos para a segunda relação citada acima, obtemos

$$\hat{a}^\dagger|n\rangle = \sqrt{n+1}|n+1\rangle, \quad (3.8)$$

$$\hat{a}|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle. \quad (3.9)$$

A atuação do operador de criação adiciona (ou sobe) um nível de energia, enquanto o operador de aniquilação retira (ou desce) um nível de energia, justificando seus nomes. O estado de mais baixa energia será portanto aquele que não é possível retirar mais energia, $\hat{a}|GS\rangle = 0$, resultando em $|GS\rangle = |n=0\rangle = |0\rangle$, chamado de estado de vácuo. As energias do oscilador harmônico são $E_n = \hbar\omega(n + \frac{1}{2})$.

Note que qualquer autoestado e autovalor da hamiltoniana pode ser encontrado com a aplicação dos operadores de criação e aniquilação, determinando totalmente o espectro de energia do sistema. Nesse contexto não estamos criando ou aniquilando pacotes de energia, na verdade estamos transitando entre níveis de energia e por esse motivo muitos livros definem os operadores como levantamento e abaixamento. A base do operador número será utilizada em todo restante do texto, demandando uma compreensão razoável sobre sua manipulação.

Nesse momento seria possível apenas apresentar as definições e consequências do processo de segunda quantização, demonstrando sua utilidade e funcionamento. Porém, buscaremos introduzir e mostrar justificativas fortes sem adentrar profundamente nas demonstrações matemáticas da teoria quântica de campos.

3.1.1 Campos quânticos

O processo de quantização dos campos pode ser realizado de diversas maneiras. Para ilustrar a necessidade da linguagem da segunda quantização, ou seja, o formalismo que utiliza a álgebra dos operadores de criação e aniquilação, consideraremos o campo de Schrödinger. A equação

de Schrödinger para uma partícula é

$$i\hbar\dot{\psi}(\mathbf{r}) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + \hat{U}(\mathbf{r}) \right] \psi(\mathbf{r}) = \hat{H}\psi(\mathbf{r}), \quad (3.10)$$

Essa equação pode ser obtida das equações de Euler Lagrange na seção anterior ao tratar ψ e ψ^* como variáveis independentes e definir a densidade Lagrangiana como

$$\mathcal{L} = i\hbar\psi^*\dot{\psi} - \frac{\hbar^2}{2m}\nabla\psi^* \cdot \nabla\psi - \hat{U}(\mathbf{r},t)\psi^*\psi. \quad (3.11)$$

A densidade hamiltoniana definida pela equação $\mathcal{H} = \pi\dot{\psi} - \mathcal{L}$ ($\pi = i\hbar\psi^*$ é o campo canonicamente conjugado à ψ) é dada por

$$\hat{\mathcal{H}} = \frac{\hbar^2}{2m}\nabla\psi^* \cdot \nabla\psi + U(\mathbf{r},t)\psi^*\psi, \quad (3.12)$$

enquanto o hamiltoniano é dado pela integração em todo volume da expressão acima

$$\hat{H} = \int d^3r \hat{\mathcal{H}} = \int d^3r \psi^* \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + \hat{U}(\mathbf{r},t) \right) \psi, \quad (3.13)$$

onde foi realizado uma integração por partes na última igualdade. Então o valor esperado da energia é $E = \langle \psi | H | \psi \rangle$.

Em sistemas de matéria condensada é fundamental realizar a análise para um sistema composto de muitas partículas. Para N partículas não interagentes o hamiltoniano, função de onda já simetrizada apropriadamente e o valor esperado da energia são

$$\begin{aligned} \hat{H} &= \sum_i^N \hat{H}_i, \quad \psi = \psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N), \\ E &= \sum_i^N \langle \psi | \hat{H}_i | \psi \rangle. \end{aligned} \quad (3.14)$$

Note que o acento circunflexo mostra que o hamiltoniano é um operador quântico, diferente da função de onda, como usual em mecânica quântica antes da segunda quantização. Vale a pena recordarmos que uma diferença entre mecânica quântica e clássica tem sua origem no princípio de incerteza, que é exposto indiretamente pelas regras de comutação entre posição e momento, ou qualquer outras variáveis não compatíveis. Portanto é fundamental para o processo de quantização estabelecer regras de comutação entre as variáveis, promovendo-as a operadores. Faremos agora um segundo processo de quantização, promovendo as duas funções de onda independentes a operadores:

$$\psi(\mathbf{r}) \rightarrow \hat{\psi}(\mathbf{r}); \quad \psi^*(\mathbf{r}) \rightarrow \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}), \quad (3.15)$$

entende-se agora que $\hat{\psi}(\mathbf{r})$ ($\hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r})$) é um operador que aniquila (cria) uma partícula na posição \mathbf{r} com função de onda $\psi(\mathbf{r})$. Adaptando a ideia do princípio de incerteza iremos definir regras de comutação entre os operadores da forma

$$\begin{aligned}
[\hat{\psi}(\mathbf{r}), \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}')] &= \delta^3(\mathbf{r} - \mathbf{r}'), \\
[\hat{\psi}(\mathbf{r}), i\hbar\hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}')] &= i\hbar\delta^3(\mathbf{r} - \mathbf{r}'), \\
[\hat{\psi}(\mathbf{r}), \hat{\pi}(\mathbf{r}')] &= i\hbar\delta^3(\mathbf{r} - \mathbf{r}'),
\end{aligned} \tag{3.16}$$

em que usamos a definição do campo canonicamente conjugado $\pi = i\hbar\psi^*$, agora quantizado. No novo formalismo com os campos quantizados o hamiltoniano se torna

$$\hat{H} = \int d^3r \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}) \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + \hat{U}(\mathbf{r}, t) \right) \hat{\psi}(\mathbf{r}). \tag{3.17}$$

De imediato surge uma dificuldade operacional, pois temos operadores não lineares atuando nos campos quânticos. Uma alternativa para solucionar tal problema é definir uma nova base de autoestados que troque os operadores por autovalores;

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + \hat{U}(\mathbf{r}, t) \right) \phi_\lambda(\mathbf{r}) = E_\lambda \phi_\lambda(\mathbf{r}). \tag{3.18}$$

Por fim, é necessário realizar uma das operações mais fundamentais em mecânica quântica: reescrever a base antiga como uma combinação linear da nova base, utilizando a propriedade de completude das bases. No caso de funções, temos uma expressão simples; $\psi(\mathbf{r}) = \sum_\lambda a_\lambda \phi_\lambda(\mathbf{r})$, onde $\psi(\mathbf{r})$ é escrita como uma soma das novas autofunções $\phi_\lambda(\mathbf{r})$, ponderadas pelos coeficientes a_λ .

Entretanto, ao trabalhar com operadores, surge a necessidade de escolher entre atribuir o papel de operador aos coeficientes a_λ ou às novas autofunções $\phi_\lambda(\mathbf{r})$ para preservarmos a igualdade. Optar por tratar as autofunções como operadores apenas transfere os problemas para $\phi_\lambda(\mathbf{r})$. Por essa razão, definiremos os coeficientes da expansão como operadores, de forma que

$$\begin{aligned}
\hat{\psi}(\mathbf{r}) &= \sum_\lambda \hat{a}_\lambda \phi_\lambda(\mathbf{r}), \\
\hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}) &= \sum_\lambda \hat{a}_\lambda^\dagger \phi_\lambda(\mathbf{r}).
\end{aligned} \tag{3.19}$$

É necessário que as regras de comutação na equação (3.16) sejam mantidas, portanto usando a ortogonalidade das autofunções temos que satisfazer

$$[\hat{\psi}(\mathbf{r}), \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}')] = \delta^3(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \iff a_\lambda a_\lambda^\dagger - a_\lambda^\dagger a_\lambda = 1, \tag{3.20}$$

Concluimos, portanto, que os coeficientes operadores correspondem exatamente aos operadores de criação e aniquilação já conhecidos no contexto do oscilador harmônico, cuja álgebra é completamente definida pela regra de comutação $[a_\lambda, a_\lambda^\dagger] = 1$. A escolha de definir os campos quânticos por meio de regras de comutação implica, de forma direta, em regras de comutação para os novos operadores de criação e aniquilação a_λ^\dagger e a_λ . No próximo capítulo, veremos que existe outra abordagem para definir a comutação entre esses operadores, permitindo distinguir dois tipos fundamentais de partículas: bósons e férmions. Até o momento, trabalhamos exclusivamente com a formulação bosônica.

Demonstramos como a base dos operadores número surge de forma natural dentro da teoria

quântica de campos. Além disso, essa escolha de base leva a uma simplificação do hamiltoniano. Usando a Eq. (3.18), obtemos:

$$H = \sum_{\lambda} E_{\lambda} \hat{a}_{\lambda}^{\dagger} \hat{a}_{\lambda}. \quad (3.21)$$

Não somente o hamiltoniano foi simplificado, mas também as autofunções não aparecem de forma explícita, o que torna esta uma formulação muito mais adequada para sistemas de matéria condensada, onde não é possível encontrar e simetrizar as funções de onda. Por conseguinte, obtemos um hamiltoniano idêntico ao do oscilador harmônico quântico, salvo por uma constante, ou seja, é possível determinar todo o espectro de energia.

3.1.2 Operadores bosônicos

Na seção anterior, foram abordadas algumas justificativas para a formulação da segunda quantização bosônica. Agora, iremos analisar a termodinâmica dos estados gerados pelos operadores de criação e aniquilação, com a regra de comutação dada pela equação $[a_k, a_k^{\dagger}] = 1$, onde k é o índice referente ao momento da partícula criada ou aniquilada.

O hamiltoniano no formalismo grande canônico é

$$K = \sum_k E_k N_k - \mu N_k = \sum_k (E_k - \mu) a_k^{\dagger} a_k, \quad (3.22)$$

em que μ é o potencial químico. Note que um estado com momento $k = 2\pi n/L$, com $n \in \mathbb{N}$, pode ter qualquer número inteiro positivo de partículas por superposição. Portanto, o caráter bosônico já é perceptível. Fixando a energia associada ao momento k , podemos obter estados com nenhuma partícula, uma partícula, e assim por diante. Assim, a função partição grande canônica, calculada na base dos estados número, é dada por:

$$\mathcal{Z}_k = \text{Tr}(e^{-\beta K}) = \frac{1}{1 - e^{-\beta(E_k - \mu)}}. \quad (3.23)$$

Com a função partição obtida, o cálculo do valor médio de partículas que ocupam o estado com momento k fornece a distribuição de Bose-Einstein

$$\langle n_k \rangle = n_k = \frac{1}{e^{\beta(E_k - \mu)} - 1}. \quad (3.24)$$

O número total de partículas é obtido somando todos estados $N = \sum_k \langle n_k \rangle$. Portanto a definição feita na Eq. (3.16) de fato constrói um espaço de Hilbert de dimensão infinita expandido por $|n\rangle$ com $n \in \mathbb{N}$. Esse espaço, denominado Espaço de Fock, permite a criação de um número indeterminado de partículas em um mesmo estado quântico, portanto descreve o comportamento de partículas bosônicas.

3.1.3 Operadores fermiônicos

Diferentemente do caso bosônico, os estados quânticos fermiônicos só podem conter um único férmion, devido ao fenômeno conhecido como princípio de exclusão de Pauli. Em relação ao número de ocupação de um dado momento linear, por exemplo, existem apenas dois estados possíveis para expandir um espaço de Hilbert fermiônico: ocupado, $|1\rangle$, e desocupado, $|0\rangle$.

Os operadores de criação e aniquilação fermiônicos devem obedecer o Princípio de Exclusão de Pauli, de forma a impedir que duas partículas sejam criadas no mesmo estado quântico. Assim, as regras de comutação da Eq. (3.3) são substituídas por novas regras de anti-comutação.

$$\{\hat{c}, \hat{c}^\dagger\} = \hat{c}\hat{c}^\dagger + \hat{c}^\dagger\hat{c} = 1, \quad \{\hat{c}, \hat{c}\} = \{\hat{c}^\dagger, \hat{c}^\dagger\} = 0. \quad (3.25)$$

Note que, por meio da relação de anti-comutação, obtemos $\hat{c}^\dagger\hat{c}^\dagger = \hat{c}\hat{c} = 0$. Isso significa que aplicar o operador de criação ou aniquilação mais de uma vez em um mesmo estado quântico sempre resultará em zero, satisfazendo o princípio de exclusão de Pauli.

Definindo o operador número de forma análoga ao caso bosônico $\hat{n} = \hat{c}^\dagger\hat{c}$, portanto $1 - \hat{n} = \hat{c}\hat{c}^\dagger$, obtemos

$$\hat{n}(1 - \hat{n}) = \hat{c}^\dagger\hat{c}\hat{c}\hat{c}^\dagger = 0, \quad (3.26)$$

de tal forma que $\hat{n}(1 - \hat{n}) = 0$, logo só existem dois valores possíveis para o número de ocupação: $n = 0, 1$. De forma análoga ao caso bosônico, é possível demonstrar que $\{\hat{n}, \hat{c}^\dagger\} = \hat{c}^\dagger$ e $\{\hat{n}, \hat{c}\} = \hat{c}$, usando a primeira relação

$$\hat{n}(\hat{c}^\dagger|n\rangle) = (1 - n)(\hat{c}^\dagger|n\rangle), \quad (3.27)$$

novamente o estado gerado pela aplicação do operador de criação também é autoestado do operador número, agora com autovalor $1 - n$. Então $\hat{c}^\dagger|n\rangle = C|1 - n\rangle$, em que C é a constante dada por $\langle n|(1 - \hat{n})|n\rangle = 1 - n = |C|^2$. Fazendo o mesmo para a segunda relação, obtemos

$$\hat{c}^\dagger|n\rangle = \sqrt{1 - n}|1 - n\rangle, \quad (3.28)$$

$$\hat{c}|n\rangle = \sqrt{n}|1 - n\rangle. \quad (3.29)$$

Para analisar a Termodinâmica gerada pelos estados desses operadores fermiônicos, usaremos novamente o formalismo grande canônico

$$K = \sum_k E_k N_k - \mu N_k = \sum_k (E_k - \mu) c_k^\dagger c_k, \quad (3.30)$$

A função partição para um estado de momento k, definindo $\xi_k = E_k - \mu$, é dada por

$$\mathcal{Z}_k = 1 + e^{-\beta\xi_k}. \quad (3.31)$$

Com esse resultado é possível obter de prontidão o valor esperado do número de partículas

com momento k , dado por

$$\langle n_k \rangle = f_k = \frac{1}{e^{\beta(E_k - \mu)} + 1}, \quad (3.32)$$

fornecendo a distribuição de Fermi-Dirac como esperado.

3.2 Interações

Utilizando todo o aporte teórico discutido até então, é possível analisar como se dão as interações entre partículas no formalismo de segunda quantização.

Um hamiltoniano quadrático, do tipo da equação (3.4), é trivialmente solúvel, fornecendo todo o espectro de energia e, portanto, através da função partição, todas as quantidades termodinâmicas. No entanto, a introdução de interações muitas vezes torna o sistema insolúvel analiticamente, sendo necessário adotar algumas aproximações. Caso a interação envolva duas partículas simultaneamente têm-se o surgimento de termos quárticos no hamiltoniano. Para sistemas magnéticos, em que ocorrem interações entre dois elétrons e um mágnon, por exemplo, os termos serão de ordem ainda superior.

O hamiltoniano de um sistema de N partículas, cada uma com hamiltoniano \hat{H}_i que interagem aos pares, pode ser escrito da seguinte maneira:

$$\hat{H} = \sum_i \hat{H}_i + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \hat{V}(r_j - r_i). \quad (3.33)$$

Comumente a parte diagonalizada e quadrática é definida como $\hat{H}_0 \equiv \sum_i \hat{H}_i$. Utilizando uma base de operadores $\{\hat{a}_\lambda\}$ podemos reescrever o hamiltoniano como:

$$H = \sum_{\lambda\lambda'} H_{\lambda\lambda'} \hat{a}_\lambda^\dagger \hat{a}_{\lambda'} + \frac{1}{2} \sum_{\alpha\beta\gamma\lambda} V_{\alpha\beta\gamma\lambda} \hat{a}_\alpha^\dagger \hat{a}_\beta^\dagger \hat{a}_\gamma \hat{a}_\lambda, \quad (3.34)$$

em que consideramos o caso geral $H_{\lambda\lambda'} = \int dr \phi_\lambda^*(r) \hat{H}_0 \phi_{\lambda'}(r)$, com as funções ϕ não necessariamente sendo autofunções do hamiltoniano sem interações, caso seja teremos $H_{\lambda\lambda'} = E_\lambda \delta_{\lambda\lambda'}$. Note que o acento circunflexo foi omitido nos operadores de criação e aniquilação por simplicidade. Já o termo de interação, que corresponde a eliminar os dois estados das partículas λ e γ e criar os estados α e β com amplitude de probabilidade $V_{\alpha\beta\gamma\lambda}$ dado por:

$$V_{\alpha\beta\gamma\lambda} = \int dr \int dr' \phi_\alpha^*(r) \phi_\beta(r) \hat{V}(r - r') \phi_\gamma^*(r') \phi_\lambda(r'). \quad (3.35)$$

Os diagramas de Feynman são extremamente úteis para visualizar as interações neste formalismo, exemplificada na figura (3.1). Como operar com os termos de ordem superior devido as interações será abordado na seção de Teoria de Resposta Linear.

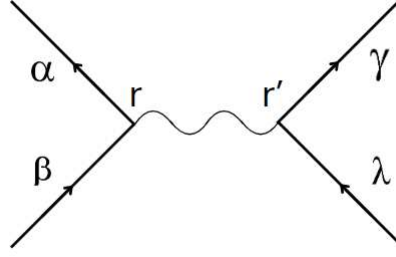


Figura 3.1: Diagrama de Feynman que representa partículas por linhas retas e a interação por uma linha ondulada, o tempo passa de baixo para cima. As partículas beta e lambda são aniquiladas e posteriormente são criadas as partículas alfa e gama.

É necessário escrever sempre os operadores de aniquilação a direita dos operadores de criação, para evitar problemas de auto-interação das partículas. Por exemplo, no estado de vácuo bosônico para estado α e uma partícula em λ não há interação e portanto $\langle 0|\hat{V}|0\rangle = 0$, porém

$$\langle 0|\hat{V}|0\rangle = \langle 0|\sum_{\lambda\alpha} V_{\alpha\lambda} a_{\lambda} a_{\alpha} a_{\lambda}^{\dagger} a_{\alpha}^{\dagger}|0\rangle = V_{\alpha\lambda} \neq 0, \quad (3.36)$$

que indica uma interação da partícula com ela mesma, gerando divergências.

3.3 Evolução temporal

Para analisar a evolução temporal de um sistema no formalismo de segunda quantização utilizamos a representação de Heisenberg. Como abordado anteriormente, todos os operadores são expressos em termos de operadores de criação e aniquilação. Portanto, precisamos conhecer sua evolução temporal nos sistemas de solução conhecida, ou seja, sistemas quadráticos. Seja o hamiltoniano dado por:

$$\hat{H} = \sum_n \hbar\omega_n a_n^{\dagger} a_n, \quad (3.37)$$

cujo operador de evolução temporal é $U(t) = e^{i\frac{\hat{H}t}{\hbar}}$.

O operador de aniquilação evolui segundo a equação de Heisenberg, que fornece a equação diferencial

$$\dot{\hat{a}}_m(t) = \frac{i}{\hbar} \sum_n \hbar\omega_n (-\hat{a}_n) \delta_{m,n} = -\hbar\omega_m \hat{a}_m(t), \quad (3.38)$$

com equações análogas para o operador de criação. As soluções para as equações diferenciais são

$$\hat{a}_m(t) = \hat{a}_m(0)e^{-i\omega_m t} ; \hat{a}_m^{\dagger}(t) = \hat{a}_m^{\dagger}(0)e^{i\omega_m t}, \quad (3.39)$$

onde os operadores de criação e aniquilação podem ser bosônicos ou fermiônicos.

3.4 Mudanças de base e diagonalização

Um dos processos matemáticos centrais para a resolução de qualquer problema quântico é a mudança de base, especialmente no processo de diagonalização do hamiltoniano, onde a base original dos operadores é substituída pela base de autoestados do hamiltoniano, fornecendo o espectro de energias do sistema.

No formalismo de segunda quantização, a situação não é diferente. Em geral, um hamiltoniano quadrático não precisa estar na forma diagonal no operador número, como na equação (3.37). A pergunta fundamental é: como e o que significa mudar de base nesse contexto?

Considere um sistema de operadores de criação e aniquilação de elétrons, com termos não diagonais como $c_k^\dagger c_l^\dagger$. Podemos realizar uma transformação de base, definindo novos operadores b_k e b_k^\dagger como combinações lineares dos operadores eletrônicos originais. Impondo certas condições à transformação, é possível obter um hamiltoniano com apenas termos diagonais nos novos operadores, do tipo $b_k^\dagger b_k$. Consequentemente, o espectro de energia é calculado utilizando os novos operadores e os estados número correspondentes, não mais os elétrons originais.

As partículas descritas pelos operadores b_k e b_k^\dagger , conhecidas como quasi-partículas, emergem da superposição dos operadores eletrônicos e da concatenação das interações do sistema. Esse fenômeno pode ser interpretado como uma relação dialética entre as partículas e o sistema, pois a quantidade de partículas arranjadas de forma específica altera o próprio comportamento das excitações elementares, semelhante a transformação de quantidade em qualidade abordada por Hegel em seus trabalhos. Em alguns casos, como no teorema de Nambu-Goldstone, as quasi-partículas estão associadas à quebra espontânea de simetrias. Por exemplo, em um sólido, a quebra da simetria de translação dos átomos leva à emergência de fônons, modos coletivos associados à propagação de ondas sonoras. A discussão sobre se essas partículas "realmente existem" ou são meramente modos coletivos se torna uma discussão filosófica. As quasi-partículas contribuem para fenômenos físicos observáveis, embora não possuam a mesma natureza das partículas fundamentais.

3.4.1 Caso bosônico

A hamiltoniana bosônica mais geral com apenas termos quadráticos tem a forma

$$\hat{H} = \frac{1}{2}(\lambda a^\dagger a + \lambda a a^\dagger + \alpha a^\dagger a^\dagger + \alpha a a). \quad (3.40)$$

Para simplificar a notação, os operadores de criação e aniquilação serão representados sem o circunflexo que normalmente denota um operador. Escrito na forma matricial

$$\hat{H} = \frac{1}{2} \Psi^\dagger \mathcal{H} \Psi = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} a^\dagger & a \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \lambda & \alpha \\ \alpha & \lambda \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a \\ a^\dagger \end{bmatrix}.$$

Omitimos os índices dos estados referentes aos operadores de criação e aniquilação, considerando apenas um tipo de bóson no hamiltoniano. Como tanto $a^\dagger a$ e $a a^\dagger$ são proporcionais

aos estados número, queremos apenas termos deste tipo no hamiltoniano. Dizendo de forma equivalente, desejamos encontrar novos espinores Ψ que diagonalizam a matriz \mathcal{H} .

Introduzimos então a chamada transformação de Bogoliubov para novos operadores β e β^\dagger , que são escritos como superposições dos antigos operadores da forma

$$a = c_1\beta + c_2\beta^\dagger ; \beta = c_1a - c_2a^\dagger, \quad (3.41)$$

em que as constantes tem um vínculo criado pela condição dos novos operadores comutarem como bósons

$$\begin{aligned} [\beta, \beta^\dagger] &= c_1^2[a, a^\dagger] + c_2^2[a^\dagger, a] - c_1c_2([a^\dagger, a^\dagger] + [a, a]) \\ [\beta, \beta^\dagger] &= c_1^2 - c_2^2 = 1. \end{aligned} \quad (3.42)$$

Portanto, uma escolha útil devido ao vínculo imposto é tomar $c_1 = \cosh \theta$ e $c_2 = \sinh \theta$, com o ângulo a ser determinado, tornando a transformação de Bogoliubov como

$$a = \cosh \theta \beta + \sinh \theta \beta^\dagger ; \beta = \cosh \theta a - \sinh \theta a^\dagger, \quad (3.43)$$

O hamiltoniano escrito em termos dos novos operadores é

$$\begin{aligned} \hat{H} &= \frac{\lambda}{2}(\cosh \theta \beta^\dagger + \sinh \theta \beta)(\cosh \theta \beta + \sinh \theta \beta^\dagger) \\ &+ \frac{\alpha}{2}(\cosh \theta \beta^\dagger + \sinh \theta \beta)(\cosh \theta \beta^\dagger + \sinh \theta \beta) + h.c., \end{aligned} \quad (3.44)$$

com h.c. sendo o hermitiano conjugado dos mesmos dois termos acima. Assim, temos

$$\begin{aligned} \hat{H} &= \frac{1}{2}(\lambda \cosh 2\theta + \alpha \sinh 2\theta)(\beta^\dagger \beta + \beta \beta^\dagger) \\ &+ \frac{1}{2}(\alpha \cosh 2\theta + \lambda \sinh 2\theta)(\beta \beta + \beta^\dagger \beta^\dagger). \end{aligned} \quad (3.45)$$

Sendo assim, para anular termos não diagonais, é necessário ter

$$\alpha \cosh 2\theta + \lambda \sinh 2\theta = 0 \iff \tanh 2\theta = -\frac{\lambda}{\alpha}. \quad (3.46)$$

O hamiltoniano diagonalizado é fornecido utilizando esses resultados por:

$$\hat{H} = \frac{1}{2}\sqrt{\lambda^2 - \alpha^2}(\beta^\dagger \beta + \beta \beta^\dagger) = E(\beta^\dagger \beta + \frac{1}{2}), \quad (3.47)$$

com $E = \sqrt{\lambda^2 - \alpha^2}$. Na forma matricial o hamiltoniano é expresso como:

$$\hat{H} = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} \beta^\dagger & \beta \end{bmatrix} \begin{bmatrix} E & 0 \\ 0 & E \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \beta \\ \beta^\dagger \end{bmatrix}.$$

Note que as constantes do hamiltoniano original foram tomadas como reais. Para um caso

mais geral, devemos incluir constantes complexas na transformação de Bogoliubov, da forma:

$$a = e^{i\phi_1/2} \cosh \theta \beta + e^{i\phi_2/2} \sinh \theta \beta^\dagger. \quad (3.48)$$

3.4.2 Caso fermiônico

Para operadores fermiônicos, devemos lembrar que $cc = c^\dagger c^\dagger = 0$. Assim, diferentemente do caso bosônico, o hamiltoniano geral não possui esses termos. Se considerarmos apenas operadores atuando sobre um único estado quântico, o hamiltoniano quadrático será trivialmente diagonal. Por essa razão, analisaremos um sistema fermiônico de spin 1/2, no qual os operadores agem no mesmo estado espacial, mas misturam estados de spin.

Seja o hamiltoniano geral em termos das constantes $E \in \mathbb{R}$ e $g \in \mathbb{C}$:

$$H = E(c_\uparrow^\dagger c_\uparrow + c_\downarrow^\dagger c_\downarrow) - g c_\uparrow^\dagger c_\downarrow^\dagger - g^* c_\downarrow c_\uparrow, \quad (3.49)$$

uma escolha de nova base de operadores é escrita como:

$$\begin{aligned} b_\uparrow &= u c_\uparrow - v c_\downarrow^\dagger; & b_\downarrow &= u c_\downarrow + v c_\uparrow^\dagger \\ c_\uparrow &= u^* b_\uparrow + v b_\downarrow^\dagger; & c_\downarrow &= u^* b_\downarrow - v b_\uparrow^\dagger, \end{aligned} \quad (3.50)$$

em que $u \in \mathbb{C}$ e $v \in \mathbb{C}$. Os novos operadores mantêm o caráter fermiônico e portanto a relação de comutação cria o vínculo fornecido pela relação:

$$\begin{aligned} \{b_\sigma, b_\sigma^\dagger\} &= |u|^2 \{c_\sigma, c_\sigma^\dagger\} - |v|^2 \{c_\sigma^\dagger, c_\sigma\} - v u^* \{c_{-\sigma}^\dagger, c_\sigma^\dagger\} - v u^* \{c_\sigma, c_{-\sigma}\} \\ \{b_\sigma, b_\sigma\} &= |u|^2 + |v|^2 = 1, \end{aligned} \quad (3.51)$$

dessa forma, uma escolha conveniente ao vínculo é $u = e^{-i\phi/2} \cos \theta$ e $v = e^{i\phi/2} \sin \theta$, a fim de obter o cancelamento das fases. Substituindo os operadores em termos da nova base no hamiltoniano resulta em:

$$\begin{aligned} \hat{H} &= (E|u|^2 - E|v|^2 + g u v^* + g^* v u^*) (b_\uparrow^\dagger b_\uparrow + b_\downarrow^\dagger b_\downarrow) \\ &+ (2E u v - g u^2 + g^* v^2) b_\uparrow^\dagger b_\downarrow^\dagger + (2E u^* v^* - g^* u^2 + g v^{*2}) b_\uparrow b_\downarrow. \end{aligned} \quad (3.52)$$

Para diagonalizar o hamiltoniano basta escolher um ângulo θ que elimine os termos fora da diagonal:

$$\begin{aligned} 2E|uv| - |g|(|u|^2 - |v|^2) &= 0 \\ 2E \sin(\theta) \cos(\theta) = |g|(\cos^2 \theta - \sin^2 \theta) &\iff \tan 2\theta = \frac{|g|}{E}, \end{aligned} \quad (3.53)$$

portanto:

$$\begin{aligned} \cos 2\theta &= \frac{E}{\sqrt{E^2 + |g|^2}} = \frac{|u|^2 - |v|^2}{\sqrt{E^2 + |g|^2}} \\ \sin 2\theta &= \frac{|g|}{\sqrt{E^2 + |g|^2}} = \frac{2|uv|}{\sqrt{E^2 + |g|^2}}, \end{aligned} \quad (3.54)$$

que finalmente fornece o hamiltoniano diagonalizado:

$$\hat{H} = (E(|u|^2 - |v|^2) + |g|2|uv|)(b_{\uparrow}^{\dagger}b_{\uparrow} + b_{\downarrow}^{\dagger}b_{\downarrow}) = U(b_{\uparrow}^{\dagger}b_{\uparrow} + b_{\downarrow}^{\dagger}b_{\downarrow}), \quad (3.55)$$

com a nova energia dos modos fermiônicos $U = \sqrt{E^2 + |g|^2}$.

3.5 Representações de spin

A matemática desenvolvida na seção anterior permite descrever as flutuações em diversos sistemas magnéticos, como o modelo de Heisenberg, representado na equação (2.4). Os estados quânticos e a álgebra dos spins estão intimamente conectados às relações de comutação entre as componentes de spin α de um sítio i na rede e β de outro sítio j , expressas como [36]:

$$[\hat{S}_i^{\alpha}, \hat{S}_j^{\beta}] = i\delta_{i,j}\varepsilon^{\alpha\beta\gamma}\hat{S}_i^{\gamma}, \quad (3.56)$$

onde $\varepsilon^{\alpha\beta\gamma}$ é o símbolo de Levi-Civita. Esse conjunto de relações de comutação define o grupo SU(2), com os spins atuando como geradores das transformações de rotação. Uma forma de gerar flutuações de spin é através da adição ou subtração de uma unidade de \hbar de spin. Para tratar essas flutuações, utilizamos os operadores $\hat{S}_i^{\pm} = \hat{S}_i^x \pm i\hat{S}_i^y$, que obedecem às seguintes regras de comutação:

$$[\hat{S}_i^z, \hat{S}_j^{\pm}] = \delta_{i,j}\hat{S}_i^{\pm} ; [\hat{S}_i^+, \hat{S}_j^-] = 2\delta_{i,j}\hat{S}_i^z. \quad (3.57)$$

É importante ressaltar que, desde que as regras de comutação sejam respeitadas, qualquer representação escolhida para os spins conseguirá reproduzir o sistema físico. Entretanto, em algumas situações, deve-se tomar cuidado com a introdução de estados não físicos adicionais provenientes de uma representação mais ampla.

Nesse contexto, os operadores de spin podem ser descritos em uma base da segunda quantização, utilizando quasi-partículas que representam as flutuações do sistema. Diversas representações podem ser adotadas para sistemas de spin. Neste trabalho, introduziremos brevemente uma representação relativamente comum, a de Holstein-Primakoff. Posteriormente, abordaremos a representação central para este estudo e o foco principal deste capítulo: a descrição via férmions de Majorana.

3.5.1 Representação de Holstein-Primakoff

Utilizando o modelo de Heisenberg como exemplo, os spins apresentam uma simetria global e contínua de rotação em suas orientações. O estado fundamental, em que todos os autoestados de \hat{S}_i^z apontam na mesma direção em todos os sítios, corresponde a uma quebra dessa simetria [36]. Como consequência, espera-se o surgimento de bósons de Nambu-Goldstone, que representam excitações de baixa energia.

Em uma situação semi-clássica ($S \gg 1$), na qual a rotação dos spins se assemelha à rotação dos momentos de dipolo magnéticos, as flutuações em torno do estado fundamental manifestam-se como pequenas distorções da configuração original, no limite de longos comprimentos de

onda.

Assumindo um valor fixo para S , utilizando os operadores de levantamento e abaixamento (\hat{S}_i^\pm) e adotando $\hbar = 1$, podemos definir o operador número como $\hat{n}_i = S - \hat{S}_i^z$ [39]. Como os autovalores de \hat{S}_i^z são $m = -S, -S + 1, \dots, S$, os autovalores do operador \hat{n}_i são inteiros no intervalo de 0 a $2S$.

Considerando um autoestado do operador \hat{S}_i^z denotado por $|m\rangle$, onde $n_i = S - m$, a aplicação do operador de abaixamento resulta em:

$$\hat{S}_i^- |m\rangle = \sqrt{(S+m)(S-m+1)} |m-1\rangle, \quad (3.58a)$$

$$\hat{S}_i^- |n_i\rangle = \sqrt{(n_i+1)(2S-n_i)} |n_i+1\rangle, \quad (3.58b)$$

enquanto a aplicação do operador de levantamento fornece:

$$\hat{S}_i^+ |n_i\rangle = \sqrt{n_i(2S-(n_i-1))} |n_i-1\rangle. \quad (3.59)$$

Comparando essas expressões com a atuação dos operadores bosônicos a_i^\dagger e a_i :

$$a_i^\dagger a_i |n_i\rangle = n_i |n_i\rangle, \quad (3.60a)$$

$$a_i^\dagger |n_i\rangle = \sqrt{n_i+1} |n_i+1\rangle, \quad (3.60b)$$

$$a_i |n_i\rangle = \sqrt{n_i} |n_i-1\rangle, \quad (3.60c)$$

podemos reescrever as atuações dos operadores de levantamento e abaixamento como [42]:

$$\hat{S}_i^- = a_i^\dagger \sqrt{2S - a_i^\dagger a_i}, \quad (3.61a)$$

$$\hat{S}_i^+ = \sqrt{2S - a_i^\dagger a_i} a_i, \quad (3.61b)$$

$$\hat{S}_i^z = S - a_i^\dagger a_i. \quad (3.61c)$$

A equação acima corresponde à chamada representação de Holstein-Primakoff, que preserva as relações de comutação das Equações (3.56) e (3.57). Na aproximação linear de ondas de spin, válida quando $\langle n_i \rangle \ll 2S$, temos:

$$\hat{S}_i^- \approx \sqrt{2S} a_i^\dagger, \quad (3.62a)$$

$$\hat{S}_i^+ \approx \sqrt{2S} a_i, \quad (3.62b)$$

$$\hat{S}_i^z = S - a_i^\dagger a_i. \quad (3.62c)$$

Os operadores de criação e aniquilação a_i^\dagger e a_i são interpretados como responsáveis por excitações de baixa energia sem massa, que descrevem quasi-partículas que transportam o spin, conhecidas como mágnons.

3.5.2 Representação de Majorana

A representação de Majorana é essencial para o desenvolvimento deste trabalho. Diferentemente da transformação de Holstein-Primakoff, que substitui os operadores de spin por operadores bosônicos, a transformação baseada em operadores de Majorana utiliza férmions reais (ou férmions de Majorana). Férmions complexos, como os elétrons, possuem operadores descritos na seção 3.1.3. No entanto, caso a definição de operador fermiônico seja baseada unicamente na condição de anticomutatividade, existe outro tipo de operador fermiônico cuja característica é ser real, isto é, o operador de criação é idêntico ao operador de aniquilação.

Os férmions de Majorana foram inicialmente propostos em um contexto completamente diferente, no domínio da física de altas energias. Com a equação de Dirac, que unifica a teoria da relatividade restrita com a mecânica quântica, proporcionando uma descrição para partículas de spin $1/2$, Ettore Majorana encontrou soluções que não distinguem partículas de antipartículas. Uma importante noção desenvolvida foi a chamada condição de realidade, em que os campos spinoriais satisfazem [56].

As semelhanças entre os operadores descritos nesta seção e os férmions de Majorana residem, principalmente, na condição de realidade e na antissimetria perante trocas. Contudo, é importante destacar que essas semelhanças são limitadas. Um operador de Majorana, no contexto de matéria condensada e baixas energias, não corresponde ao férmion descrito por Majorana no contexto de altas energias. Na matéria condensada, os operadores de Majorana surgem de formas distintas, desde operadores que, aos pares, formam elétrons [72] até operadores que descrevem excitações em sistemas spintrônicos [4]. Neste trabalho, abordaremos apenas o segundo caso.

3.5.3 Operadores de Majorana

Sejam dois operadores de Majorana f e f' , muitas vezes chamados de operadores hermitianos, auto-conjugados ou férmions reais, que seguem as seguintes condições:

- $f^\dagger = f$, $f'^\dagger = f'$ (realidade),
- $ff' = -f'f$ (anticomutatividade de Grassman),
- $ff = f'f' = 1$ (unipotência).

A terceira condição corresponde a uma escolha de normalização. A escolha da definição das condições usando dois operadores de Majorana, que parece arbitrária de início, se justifica pela necessária composição de dois férmions reais em um férmion complexo, da forma

$$f = c^\dagger + c; f' = i(c^\dagger - c). \quad (3.63)$$

Os operadores fermiônicos complexos ou usuais obedecem $\{c, c^\dagger\} = 1$, com operador número definido como $\hat{n} = c^\dagger c = (1 + iff')/2$. Note que o pareamento de dois Majoranas não é simplesmente uma escolha; como os operadores reais são autoconjugados, não é possível

construir uma base de operadores número, como feito nas Seções 3.1.2 e 3.1.3, utilizando duas atuações distintas: uma para criar e outra para aniquilar uma partícula. Dessa forma, o espaço fermiônico real $2N$ -dimensional é substituído pelo espaço de Fock N -dimensional de férmions complexos, onde é viável a construção de estados número. Um sistema com número ímpar de férmions de Majorana é considerado não físico.

Considere a base de autoestados de um operador complexo:

$$|0\rangle = c|1\rangle, \quad |1\rangle = c^\dagger|0\rangle, \quad c^\dagger|1\rangle = 0, \quad c|0\rangle = 0, \quad (3.64)$$

e, utilizando a equação (3.63), a atuação dos férmions de Majorana resulta em:

$$f|1\rangle = |0\rangle, \quad f|0\rangle = |1\rangle, \quad (3.65a)$$

$$f'|1\rangle = -i|0\rangle, \quad f'|0\rangle = i|1\rangle. \quad (3.65b)$$

Portanto, os operadores de Majorana, a menos de uma fase complexa $U(1)$, alteram a paridade de ocupação dos férmions complexos. Os autovalores dos operadores de Majorana podem ser determinados pela condição de unipotência, $f^2 = \pm 1$, com autoestados:

$$f(|0\rangle \pm |1\rangle) = \pm(|0\rangle \pm |1\rangle), \quad (3.66a)$$

$$f'(|0\rangle \pm i|1\rangle) = \pm(|0\rangle \pm i|1\rangle). \quad (3.66b)$$

Logo, os autoestados dos operadores de Majorana são superposições de estados fermiônicos convencionais. O operador hermitiano $if f' = 2n - 1$, atuando sobre um estado de ocupação, mede sua paridade, retornando $+1$ para $|1\rangle$ e -1 para $|0\rangle$.

Os férmions de Majorana sempre aparecem em pares, formando férmions reais. Entretanto, não há uma única maneira de realizar esse pareamento. Por exemplo, considere quatro operadores de Majorana distintos, f_1, f_2, f_3, f_4 , e dois possíveis pareamentos:

$$\begin{aligned} c_1 &= \frac{f_1 + if_2}{2}, & c_2 &= \frac{f_3 + if_4}{2}, \\ b_1 &= \frac{f_1 + if_3}{2}, & b_2 &= \frac{f_2 + if_4}{2}, \end{aligned} \quad (3.67)$$

com $\{c_1, c_2, b_1, b_2\}$ (e seus hermitianos) sendo operadores fermiônicos complexos.

Existe uma transformação de Bogoliubov que conecta essas duas escolhas [43]:

$$\begin{aligned} c_1 &= \frac{1}{2}(b_1 + b_1^\dagger) + \frac{i}{2}(b_2 + b_2^\dagger), \\ c_2 &= \frac{i}{2}(b_1 - b_1^\dagger) + \frac{1}{2}(b_2 - b_2^\dagger). \end{aligned} \quad (3.68)$$

Concluimos, então, que os diferentes conjuntos de pareamentos resultam na mesma física para o sistema, salvo por uma transformação de Bogoliubov.

3.5.4 Representação de Kitaev

Uma configuração possível para definir a representação de spin foi utilizada por Kitaev [4], que emprega quatro operadores de Majorana diferentes para cada sítio da rede, denotados por b_i^x, b_i^y, b_i^z e c_i . Conseqüentemente, um sistema com N sítios terá $4N$ férmions reais e $2N$ férmions complexos após o pareamento. Cada spin será representado nessa base por

$$\sigma_i^\alpha = ib_i^\alpha c_i, \quad (3.69)$$

onde $\alpha = x, y, z$. Para que essa representação seja válida, é necessário que os spins continuem respeitando a propriedade de hermiticidade e as relações de comutação das Equações (3.56) e (3.57). A hermiticidade dos operadores é facilmente verificada utilizando as condições vistas na seção 3.5.3:

$$(\sigma_i^\alpha)^\dagger = (ib_i^\alpha c_i)^\dagger = -ic_i b_i^\alpha = ib_i^\alpha c_i = \sigma_i^\alpha. \quad (3.70)$$

As regras de comutação para as matrizes de Pauli

$$\begin{aligned} [\sigma^\alpha, \sigma^\beta] &= \sigma^\alpha \sigma^\beta - \sigma^\beta \sigma^\alpha = 2i\varepsilon^{\alpha\beta\gamma} \sigma^\gamma, \\ \{\sigma^\alpha, \sigma^\beta\} &= \sigma^\alpha \sigma^\beta + \sigma^\beta \sigma^\alpha = 2\delta^{\alpha\beta} \mathbb{1}, \end{aligned} \quad (3.71)$$

podem ser condensadas na equação $\sigma_i^\alpha \sigma_i^\beta = i\varepsilon^{\alpha\beta\gamma} \sigma_i^\gamma + \delta^{\alpha\beta} \mathbb{1}$. Verificando a representação acima, temos:

$$\sigma^\alpha \sigma^\beta = i^2 (b_i^\alpha c_i) (b_i^\beta c_i) = b_i^\alpha b_i^\beta. \quad (3.72)$$

Para $\alpha = \beta$, usando a unipotência dos Majoranas, $b_i^\beta b_i^\beta = \mathbb{1}$, e como esperado $\sigma^\alpha \sigma^\alpha = \mathbb{1}$. Entretanto, para o caso em que $\alpha \neq \beta$, devemos ter:

$$b_i^\alpha b_i^\beta = i\varepsilon^{\alpha\beta\gamma} \sigma_i^\gamma = -\varepsilon^{\alpha\beta\gamma} b_i^\gamma c_i, \quad (3.73)$$

ou, equivalentemente,

$$b_i^x b_i^y b_i^z c_i = \mathbb{1}. \quad (3.74)$$

O vínculo necessário para preservar a álgebra dos spins constitui um caso específico de um conjunto arbitrário de Majoranas. Assim, a representação de Kitaev, que gera um espaço estendido de Fock $4N$ -dimensional $\tilde{\mu}$, possui um subespaço físico $\mu \subset \tilde{\mu}$ definida pela equação (3.74). Para distinguir o espaço estendido do espaço físico, definimos o operador de restrição:

$$\hat{D}_i = b_i^x b_i^y b_i^z c_i, \quad (3.75)$$

onde um estado do subespaço físico é identificado quando a atuação do operador D_i resulta na identidade:

$$|\xi\rangle \in \mu \iff D_i |\xi\rangle = |\xi\rangle. \quad (3.76)$$

Os operadores definidos na equação (3.69) comutam com o operador \hat{D}_i , preservando assim o subespaço físico e garantindo a validade da representação pelo espaço estendido. Note

também que o operador D_i possui as propriedades:

$$\hat{D}_i^\dagger = \hat{D}_i, \quad \hat{D}_i^2 = 1, \quad (3.77)$$

assumindo, portanto, dois autovalores possíveis: $\hat{D}_i = \pm 1$. Além disso, ele apresenta a característica de localidade [43], ou seja, $[\hat{D}_i, \hat{D}_j] = 0$. Como a atuação do operador \hat{D}_i no subespaço físico corresponde ao autovalor $+1$, podemos subdividir o espaço de Hilbert fermiônico \mathcal{H} no subespaço físico \mathcal{H}^+ e em seu complemento ortogonal $(\mathcal{H}^+)^\perp$, sendo este último composto por estados com autovalor -1 . Essa divisão é expressa pela soma direta:

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}^+ \oplus (\mathcal{H}^+)^\perp. \quad (3.78)$$

O subespaço físico pode ser selecionado por meio do operador de projeção que anula qualquer espaço de Fock com pelo menos um estado de autovalor -1 :

$$P = \prod_{i=1}^N \left(\frac{1 + \hat{D}_i}{2} \right) \Rightarrow P\mathcal{H} = \mathcal{H}^+. \quad (3.79)$$

3.6 Teoria de resposta linear

O principal esforço deste trabalho reside no estudo da corrente de spin em uma interface com interação, que traz consigo um desafio ainda não abordado: lidar com sistemas interagentes. No capítulo de segunda quantização, vimos como representar um sistema utilizando os operadores de criação e aniquilação, de forma que sistemas quadráticos (como o oscilador harmônico) possuem solução exata, com espectro de energia e evolução temporal conhecidos.

Na seção 3.2, discutimos brevemente o papel das interações, que, em geral, introduzem termos de ordem superior. Para tratar de um hamiltoniano com interação, é necessário desenvolver um formalismo que permita descrever as evoluções temporais e os autoestados com base no hamiltoniano quadrático. Além disso, para potenciais fracos, é possível utilizar uma aproximação linear nos operadores responsáveis pela nova evolução temporal, compondo a chamada Teoria de Resposta Linear.

3.6.1 Formalismo de interação

Em mecânica quântica, existem três formalismos principais utilizados para a construção das amplitudes de probabilidade e valores esperados de observáveis de um sistema: o formalismo de Schrödinger, o de Heisenberg e o de Feynman (que não será abordado neste trabalho). No formalismo de Schrödinger, os bras da base de autoestados e os operadores permanecem fixos no tempo, enquanto os kets do estado do sistema evoluem temporalmente conforme a equação de Schrödinger, considerando o hamiltoniano total do sistema. No formalismo de Heisenberg, os kets de estado do sistema são fixos no tempo, enquanto os operadores evoluem temporalmente conforme a equação de Heisenberg, e os bras da base de autoestados evoluem retroativamente no tempo. Em ambos os formalismos, a evolução temporal é governada pelo hamiltoniano total

do sistema.

Para sistemas com potenciais de interação, que impossibilitam uma solução analítica, há um formalismo mais adequado que permite descrever a evolução do sistema sem o termo de interação: o formalismo de Dirac ou de interação. Em geral, nos interessaremos por potenciais fracos que permitam aproximações nos resultados.

Seja o hamiltoniano de um sistema interagente dado por

$$H = H_0 + V, \quad (3.80)$$

onde o termo H_0 possui soluções conhecidas, enquanto V representa um potencial com termos de ordem superior. Nesta seção, os operadores não serão indicados pelo uso do circunflexo, uma notação que será reservada para outro propósito. O valor esperado de um operador arbitrário O , assumindo a simplificação $\hbar = 1$, é dado por

$$\langle O(t) \rangle = \langle e^{iHt} O e^{-iHt} \rangle = \langle e^{iHt} e^{-iH_0 t} (e^{iH_0 t} O e^{-iH_0 t}) e^{iH_0 t} e^{-iHt} \rangle. \quad (3.81)$$

Na última igualdade, multiplicamos pela identidade $e^{-iH_0 t} e^{iH_0 t} = \mathbb{1}$. Definimos a evolução temporal de um operador em relação a H_0 como $\hat{O}(t) = e^{iH_0 t} O e^{-iH_0 t}$. Dessa forma, a evolução temporal do operador é conhecida. Note que os estados usados para calcular o valor esperado, omitidos na equação 3.81, ainda são referentes ao hamiltoniano total do sistema.

Ademais, o termo restante poderia ser simplificado como $e^{iHt} e^{-iH_0 t} = e^{iVt}$ se $[H, H_0] = 0$, o que não ocorre em geral. Definindo o operador $\mathcal{U}(t) = e^{iH_0 t} e^{-iHt}$, podemos verificar que sua derivada temporal fornece:

$$\frac{d\mathcal{U}(t)}{dt} = -i\hat{V}(t)\mathcal{U}(t). \quad (3.82)$$

Integrando a última equação, obtemos uma equação integral autoconsistente dada por:

$$\mathcal{U}(t) = \mathbb{1} - i \int_0^t \hat{V}(t') \mathcal{U}(t') dt'. \quad (3.83)$$

Substituindo o operador dentro da integral pela mesma equação acima, obtemos:

$$\mathcal{U}(t) = \mathbb{1} - i \int_0^t \hat{V}(t') dt' + (-i)^2 \int_0^t dt' \int_0^{t'} dt'' \hat{V}(t') \hat{V}(t'') \mathcal{U}(t''). \quad (3.84)$$

Realizando a substituição repetidamente, quase temos uma série de Taylor para exponencial. Contudo, como as integrais no tempo são diferentes e os operadores em tempos distintos não necessariamente comutam, não podemos rearranjar para formar a série. Para isso, utilizamos o operador de ordenamento temporal, que usa funções degrau para garantir que operadores sejam sempre arranjados da esquerda para direita do maior tempo para o menor. Sejam dois operadores \hat{V} , em tempos distintos t_1 e t_2 , a atuação do operador de ordenamento temporal na multiplicação dos operadores fornece:

$$T[\hat{V}(t_1)\hat{V}(t_2)] = \theta(t_1 - t_2)\hat{V}(t_1)\hat{V}(t_2) + \theta(t_2 - t_1)\hat{V}(t_2)\hat{V}(t_1). \quad (3.85)$$

Caso $t_1 > t_2$ a atuação do ordenamento temporal fornece $\hat{V}(t_1)\hat{V}(t_2)$, caso contrário fornece $\hat{V}(t_2)\hat{V}(t_1)$. Podemos com isso organizar as integrações com o operador de ordenamento da forma:

$$\int_0^t dt_1 \int_0^{t_1} dt_2 \hat{V}(t_1)\hat{V}(t_2) = \frac{1}{2} \int_0^t dt_1 \int_0^t dt_2 T[\hat{V}(t_1)\hat{V}(t_2)] = \frac{1}{2} T \left[\int_0^t dt \hat{V}(t) \right]^2 \quad (3.86)$$

Reescrevemos, então, a série infinita como:

$$\mathcal{U}(t) = \mathbb{1} - i \int_0^t dt_1 \hat{V}(t_1) + \frac{(-i)^2}{2} T \left[\int_0^t dt \hat{V}(t) \right]^2 + \frac{(-i)^3}{3!} T \left[\int_0^t dt \hat{V}(t) \right]^3 + \dots, \quad (3.87)$$

$$\mathcal{U}(t) = T \left[\sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-i)^n}{n!} \int_0^t dt \hat{V}(t) \right]^n, \quad (3.88)$$

A série infinita assume a forma da função exponencial do tipo:

$$\mathcal{U}(t) = T \left[e^{-i \int_0^t \hat{V}(t') dt'} \right], \quad (3.89)$$

onde T representa o operador de ordenamento temporal. Este formalismo resulta em uma evolução temporal mais simples para os operadores, em troca de uma formulação mais complexa para o operador de evolução temporal. Assim, podemos sintetizar as diferenças entre os formalismos citados com base na evolução do estado do sistema e dos operadores [42], como mostrado a seguir:

- **Schrödinger:**

1. O estado do sistema é tempo dependente com os kets da base de autoestados do hamiltoniano estacionários. A amplitude probabilidade de transição do estado sistema para um autoestado $|b\rangle$ da base do hamiltoniano é fornecida por:

$$\langle b(0) | \psi(t) \rangle = \langle b(0) | e^{-iHt} | \psi(0) \rangle. \quad (3.90)$$

2. Os operadores são independentes do tempo.

- **Heisenberg:**

1. O estado do sistema é tempo independente, com os kets da base de autoestados do hamiltoniano evoluindo retroadamente no tempo. A amplitude probabilidade de transição do estado sistema para um autoestado $|b\rangle$ da base do hamiltoniano é fornecida por

$$\langle b(-t) | \psi(0) \rangle = \langle b(0) | e^{-iHt} | \psi(0) \rangle. \quad (3.91)$$

2. Os operadores dependem do tempo, evoluindo conforme:

$$O(t) = e^{iHt} O(t=0) e^{-iHt}. \quad (3.92)$$

• **Interação:**

1. O estado do sistema depende do tempo, com evolução descrita por:

$$|\hat{\psi}(t)\rangle = \mathcal{U}(t)|\hat{\psi}(0)\rangle, \quad (3.93)$$

em que $|\hat{\psi}(t)\rangle$ designa o estado do sistema no formalismo de interação, não um operador.

2. Os operadores dependem do tempo, evoluindo sem interação conforme:

$$\hat{O}(t) = e^{iH_0t} O(t=0) e^{-iH_0t}. \quad (3.94)$$

3.6.2 Matriz S

Para generalizar a evolução temporal de um tempo qualquer t' para outro tempo t , definimos a matriz de espalhamento $S(t, t')$ como

$$|\hat{\psi}(t)\rangle = S(t, t')|\hat{\psi}(t')\rangle, \quad (3.95)$$

usando a equação (3.93) e a equação acima obtemos

$$|\hat{\psi}(t)\rangle = \mathcal{U}(t)|\hat{\psi}(0)\rangle = S(t, t')\mathcal{U}(t')|\hat{\psi}(0)\rangle. \quad (3.96)$$

De forma que a matriz S pode ser escrita como

$$S(t, t') = \mathcal{U}(t)\mathcal{U}^\dagger(t') = T \exp \left[-i \int_{t'}^t \hat{V}(t') dt' \right], \quad (3.97)$$

e o operador possui três propriedades importantes:

1. $S(t, t) = \mathbb{1}$,
2. $S^\dagger(t, t') = S(t', t)$,
3. $S(t, t'')S(t'', t') = S(t, t')$.

Considerando apenas os casos de temperatura zero, os valores esperados serão calculados a partir do estado fundamental de H , $|\hat{\psi}_0\rangle$. No entanto, as soluções conhecidas referem-se apenas ao hamiltoniano sem interação, H_0 , cujo estado fundamental é, por convenção, denotado por $|\phi_0\rangle$. O formalismo de interação, desenvolvido para determinar os autovalores e autoestados do hamiltoniano completo, baseia-se em autoestados ainda não determinados. Para contornar esse

problema, é necessário relacionar os dois estados fundamentais por meio de uma transformação adiabática.

Suponhamos que, em um tempo muito anterior, o potencial de interação estivesse desligado. Nesse caso, o sistema estaria no estado fundamental de H_0 . Assim, para $t \rightarrow -\infty$, temos $V = 0$ e, conseqüentemente:

$$|\hat{\psi}_0(t)\rangle = S(t, -\infty)|\phi_0\rangle, \quad (3.98)$$

de modo que os efeitos do potencial de interação não influenciam o estado fundamental em um passado distante. Posteriormente, a matriz de espalhamento transporta o estado adiabaticamente para o presente, considerando a interação. Além disso, assumimos que, em um futuro muito distante, o sistema retorna ao estado sem interação, diferindo no máximo por uma fase:

$$|\hat{\psi}_0(\infty)\rangle = S(\infty, t)|\hat{\psi}_0(t)\rangle = e^{iL}|\phi_0\rangle. \quad (3.99)$$

Os estados nos extremos temporais ($|\hat{\psi}_0(\infty)\rangle$ e $|\hat{\psi}_0(-\infty)\rangle$) devem diferir apenas por uma fase. Assim, temos:

$$\langle\phi_0|S(\infty, -\infty)|\phi_0\rangle = e^{iL} \Rightarrow S(\infty, -\infty) = e^{iL}. \quad (3.100)$$

Como consequência, o estado fundamental e a evolução dos operadores podem ser expressos em termos do hamiltoniano sem interação, ao custo da introdução das matrizes de espalhamento.

3.6.3 Funções de Green (T=0)

Os cálculos necessários para determinar a corrente de spin, entre outros problemas, têm como eixo central as funções de Green, também conhecidas como funções de correlação ou propagadores.

Definimos a função de Green para o elétron como:

$$G_\lambda(t-t') \equiv -i\langle T_t c_\lambda(t) c_\lambda^\dagger(t') \rangle, \quad (3.101)$$

com a média realizada utilizando o estado fundamental de H . Aqui, λ representa um número quântico genérico, e, no formalismo de Heisenberg, temos $c_\lambda(t) = e^{iHt} c_\lambda e^{-iHt}$.

No caso não perturbado, assumindo os autovalores de H_0 como E_λ , a evolução dos operadores é fornecida pela equação (3.39), e a função de Green é dada por:

$$G_\lambda^{(0)}(t-t') = -i\theta(t-t')e^{iE_\lambda(t-t')}\langle c_\lambda c_\lambda^\dagger \rangle + i\theta(t'-t)e^{iE_\lambda(t'-t)}\langle c_\lambda^\dagger c_\lambda \rangle, \quad (3.102)$$

onde o sinal invertido no segundo termo reflete a anticomutação dos operadores de criação e aniquilação.

Sabendo que as médias podem ser escritas em termos das distribuições de Fermi-Dirac, definidas na equação (3.32), como $\langle c_\lambda c_\lambda^\dagger \rangle = 1 - f_\lambda$ e $\langle c_\lambda^\dagger c_\lambda \rangle = f_\lambda$, e utilizando a propriedade

$\theta(t-t') + \theta(t'-t) = 1$, obtemos:

$$G_{\lambda}^{(0)}(t-t') = -ie^{iE_{\lambda}(t'-t)}[\theta(t-t') - f_{\lambda}]. \quad (3.103)$$

Para operadores bosônicos, no caso de potencial nulo, cálculos análogos resultam em:

$$D_{\lambda}^{(0)}(t-t') = -ie^{iE_{\lambda}(t'-t)}[\theta(t-t') + n_{\lambda}], \quad (3.104)$$

onde n_{λ} é a distribuição de Bose-Einstein definida na equação (3.24). No caso especial de banda vazia, com temperatura nula e apenas um elétron ocupando o estado, a função de Green não perturbada reduz-se a:

$$G_{\lambda}^{(0)}(t-t') = -ie^{iE_{\lambda}(t'-t)}\theta(t-t'). \quad (3.105)$$

Passando para o espaço das frequências, definimos a transformada de Fourier da função de Green com $t' = 0$ como:

$$\begin{aligned} \tilde{G}_{\lambda}^{(0)}(\omega) &= \int_{-\infty}^{\infty} G_{\lambda}(t)e^{i\omega t} dt, \\ \tilde{G}_{\lambda}^{(0)}(\omega) &= -i \int_{-\infty}^{\infty} \theta(t)e^{i(\omega-E_{\lambda})t} dt. \end{aligned} \quad (3.106)$$

Como essa integral não é bem definida para $t \rightarrow \infty$, introduzimos uma quantidade infinitesimal puramente imaginária $i\varepsilon$:

$$\tilde{G}_{\lambda}^{(0)}(\omega) = -i \int_0^{\infty} e^{i(\omega-E_{\lambda}+i\varepsilon)t} dt,$$

No final do cálculo tomamos $\varepsilon \rightarrow 0$. Desta forma, obtemos:

$$\tilde{G}_{\lambda}^{(0)}(\omega) = \frac{1}{\omega - E_{\lambda} + i\varepsilon}. \quad (3.107)$$

No caso com interação, no formalismo de Dirac, a evolução dos operadores fermiônicos é dada por:

$$\begin{aligned} c_{\lambda}(t) &= \mathcal{U}^{\dagger}(t)\hat{c}_{\lambda}(t)\mathcal{U}(t) = S(0,t)\hat{c}_{\lambda}(t)S(t,0), \\ c_{\lambda}^{\dagger}(t') &= S(0,t')\hat{c}_{\lambda}(t')S(t',0). \end{aligned} \quad (3.108)$$

Utilizando as definições da seção anterior, o estado fundamental de H pode ser expresso em termos do estado fundamental de H_0 como:

$$\begin{aligned} |\hat{\psi}_0(0)\rangle &= S(0, -\infty)|\phi_0\rangle, \\ \langle \hat{\psi}_0(0)| &= \langle \phi_0|S(-\infty, 0). \end{aligned} \quad (3.109)$$

Com a equação (3.100), podemos introduzir a identidade $S(-\infty, \infty)e^{-iL} = \mathbb{1}$. Substituindo a

fase fornecida, obtemos:

$$\langle \hat{\psi}_0(0) | = \frac{\langle \phi_0 | S(\infty, 0) }{\langle \phi_0 | S(-\infty, \infty) | \phi_0 \rangle}. \quad (3.110)$$

Os elementos de matriz da função de Green podem agora ser escritos em termos dos estados não perturbados e da evolução dos operadores em relação a H_0 como:

$$\langle \hat{\psi}_0 | c_\lambda(t) c_\lambda^\dagger(t') | \hat{\psi}_0 \rangle = \frac{{}_0 \langle S(\infty, t) \hat{c}_\lambda(t) S(t, t') \hat{c}_\lambda^\dagger(t') S(t', -\infty) \rangle_0}{{}_0 \langle S(\infty, -\infty) \rangle_0}. \quad (3.111)$$

Note que foi adotado a notação $|\phi_0\rangle \rightarrow \rangle_0$. Finalmente, com o auxílio do operador de ordenamento temporal, obtemos a função de Green completa:

$$G_\lambda(t-t') = \frac{-i {}_0 \langle T_t [\hat{c}_\lambda(t) \hat{c}_\lambda^\dagger(t') S(\infty, -\infty)] \rangle_0}{{}_0 \langle S(\infty, -\infty) \rangle_0}. \quad (3.112)$$

3.6.4 Aproximação linear

A "pedra angular" de diversos trabalhos, incluindo este, reside no cálculo da função de Green completa, expressa na equação (3.112), ou do valor esperado de uma grandeza física. A matriz $S(\infty, -\infty)$, que aparece em ambos os cálculos, é expandida em uma série infinita de termos:

$$S(\infty, -\infty) = 1 - i \int_{-\infty}^{\infty} dt \hat{V}(t) + \frac{(-i)^2}{2} T \left[\int_{-\infty}^{\infty} dt \hat{V}(t) \right]^2 + \frac{(-i)^3}{3!} T \left[\int_{-\infty}^{\infty} dt \hat{V}(t) \right]^3 + \dots \quad (3.113)$$

Em geral, obter resultados considerando todos os termos dessa expansão é uma tarefa árdua e, em alguns casos, inviável. Entretanto, para potenciais fracos, podemos restringir a análise à parte linear em $\hat{V}(t)$ e desconsiderar os termos de ordem superior. Esta aproximação define o escopo da chamada teoria de resposta linear. A "resposta" refere-se à variação em uma quantidade física de interesse devido à aplicação de uma perturbação externa.

Seja um operador qualquer, convenientemente definido como $I(t)$. Usando as Equações (3.108) e (3.109), o valor esperado é dado por

$$\langle I(t) \rangle = {}_0 \langle S^\dagger(t, -\infty) \hat{I}(t) S(t, -\infty) \rangle_0, \quad (3.114)$$

com a aproximação linear

$$S(t, -\infty) = T_t \exp \left[-i \int_{-\infty}^t \hat{V}(t') dt' \right] \approx 1 - i \int_{-\infty}^t \hat{V}(t') dt', \quad (3.115)$$

de modo que o valor esperado se torna

$$\langle I(t) \rangle \approx {}_0 \langle \left[1 + i \int_{-\infty}^t \hat{V}(t') dt' \right] \hat{I}(t) \left[1 - i \int_{-\infty}^t \hat{V}(t') dt' \right] \rangle_0,$$

$$\langle I(t) \rangle \approx -i \int_{-\infty}^t {}_0 \langle [\hat{I}(t), \hat{V}(t')] \rangle_0 dt'. \quad (3.116)$$

Vale ressaltar que apenas os termos de ordem linear no potencial foram considerados. Além disso, descartamos o termo independente da interação, assumindo casos como o da corrente de spin, em que apenas interações produzem valores esperados diferentes de zero. Isto ocorre pois a corrente de spin possui operadores de criação e aniquilação lineares na parte eletrônica e magnética, porém, como no oscilador harmônico, o valor esperado do operador de criação (aniquilação) na base dos operadores número é zero: $\langle c_\sigma \rangle = \langle c_\sigma^\dagger \rangle = 0$.

4 Descrição do modelo

4.1 Modelagem para corrente de spin

Descobertas relativamente recentes, como a conversão de corrente de spin em corrente de carga, além de técnicas aprimoradas de injeção de spin e detecção de corrente de spin [44] [45], originaram uma crescente demanda para estudos envolvendo o transporte de corrente de spin. Existem alguns processos conhecidos que geram correntes de spin, como, por exemplo, o processo de injeção de spin.

Em materiais metálicos não magnéticos é possível criar corrente de spin através da condução elétrica das cargas, polarizando a corrente elétrica de tal forma que os elétrons com spins opostos se propagam em sentidos opostos, gerando corrente elétrica total nula, porém corrente de spin diferente de zero, denominadas "correntes puras de spin"[46]. Em contrapartida, materiais isolantes ferromagnéticos não conduzem corrente elétrica, mas permitem a propagação de corrente de spin através de excitações de ondas de spin, um exemplo visto no capítulo (2).

A junção entre os dois tipos de materiais criam sistemas compostos onde a corrente de spin pode fluir pela interface criada, mediante interações de dos elétrons condutores com os sítios da rede magnética [47]. Para dispositivos com dimensões menores que o comprimento de difusão da corrente de spin é possível considerar apenas a corrente na interface, simplificando o estudo das correntes de spin.

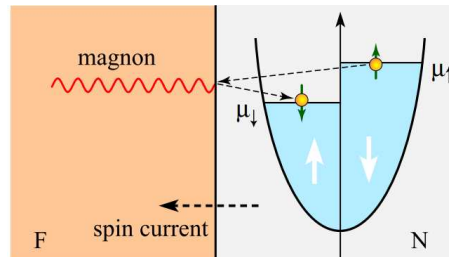


Figura 4.1: Diagrama que representa o sistema composto de um isolante ferromagnético (F) e um metal condutor em sua fase normal (N) com desbalanceio de potencial químico de spin, indicando a injeção de corrente de spin ao trocar o spin de um elétron e emitir um mágnon na parte magnética. Retirado de [48].

Neste trabalho, investigamos a corrente de spin injetada de um metal normal (NM) para o modelo de Kitaev através de uma junção NM/FM. Nesse contexto, os elétrons do NM, com a população de spins diferentes desbalanceada, interagem com férmions de Majorana localizados na interface por meio de processos de espalhamento com reversão de spin, resultando na transferência de momento angular para o modelo de Kitaev da junção, em um mecanismo conhecido como *Spin-Transfer Torque* (STT) [49, 50]. Como será demonstrado, a corrente de spin apresenta propriedades únicas, não observadas em isolantes magnéticos convencionais, que podem servir como assinatura para identificar a fase de LSQ no modelo de Kitaev. Vamos assumir o desbalanceio de potencial químico de elétrons spin *up* e *down* ($\Delta\mu = \mu_{\uparrow} - \mu_{\downarrow}$) na parte condutora, que pode ser gerado por efeito Hall. Caso o sistema possua excesso de elétrons up, haverá

dominância da reflexão dos elétrons *up* para *down* na interface, resultando em uma corrente de spin não nula.

O hamiltoniano completo do sistema é fornecido por $H = H_K + H_e + H_{sd}$, em que H_{sd} é o hamiltoniano da interface, H_K e H_e descrevem hamiltonianos livres das partes magnética e elétrica, ambos com solução exata. A interação na interface é descrita pelo termo $H_{sd} = -J_{sd} \sum_i \mathbf{s}_i \cdot \mathbf{S}_i$, onde $J_{sd} > 0$ representa o acoplamento entre os elétrons de condução e os elétrons localizados na interface, \mathbf{s}_i é o operador de spin dos elétrons de condução no metal normal (NM), e \mathbf{S}_i é o operador de spin dos elétrons localizados no material ferromagnético (FM). O metal NM é definido como a região $z > 0$, enquanto a monocamada FM está localizada logo abaixo do plano xy .

Vale notar que o termos longitudinais $s_i^z S_i^z$ envolvem processos de espalhamento que conservam o número de partículas e, portanto, não contribuem para a corrente de spin através da interface. A injeção ou absorção de momento angular está associada às alterações na componente de magnetização ao longo da direção do momento angular (neste caso, o eixo z). Para que esse processo ocorra, é necessário termos de interação que incluem os operadores escada S^+ e S^- . Além disso, o espalhamento com inversão de spin (*spin-flip*) está relacionado à condutância mútua de spin (*spin-mixing conductance*), que surge no formalismo de Landau-Lifshitz-Gilbert (LLG) e quantifica a eficiência da transmissão de corrente de spin através da interface [51, 52]. Para descrever a interação na interface podemos, portanto, utilizar um modelo efetivo baseado no formalismo de segunda quantização com interações locais da forma [48]

$$H_{sd} = J_{sd} \sum_i (S_i^+ c_{i\downarrow}^\dagger c_{i\uparrow} + S_i^- c_{i\uparrow}^\dagger c_{i\downarrow}), \quad (4.1)$$

em que J_{sd} é a intensidade da interação de troca efetiva que ocorre na posição i , cujo valor é sensível ao alcance de interação do elétron, portanto de difícil mensuração em toda superfície, com estimativas de 0, 1 eV [53]. Note que o primeiro termo representa um elétron incidente com spin para cima sendo destruído pelo operador $c_{i\uparrow}$ e refletido em um elétron com spin para baixo criado pelo operador $c_{i\downarrow}^\dagger$, adicionando a diferença de spin na parte condutora com o operador S_i^+ . O segundo termo corresponde ao hermitiano conjugado e ao fenômeno inverso.

Na parte condutora, o elétron de spin σ representado pelo operador de aniquilação $c_{i\sigma}$ interage com a interface e é refletido como um elétron de spin σ' representado por $c_{i\sigma'}^\dagger$, enquanto é adicionado (retirado) uma unidade de spin na parte magnética com o operador S_i^+ (S_i^-) na parte magnética. A parte magnética neste trabalho será composta pelo modelo de Kitaev, que iremos discutir no capítulo seguinte. O hamiltoniano da parte condutora é:

$$H_e = \sum_{k,\sigma} \epsilon_k c_{k\sigma}^\dagger c_{k\sigma}, \quad \epsilon_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}. \quad (4.2)$$

Como usual, consideramos os spins dos elétrons alinhados na direção da magnetização (definida como o eixo z), com os estados eletrônicos sendo autovalores de σ_z . A parte magnética da junção é modelada como um material regido pelo modelo de Kitaev; entretanto, as conclusões

sobre correntes de spin podem ser generalizadas para outros sistemas de bicamada NM/FM. Para escrever a interação de forma mais compatível com o hamiltoniano condutor diagonalizado, foi aplicada a transformada de Fourier nos operadores eletrônicos:

$$\begin{aligned} c_{i\sigma} &= \sqrt{\frac{2}{N_e}} \sum_k e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}_i} c_{k\sigma} \\ k_\alpha &= \frac{2\pi}{L_\alpha} n_\alpha, \quad n_\alpha \in \mathbb{Z} \quad (\alpha = x, y), \\ k_z &= \frac{2\pi}{L_z} n_z, \quad n_z \in \mathbb{N} \quad (z > 0). \end{aligned} \quad (4.3)$$

Adotamos a interface em $z = 0$ com $\vec{r}_i = \vec{R}_i + z\hat{z}$. Assim, obtemos:

$$H_{sd} = J_{sd} \frac{2}{N_e} \sum_i \sum_{kp} (S_i^+ c_{p\downarrow}^\dagger c_{k\uparrow} e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{p})\cdot\mathbf{R}_i} + S_i^- c_{k\uparrow}^\dagger c_{p\downarrow} e^{-i(\mathbf{k}-\mathbf{p})\cdot\mathbf{R}_i}), \quad (4.4)$$

onde N_e corresponde ao número de elétrons na parte condutora e, para simplificar a notação, definimos o operador:

$$A_{ikp} = S_i^- c_{k\uparrow}^\dagger c_{p\downarrow} e^{-i(\mathbf{k}-\mathbf{p})\cdot\mathbf{R}_i}, \quad (4.5)$$

e, então, a interação na interface é escrita como:

$$H_{sd} = J_{sd} \frac{2}{N_e} \sum_i \sum_{kp} (A_{ikp}^\dagger + A_{ikp}). \quad (4.6)$$

Usando os operadores número dos elétrons *up* e *down*, podemos calcular a corrente de spin na interface como $I_s = \frac{\hbar}{2} \frac{\partial}{\partial t} \sum_q (c_{q\uparrow}^\dagger c_{q\uparrow} - c_{q\downarrow}^\dagger c_{q\downarrow})$. A equação de evolução temporal de Heisenberg fornece:

$$I_s = \frac{-2iJ_{sd}}{N_e} \sum_i \sum_{kp} (A_{ikp}^\dagger - A_{ikp}). \quad (4.7)$$

Dentro da teoria de resposta linear, usando a equação (3.116), o valor esperado do operador de corrente de spin é dado por:

$$\langle I_s \rangle = \frac{4J_{sd}^2}{N_e^2 \hbar} \sum_{i,j} \sum_{kp} \sum_{k'p'} \int_{-\infty}^t dt' \langle [\hat{A}_{jk'p'}(t') + \hat{A}_{jk'p'}^\dagger(t'), \hat{A}_{ikp}^\dagger(t) - \hat{A}_{ikp}(t)] \rangle_0. \quad (4.8)$$

A dependência temporal dos operadores que compõem \hat{A}_{ikp} , considerando que o cálculo é realizado no formalismo de interação, é ditada por funções dependentes das autoenergias como visto na seção 3.3. Assim, $[\hat{A}_{ikp}(t), \hat{A}_{ikp}(t')] = [\hat{A}_{ikp}^\dagger(t), \hat{A}_{ikp}^\dagger(t')] = 0$. Ademais apenas termos diagonais do tipo $\langle c_{k\sigma}^\dagger c_{k'\sigma} \rangle = \langle c_{k\sigma}^\dagger c_{k\sigma} \rangle \delta_{k,k'}$ sobrevivem à média calculada nos hamiltonianos não perturbados (o mesmo se aplica para termos $\langle c_{k'\sigma} c_{k\sigma}^\dagger \rangle$). Aplicando essas considerações, a equação (4.8) torna-se:

$$\langle I_s \rangle = \frac{4J_{sd}^2}{N_e^2 \hbar} \sum_{i,j} \sum_{kp} \int_{-\infty}^t dt' \left(\langle [\hat{A}_{jkp}(t'), \hat{A}_{ikp}^\dagger(t)] \rangle_0 - \langle [\hat{A}_{jkp}^\dagger(t'), \hat{A}_{ikp}(t)] \rangle_0 \right). \quad (4.9)$$

Note que, se $z = \langle [\hat{A}_{jkp}(t'), \hat{A}_{ikp}^\dagger(t)] \rangle$, então $z^* = -\langle [\hat{A}_{jkp}^\dagger(t'), \hat{A}_{ikp}(t)] \rangle$. Assim, o termo dentro da integral é $z + z^* = 2\text{Re}(z) = 2\text{Im}(iz)$ e obtemos

$$\begin{aligned} \langle I_s \rangle &= -\frac{4J_{sd}^2}{N_e^2 \hbar} \sum_{i,j} \sum_{kp} \int_{-\infty}^t dt' 2 \text{Re} \left(\langle [\hat{A}_{jkp}^\dagger(t'), \hat{A}_{ikp}(t)] \rangle_0 \right), \\ \langle I_s \rangle &= -\frac{8J_{sd}^2}{N_e^2 \hbar} \sum_{i,j} \sum_{kp} \int_{-\infty}^{\infty} dt' \theta(t-t') \text{Im} \left(i \langle [\hat{A}_{ikp}(t-t'), \hat{A}_{jkp}^\dagger(t'-t')] \rangle_0 \right), \end{aligned} \quad (4.10)$$

como a dependência é apenas do intervalo de tempo, subtraímos t' de todos tempos. Além disso, podemos fazer a substituição de variáveis $t'' = t - t'$, logo

$$\langle I_s \rangle = -\frac{8J_{sd}^2}{N_e^2 \hbar} \sum_{i,j} \sum_{kp} \int_{-\infty}^{\infty} dt'' \theta(t'') \text{Im} \left(i \langle [\hat{A}_{ikp}(t''), \hat{A}_{jkp}^\dagger(0)] \rangle_0 \right). \quad (4.11)$$

Por fim, definindo a função retardada $U_{\text{ret}}(t) = \frac{i}{\hbar} \theta(t) \langle [\hat{A}_{ikp}(t), \hat{A}_{jkp}^\dagger(0)] \rangle_0$, temos

$$\langle I_s \rangle = -2 \left(\frac{2J_{sd}}{N_e} \right)^2 \sum_{i,j} \sum_{kp} \text{Im} \int_{-\infty}^{\infty} dt U_{\text{ret}}(t). \quad (4.12)$$

Para encontrar a função retardada, precisamos calcular, dentre outras coisas, o valor esperado dos operadores de spin da parte magnética. Portanto, para seguir em frente, iremos investigar mais a fundo a parte magnética em questão.

4.2 Função retardada

A função retardada na corrente de spin envolve a soma de dois termos referentes ao comutador dos operadores $\hat{A}_{ikp}(t)$, porém é possível realizar uma abordagem diferente em termos da correlação definida por:

$$F_{ijkp}^{-+}(t) = \langle \hat{A}_{ikp}(t) \hat{A}_{jkp}^\dagger(0) \rangle_0, \quad (4.13)$$

$$F_{ijkp}^{-+}(t) = \langle S_i^-(t) \hat{c}_{k\uparrow}^\dagger(t) \hat{c}_{p\downarrow}(t) S_j^+(0) \hat{c}_{p\downarrow}^\dagger(0) \hat{c}_{k\uparrow}(0) \rangle_0 e^{-i(\mathbf{k}-\mathbf{p})\Delta \mathbf{r}}. \quad (4.14)$$

Pelo Teorema de Wick [42], podemos trocar o valor esperado de todos os operadores pelas combinações entre os valores esperados de cada par de operadores, após remover a dependência temporal dos operadores. Note que, para um condutor normal, temos que $\langle \hat{c}_{k\uparrow}^\dagger(t) \hat{c}_{k\uparrow}(0) \rangle_0 = f_{k\uparrow} e^{i\varepsilon_k t/\hbar}$ e $\langle \hat{c}_{p\downarrow}(t) \hat{c}_{p\downarrow}^\dagger(0) \rangle_0 = (1 - f_{p\downarrow}) e^{-i\varepsilon_p t/\hbar}$, com as distribuições de Fermi-Dirac dadas por

$$f_{q\sigma} = f(\xi_{q\sigma}) = \frac{1}{e^{\beta \xi_{q\sigma}} + 1}, \quad (4.15)$$

em que $\xi_{q\sigma} = \varepsilon_q - \mu_\sigma$. Adotando a notação $D_{ij}^{-+}(t) = \langle S_i^-(t) S_j^+(0) \rangle_0$ para a função correlação da região magnética e $g_{kp}(t) = e^{i(\varepsilon_k - \varepsilon_p)t/\hbar}$, a correlação é escrita como

$$F_{ijkp}^{-+}(t) = f_{k\uparrow} (1 - f_{p\downarrow}) e^{-i(\mathbf{k}-\mathbf{p})\Delta \mathbf{r}} D_{ij}^{-+}(t) g_{kp}(t). \quad (4.16)$$

Realizando a transformada de Fourier, obtemos

$$\tilde{F}_{ijkp}^{-+}(\omega) = \int_{+\infty}^{-\infty} dt F_{ijkp}^{-+}(t) e^{i\omega t}, \quad (4.17)$$

$$\tilde{F}_{ijkp}^{-+}(\omega) = f_{k\uparrow}(1 - f_{p\downarrow}) e^{-i(\mathbf{k}-\mathbf{p})\Delta\mathbf{r}} \int_{+\infty}^{-\infty} \frac{dv}{2\pi} g_{kp}(\omega - v) \tilde{D}_{ij}^{-+}(v), \quad (4.18)$$

em que $D_{ij}^{-+}(t) = \int \frac{dv}{2\pi} \tilde{D}_{ij}^{-+}(v) e^{ivt}$, $g_{kp}(\omega - v) = \int dt g_{kp}(t) e^{i(\omega-v)t} = 2\pi\delta(v_k - v_p + \omega - v)$, $v_k = \frac{\epsilon_k}{\hbar}$, $v_p = \frac{\epsilon_p}{\hbar}$. Note que a função delta fornece a equação de conservação de energia:

$$\xi_{p\downarrow} = \xi_{k\uparrow} + \hbar\omega - \hbar v + \Delta\mu. \quad (4.19)$$

Podemos reescrever as distribuições de Fermi como $f(v_{k\uparrow}) = \int \frac{dv'}{2\pi} 2\pi\delta(v' - v_{k\uparrow})f(v')$ e $f(v_{p\downarrow}) = f(v_{k\uparrow} + \Omega_\mu + \omega - v)$, definindo $v_{k\uparrow} = \xi_{k\uparrow}/\hbar$, $v_{p\downarrow} = \xi_{p\downarrow}/\hbar$ e $\Omega_\mu = \Delta\mu/\hbar$. Assim, a correlação assume a forma

$$\begin{aligned} \tilde{F}_{ijkp}^{-+}(\omega) &= e^{-i(\mathbf{k}-\mathbf{p})\Delta\mathbf{r}} \int \frac{dv}{2\pi} \int \frac{dv'}{2\pi} f(v') [1 - f(v_{k\uparrow} + \Omega_\mu + \omega - v)] \times \\ &A_{k\uparrow}(v') A_{p\downarrow}(v' - v + \Omega_\mu + \omega) \tilde{D}_{ij}^{-+}(v), \end{aligned} \quad (4.20)$$

com as funções espectrais dadas por:

$$A_{k\uparrow}(v') = 2\pi\delta(v' - v_{k\uparrow}), \quad (4.21)$$

$$A_{p\downarrow}(v' - v + \Omega_\mu + \omega) = 2\pi\delta(v' - v + \Omega_\mu + \omega - v_{p\downarrow}). \quad (4.22)$$

4.2.1 Aproximação de baixas temperaturas

Primeiro, podemos simplificar as distribuições de Fermi usando a relação

$$f(v_{k\uparrow}) [1 - f(v_{p\downarrow})] = \frac{[f(v_{p\downarrow}) - f(v_{k\uparrow})]}{e^{\beta(\xi_{k\uparrow} - \xi_{p\downarrow})} - 1}. \quad (4.23)$$

As distribuições de Fermi são consideravelmente insensíveis ao aumento da temperatura. Para observar mudanças apreciáveis nessa distribuição, seriam necessários aumentos de temperatura significativamente superiores à temperatura ambiente.

Portanto, adotaremos a aproximação

$$f(\xi + \epsilon) \approx f(\xi) - \epsilon\delta(\xi). \quad (4.24)$$

Assumindo que somente baixas frequências contribuem na parte magnética e a diferença entre o potencial químico dos elétrons *up* e *down* é pequena, reescrevemos a equação (4.23), utilizando as funções delta das equações (4.21) e (4.22), como

$$\frac{[f(v_{p\downarrow}) - f(v_{k\uparrow})]}{e^{\beta\hbar(v - \Omega_\mu - \omega)} - 1} \rightarrow \frac{(v - \Omega_\mu - \omega)\delta(v')}{e^{\beta\hbar(v - \Omega_\mu - \omega)} - 1}. \quad (4.25)$$

Considerando que a densidade de estados eletrônicos permanece praticamente constante para energias próximas ao potencial químico [55] e utilizando o resultado acima, é possível aproximar as integrais da equação (4.20) por

$$\tilde{F}_{ijkp}^{-+}(\omega) \approx e^{-i(\mathbf{k}-\mathbf{p})\Delta\mathbf{r}} A_{k\uparrow}(0) A_{p\downarrow}(0) \int \frac{d\mathbf{v}}{2\pi} \frac{(\mathbf{v}-\omega-\Omega_\mu)}{e^{\beta(\mathbf{v}-\omega-\Omega_\mu)}-1} \tilde{D}_{ij}^{-+}(\mathbf{v}). \quad (4.26)$$

Os índices de momento podem ser eliminados realizando a integração sobre \mathbf{k} e \mathbf{p} , que justifica a definição:

$$\tilde{F}_{ij}^{-+}(\omega) \approx |C_{ij}|^2 \int \frac{d\mathbf{v}}{2\pi} \frac{(\mathbf{v}-\omega-\Omega_\mu)}{e^{\beta\hbar(\mathbf{v}-\omega-\Omega_\mu)}-1} \tilde{D}_{ij}^{-+}(\mathbf{v}), \quad (4.27)$$

onde o coeficiente $|C_{ij}|^2 = C_{ij}^\uparrow C_{ij}^\downarrow$ é fornecido por integrais do tipo:

$$C_{ij}^\sigma = V_e \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} e^{-i\mathbf{k}\Delta\mathbf{r}} 2\pi\hbar \delta(\epsilon_k - \mu_\sigma). \quad (4.28)$$

Como em condutores a energia é dada por $\epsilon_k = \frac{k^2\hbar^2}{2m}$, podemos escrever o potencial químico como $k_\uparrow = \frac{\sqrt{2m\mu_\uparrow}}{\hbar}$, permitindo reescrever a função delta de Dirac como

$$\delta(\epsilon_k - \mu_\uparrow) = \frac{m}{\hbar^2 k_\uparrow} [\delta(k - k_\uparrow) + \delta(k + k_\uparrow)]. \quad (4.29)$$

Definimos os eixos do espaço recíproco de forma que $\vec{k}_y \parallel \Delta\vec{r}$, como ilustra a figura (4.2), de forma que:

$$\vec{k} \cdot \Delta\vec{r} = k\Delta r \cos\theta. \quad (4.30)$$

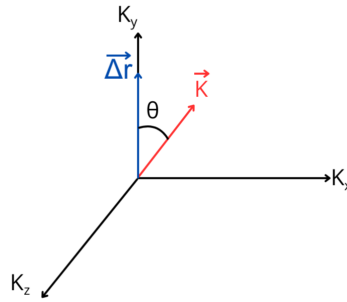


Figura 4.2: Sistema de Coordenadas no espaço recíproco.

Assim, utilizando as equações (4.29) e (4.30), a equação (4.28) se torna:

$$C_{ij}^\uparrow = \frac{mV_e k_\uparrow}{\pi\hbar} \left(\frac{\sin k_\uparrow \Delta r}{k_\uparrow \Delta r} \right) = \frac{mV_e k_\uparrow}{\pi\hbar} \text{sinc}(k_\uparrow \Delta r), \quad (4.31)$$

em que definimos a função $\text{sinc}(k_\uparrow \Delta r) = \left(\frac{\sin k_\uparrow \Delta r}{k_\uparrow \Delta r} \right)$. Adotando $p_\downarrow = k_\downarrow$, de forma similar obtemos a segunda integral:

$$C_{ij}^\downarrow = \frac{mV_e k_\downarrow}{\pi\hbar} \text{sinc}(k_\downarrow \Delta r). \quad (4.32)$$

Para i e j localizados no mesmo sítio, temos que $\Delta r \rightarrow 0$ e $\text{sinc}(k_{\downarrow}\Delta r) \rightarrow 1$. Próximo ao nível de Fermi o comprimento de onda de Fermi λ_F é da mesma ordem de grandeza do espaçamento de rede a , que fornece $k_{\sigma}a \approx 2\pi$ e $\text{sinc}(k_{\sigma}a) \approx 0, 1$. Então, para o caso em que i e j são primeiros vizinhos ($i \neq j$), podemos utilizar a aproximação de localidade [55]:

$$\text{sinc}(k_{\downarrow}\Delta r)\text{sinc}(k_{\uparrow}\Delta r) \approx \delta_{ij}. \quad (4.33)$$

Portanto, a correlação é aproximadamente local $F_{ij}(\omega) \approx F_{ii}(\omega)\delta_{ij}$. Com os resultados das integrais em (4.28) e (4.32), a correlação é dada por

$$\tilde{F}_{ii}^{-+}(\omega) = (\pi\hbar\rho_F)^2 \int \frac{d\mathbf{v}}{2\pi} \frac{\mathbf{v} - \boldsymbol{\omega} - \boldsymbol{\Omega}\boldsymbol{\mu}}{e^{\beta\hbar(\mathbf{v} - \boldsymbol{\omega} - \boldsymbol{\Omega}\boldsymbol{\mu})} - 1} \tilde{D}_{ii}^{-+}(\mathbf{v}). \quad (4.34)$$

em que, como foi adotado pouca variação em torno do nível de Fermi dos elétrons na parte condutora, podemos fazer $k_{\uparrow} = k_{\downarrow} = k_F$ e utilizamos a densidade de estados eletrônicos no nível de Fermi $\rho_F = mV_e k_F / \pi^2 \hbar^2$.

4.2.2 Susceptibilidade

Com o resultado da correlação obtido na seção anterior, precisamos escrever a corrente de spin em termos da correlação. A susceptibilidade é definida, em termos da função retardada da equação (4.12), como

$$\tilde{\chi}_{ijkp}(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} dt U_{\text{ret}}(t) e^{i\omega t}, \quad (4.35)$$

dessa forma, a corrente de spin na interface é fornecida por

$$\langle I_s \rangle = -2 \left(\frac{2J_{sd}}{N_e} \right)^2 \sum_i \text{Im} \left\{ \sum_{kp} \tilde{\chi}_{ijkp}(\omega = 0) \right\} \quad (4.36)$$

$$\tilde{\chi}_{ijkp}(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} dt \chi_{ijkp}(t) e^{i\omega t}, \text{ com } \chi_{ijkp}(t) = -\frac{i}{\hbar} \theta(t) \langle [\hat{A}_{ikp}(t), \hat{A}_{jkp}^{\dagger}(0)] \rangle. \quad (4.37)$$

A relação entre a correlação e a susceptibilidade é obtida diretamente. De fato, evidenciando a parte real e imaginária da susceptibilidade $\tilde{\chi}_{ijkp}(\omega) = \tilde{\chi}'_{ijkp}(\omega) + i\tilde{\chi}''_{ijkp}(\omega)$, podemos escrever:

$$\tilde{\chi}''_{ijkp}(\omega) = \frac{-i}{2} \int dt \left(\chi_{ijkp}(t) - \chi_{ijkp}^*(-t) \right) e^{i\omega t}, \quad (4.38)$$

para obter:

$$\begin{aligned} \tilde{\chi}''_{ijkp}(\omega) &= \frac{-i}{2} \int dt \left(-\frac{i}{\hbar} \right) \left[\theta(t) \langle \hat{A}_{ikp}(t) \hat{A}_{jkp}^{\dagger}(0) \rangle + \langle \hat{A}_{jkp}^{\dagger}(0) \hat{A}_{ikp}(t) \rangle \right. \\ &\quad \left. + \theta(-t) \langle \hat{A}_{ikp}(0) \hat{A}_{jkp}^{\dagger}(-t) \rangle + \langle \hat{A}_{jkp}^{\dagger}(-t) \hat{A}_{ikp}(0) \rangle \right] e^{i\omega t}. \end{aligned} \quad (4.39)$$

Portanto, a parte imaginária da susceptibilidade é dada por:

$$\tilde{\chi}''_{ijkp}(\omega) = -\frac{1}{2\hbar} \int dt \left[\theta(t) \left(F_{ijkp}^{-+}(t) - F_{jikp}^{+-}(t) \right) + \theta(-t) \left(F_{jikp}^{-+}(t) - F_{ijkp}^{+-}(t) \right) \right] e^{i\omega t}, \quad (4.40)$$

em que utilizamos a definição:

$$F_{ijkp}^{+-}(t) = \langle \hat{A}_{ikp}^{\dagger}(0) \hat{A}_{jkp}(t) \rangle. \quad (4.41)$$

Então, realizando a integração nos índices dos momentos, temos

$$\tilde{\chi}_{ij}''(\omega) = -\frac{1}{2\hbar} \int dt \left[\theta(t) \left(F_{ij}^{-+}(t) - F_{ji}^{+-}(t) \right) + \theta(-t) \left(F_{ji}^{-+}(t) - F_{ij}^{+-}(t) \right) \right] e^{i\omega t}, \quad (4.42)$$

As transformadas de Fourier são fornecidas por:

$$F_{ii}^{+-}(t) = \int \frac{d\nu}{2\pi} \tilde{F}_{ii}^{+-}(\nu) e^{-i\nu t}, \quad (4.43)$$

$$\int dt \theta(\pm t) e^{i(\omega-\nu)t} = \frac{\pm i}{\omega - \nu \pm i\varepsilon} = \pm i\text{P} \left(\frac{1}{\omega - \nu} \right) + \pi\delta(\omega - \nu), \quad (4.44)$$

em que $\text{P} \left(\frac{1}{\omega - \nu} \right)$ denota o valor principal de Cauchy. A expressão para a susceptibilidade se torna:

$$\begin{aligned} \tilde{\chi}_{ij}''(\omega) &= -\frac{1}{2\hbar} \int \frac{d\nu}{2\pi} \left\{ \left(\frac{i}{\omega - \nu + i\varepsilon} \right) \left[\tilde{F}_{ij}^{-+}(\nu) - \tilde{F}_{ji}^{+-}(\nu) \right] - \right. \\ &\quad \left. - \left(\frac{i}{\omega - \nu - i\varepsilon} \right) \left[\tilde{F}_{ji}^{-+}(\nu) - \tilde{F}_{ij}^{+-}(\nu) \right] \right\} \end{aligned} \quad (4.45)$$

em que, no espaço das frequências, \tilde{F}_{ij}^{+-} segue a mesma aproximação que \tilde{F}_{ij}^{-+} , ou seja, $\tilde{F}_{ij}^{+-}(\omega) \approx \tilde{F}_{ii}^{+-}(\omega) \delta_{ij}$. Dessa forma, obtemos a parte imaginária da susceptibilidade em termos de \tilde{F}_{ij}^{-+} e \tilde{F}_{ij}^{+-} :

$$\tilde{\chi}_{ij}''(\omega) = -\frac{\delta_{ij}}{2\hbar} \int \frac{d\nu}{2\pi} \left[2\pi\delta(\omega - \nu) \tilde{F}_{ij}^{-+}(\nu) - 2\pi\delta(\omega - \nu) \tilde{F}_{ij}^{+-}(\nu) \right], \quad (4.46)$$

$$\tilde{\chi}_{ij}''(\omega) = -\frac{\delta_{ij}}{2\hbar} \left[\tilde{F}_{ij}^{-+}(\omega) - \tilde{F}_{ij}^{+-}(\omega) \right]. \quad (4.47)$$

A relação entre \tilde{F}_{ij}^{-+} e \tilde{F}_{ij}^{+-} é fornecida no Apêndice A, pela equação (A.2c). Assim, a susceptibilidade é expressa como:

$$\chi_{ij}''(\omega) = -\frac{\delta_{ij}}{2\hbar} \left(1 - e^{-\beta(\hbar\omega + \Delta\mu)} \right) \tilde{F}_{ii}^{-+}(\omega). \quad (4.48)$$

Finalmente, a corrente de spin pode ser escrita como:

$$\langle I_s \rangle = -2 \left(\frac{2J_{sd}}{N_e} \right)^2 \sum_i \tilde{\chi}_{ii}''(\omega = 0) = -2 \left(\frac{2J_{sd}}{N_e} \right)^2 \sum_{\mathbf{r}} (\tilde{\chi}_{\mathbf{r}A}'' + \tilde{\chi}_{\mathbf{r}B}''), \quad (4.49)$$

onde \mathbf{r} é a posição da célula unitária contendo as sub-redes A e B, e a susceptibilidade é:

$$\tilde{\chi}_{\mathbf{r}A/B}'' = -\frac{\hbar(\pi\rho_F)^2}{2} \left(1 - e^{-\beta\Delta\mu} \right) \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\nu}{2\pi} \frac{\nu - \Omega_\mu}{e^{\beta\hbar(\nu - \Omega_\mu)} - 1} \tilde{D}_{\mathbf{r}A/B}^{-+}(\nu). \quad (4.50)$$

5 Modelo de Kitaev

Entre os diversos sistemas em física teórica, apenas uma fração limitada admite soluções exatas. Exemplos clássicos incluem o oscilador harmônico quântico e seu análogo na formulação de operadores de criação e aniquilação na segunda quantização. No entanto, em 2006, Alexei Kitaev introduziu um modelo que ampliou significativamente este conjunto, apresentando um hamiltoniano exatamente solúvel com propriedades profundamente inovadoras, descrito no artigo seminal "*Anyons in an exactly solved model and beyond*" [4].

O modelo de Kitaev, formulado em uma rede bidimensional de spins, revelou-se um dos sistemas mais importantes no estudo de fases topológicas da matéria. Ele não apenas exemplifica um sistema com solução exata com interações complexas, mas também oferece um terreno fértil para explorar fenômenos emergentes como excitações de quasipartículas fracionárias e a realização de ânyons, fundamentais para propostas de computação quântica topológica.

Partículas bosônicas e fermiônicas são descritas por estados que adquirem uma fase $+1$ ou -1 quando duas partículas são trocadas, respectivamente. No entanto, em duas dimensões espaciais, existem outros tipos de partículas, conhecidas como topológicas, que obedecem uma estatística de troca diferente. Essas partículas, denominadas ânyons, adquirem fases complexas ao serem trocadas. O termo ânyon reflete que essas partículas podem apresentar qualquer (*any*) estatística de troca ou spin.

Além disso, o modelo de Kitaev exibe, em seu estado fundamental, uma fase de líquido de spin quântico [54]. Alguns estudos destacam a possibilidade de modelos honeycomb serem os primeiros sistemas topológicos de spin a serem realizados em laboratório [57], devido à relativa simplicidade de sua estrutura. Pesquisas recentes utilizando materiais com essa geometria têm mostrado resultados promissores [58], bem como a exploração de modelos mais gerais, incorporando termos de troca de Heisenberg [59, 60].

Embora os avanços teóricos no estudo de LSQ sejam notáveis, as metodologias experimentais enfrentam desafios significativos na detecção concreta desses estados [54]. Nesse contexto, torna-se crucial a busca por novas assinaturas características de LSQ que sejam acessíveis experimentalmente. Considerando a infraestrutura de diversos laboratórios para manipulação e detecção de correntes de spin, identificar uma assinatura robusta em tais correntes pode abrir novas perspectivas de pesquisa.

É importante ressaltar o grande interesse acadêmico no tema. Dois paradigmas importantes na física são quebrados em sistemas de LSQ; o surgimento de leis de conservação a partir de simetrias do sistema, cujas regras de fusão dos anyons não são descritas por grupos simétricos convencionais, e as quebras espontâneas de simetria em transições de fase de Landau, onde as ordens topológicas não requerem quebras de simetria para emergirem [4].

Existem várias abordagens para resolver o modelo de Kitaev. Contudo, neste trabalho, seguiremos as transformações propostas por Kitaev em seu artigo original, combinadas com escolhas feitas na tese de Knolle [54].

5.1 Hamiltoniano de Kitaev

O modelo de Kitaev é um sistema de graus de liberdade de spin 1/2 dispostos em sítios de uma rede bidimensional hexagonal infinita que pode ser subdividida em duas sub-redes, como ilustra a figura (5.1). Os spins da rede interagem somente entre primeiros vizinhos via interações de troca do tipo Ising de três tipos diferentes, dependendo da conexão entre os sítios, denotadas de conexões ou conexões x, y e z, portanto se trata de um modelo anisotrópico.

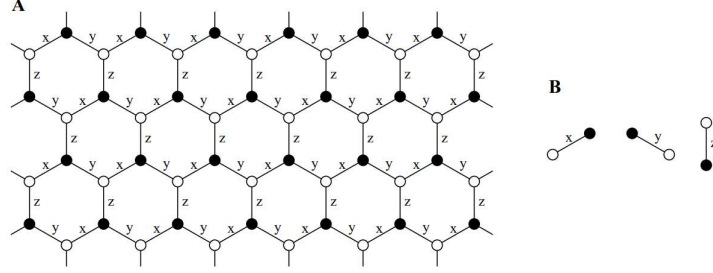


Figura 5.1: Em (A) é ilustrado a rede bidimensional com os conexões x, y e z, onde as sub-redes são diferenciadas pelos sítios com círculos preenchidos e vazios. Em (B) temos os blocos fundamentais para construção da rede, representando os conexões x, y e z isolados. Retirado de [4].

O hamiltoniano, dividido em três termos referentes aos tipos de conexões, é dado pela expressão:

$$H = -J_x \sum_{\langle i,j \rangle \in x\text{-links}} \sigma_i^x \sigma_j^x - J_y \sum_{\langle i,j \rangle \in y\text{-links}} \sigma_i^y \sigma_j^y - J_z \sum_{\langle i,j \rangle \in z\text{-links}} \sigma_i^z \sigma_j^z, \quad (5.1)$$

com J_x , J_y e J_z são parâmetros de acoplamento do modelo com dimensão de energia. Utilizando a representação da seção (3.5.4) com operador de projeção definido na equação (3.79) $\sigma_i^\alpha = P(ib_i^\alpha c_i)P$, reescrevemos o hamiltoniano, em termos das projeções $H = P\hat{H}P$, como:

$$H = P \left(\sum_{\langle i,j \rangle \in x\text{-links}} iJ_x u_{ij} c_i c_j + \sum_{\langle i,j \rangle \in y\text{-links}} iJ_y u_{ij} c_i c_j + \sum_{\langle i,j \rangle \in z\text{-links}} iJ_z u_{ij} c_i c_j \right) P, \quad (5.2)$$

em que definimos os operadores de campo bosônicos referente à conexão α como $u_{ij} = ib_i^\alpha b_j^\alpha$, denominados operadores de ligação, com propriedades:

$$u_{ij}^\dagger = u_{ij}, \quad (5.3a)$$

$$(u_{ij})^2 = 1, \quad (5.3b)$$

$$u_{ij} = -u_{ji}, \quad (5.3c)$$

diretamente, usando a segunda equação acima, o operador u_{ij} pode ser diagonalizado com au-

tovalores ± 1 . Podemos escrever o hamiltoniano de forma mais compacta como:

$$H = P \left(\sum_{\langle i,j \rangle \in \alpha\text{-links}} iJ_\alpha u_{ij} c_i c_j \right) P. \quad (5.4)$$

5.2 Simetrias e campos de calibre

O modelo possui diversas grandezas conservadas, conforme apontado por Kitaev em seu estudo original. Por exemplo, para uma plaqueta "p", composta pelas seis arestas de um hexágono, como ilustrado na figura (5.2), podemos definir o operador de fluxo, cujo nome será esclarecido posteriormente, pelo produto das componentes dos spins que apontam para fora da plaqueta:

$$W_p = \sigma_1^x \sigma_2^y \sigma_3^z \sigma_4^x \sigma_5^y \sigma_6^z. \quad (5.5)$$

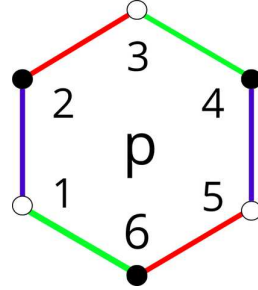


Figura 5.2

Note que o operador de fluxo comuta com o hamiltoniano, $[H, W_p] = 0$, tornando-o estático. Além disso, operadores de fluxo de diferentes plaquetas também comutam entre si, $[W_p, W_{p'}] = 0$. É possível mostrar que $W_p^2 = \mathbb{1}$, de onde se conclui que o operador de fluxo possui dois autovalores: $w_p = +1$, denominado livre de fluxo, e $w_p = -1$, denominado com fluxo. Assim, o espaço de Hilbert do sistema pode ser decomposto em setores definidos pelos fluxos nas plaquetas, ou seja:

$$\mathcal{H} = \bigoplus_{\{w_1, \dots, w_N\}} \mathcal{H}_{\{w_1, \dots, w_N\}}. \quad (5.6)$$

Retornando ao operador de ligação u_{ij} , e utilizando a representação de Kitaev na equação (5.5) com a restrição dada pela equação (3.74), podemos reescrever o operador de fluxo no espaço físico como:

$$W_p = u_{21} u_{23} u_{43} u_{45} u_{65} u_{61}. \quad (5.7)$$

Uma partícula se movendo ao redor da plaqueta p adquire uma fase ± 1 correspondente ao autovalor do fluxo, de maneira análoga ao efeito de Aharonov-Bohm.

O operador de ligação pode ser diagonalizado com autovalores ± 1 . Utilizando a equação (3.63), podemos parrear os férmions de Majorana do tipo b_i^α para formar férmions complexos de ligação [64, 63]:

$$\chi_{\langle i,j \rangle \alpha} = \frac{b_i^\alpha + i b_j^\alpha}{2}, \quad \chi_{\langle i,j \rangle \alpha}^\dagger = \frac{b_i^\alpha - i b_j^\alpha}{2}, \quad (5.8)$$

de modo que a paridade de ocupação dos férmions $\chi_{\langle i,j \rangle \alpha}$ corresponde aos autoestados de u_{ij} , ou seja:

$$u_{ij} = 1 - 2\chi_{\langle i,j \rangle \alpha}^\dagger \chi_{\langle i,j \rangle \alpha}. \quad (5.9)$$

Se o estado do férmion complexo estiver desocupado, $\chi_{\langle i,j \rangle \alpha}^\dagger \chi_{\langle i,j \rangle \alpha} = 0$, temos $u_{ij} = +1$. Caso contrário, se o estado estiver ocupado, o autovalor será $u_{ij} = -1$. Assim, o operador de ligação emaranha sítios vizinhos, pois os férmions complexos são formados pelo pareamento de férmions de Majorana de sítios diferentes. Por outro lado, o operador D_i , utilizado na construção do operador de projeção na equação (3.75), é construído com operadores de Majorana no mesmo sítio. Dessa forma, a diagonalização do operador de ligação gera estados em que os D_i não são diagonais [61].

Para compreender a relevância destes operadores, devemos considerar uma simetria adicional na representação discutida na seção (3.5.4). Esta simetria envolve a transformação simultânea $c_i \rightarrow \mu_i c_i$ e $b_i^\alpha \rightarrow \mu_i b_i^\alpha$, com $\mu_i = \pm 1$. Essa redundância local \mathbb{Z}_2 reflete uma simetria de calibre associada à representação das matrizes de spin.

O operador de ligação nas conexões vizinhas da rede transforma-se como $u_{ij} \rightarrow \mu_i u_{ij} \mu_j$, comportando-se como um campo de calibre \mathbb{Z}_2 , enquanto os operadores D_i atuam como geradores de transformações locais de calibre para os férmions de Majorana:

$$D_i c_i D_i = -c_i, \quad D_i b_i^\alpha D_i = -b_i^\alpha, \quad (5.10)$$

com comportamento análogo para o campo de calibre u_{ij} . Os estados físicos, selecionados pelo operador de projeção definido pela equação (3.79), são invariantes de calibre [43]. Isto é esperado, pois o sistema original antes da troca pela representação de Kitaev não possuía a redundância \mathbb{Z}_2 . O operador de projeção realiza, assim, uma média sobre todas as transformações de calibre.

Os estados não físicos surgem porque o fluxo W_p , expresso como o produto dos campos de calibre em uma plaqueta, mantém-se conservado. Embora setores do hamiltoniano sejam classificados pelos autovalores dos fluxos em cada plaqueta, diferentes configurações dos campos de calibre podem resultar no mesmo fluxo, introduzindo redundâncias. Para uma rede com N sítios, há 2^N escolhas possíveis para os campos μ_i , gerando 2^N estados degenerados de \hat{H} .

Como demonstrado por Knolle e colaboradores [54], um operador O composto por produtos arbitrários de operadores de spin que não alterem o número de ocupação dos férmions complexos de ligação possui elementos de matriz independentes da projeção. Em outras palavras, dado um autoestado $|\phi\rangle$ de \hat{H} , temos:

$$\langle \phi | POP | \phi \rangle = \langle \phi | O | \phi \rangle. \quad (5.11)$$

Como estamos interessados no cálculo da corrente de spin, que envolve operadores deste

tipo, focaremos, a partir de agora, no hamiltoniano \hat{H} , dado por:

$$\hat{H} = \frac{1}{2} \sum_{i,j} iJ_{i,j} u_{ij} c_i c_j. \quad (5.12)$$

Para todas as conexões, temos as seguintes relações de comutação: $[u_{i,j}, c_k] = 0$, $[u_{i,j}, u_{k,l}] = 0$ e $[u_{i,j}, \hat{H}] = 0$, para quaisquer índices i, j, k e l . Isso implica que os campos de calibre $u_{i,j}$ são estáticos e podem ser diagonalizados independentemente em cada conexão. O sistema se reduz, portanto, a operadores de Majorana c_i acoplados a um campo de fundo estático descrito por uma teoria de calibre \mathbb{Z}_2 , como ilustrado na figura (5.3). Assim, ao fixar os autovalores do campo de calibre em cada conexão, o hamiltoniano torna-se quadrático nos operadores de Majorana c_i .

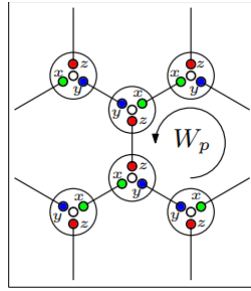


Figura 5.3: Os férmions de Majorana b^α formam campos de calibre que compõem o fluxo W_p . Os férmions de Majorana c_i tornam-se livres, salvo pela fixação de um calibre. Imagem retirada de [43].

Os férmions de Majorana restantes, após fixar o calibre, precisam ser acoplados em pares, como discutido na seção (3.5.3). Para tal, definimos os férmions complexos de matéria acoplando os Majoranas em uma célula unitária localizada na posição \mathbf{r} , composta por um sítio da sub-rede A e um sítio da sub-rede B, da seguinte forma [64, 63]:

$$f_r = \frac{c_{Ar} + ic_{Br}}{2}. \quad (5.13)$$

Agora, podemos descrever o espaço de Hilbert de \hat{H} como o produto tensorial dos setores de fluxo e matéria, $|\phi\rangle = |F\rangle \otimes |M\rangle$, correspondendo à ocupação dos férmions de ligação (ou de calibre) e dos férmions de matéria, respectivamente. Para simplificar a notação, omitimos índices nos kets que diferenciariam o hamiltoniano com os campos de calibre de seus autovalores, considerando os propósitos do trabalho.

5.3 Estado fundamental do setor sem fluxo

Fixando o calibre, o hamiltoniano de Kitaev torna-se quadrático, permitindo uma solução exata. No entanto, qual configuração deve ser escolhida para determinar, por exemplo, o estado fundamental do sistema? Kitaev solucionou este problema inicialmente com simulações computacionais [4] e, posteriormente, utilizando o elegante teorema de Lieb [65]. Ambos os

métodos concluíram que o estado fundamental do sistema ocorre no setor sem fluxo, ou seja, todos os autovalores dos fluxos satisfazem $w_p = +1$. Existem diversas escolhas de calibre que fornecem essa configuração; assim, fixamos, como proposto por Kitaev, todos os campos de calibre com autovalor $u_{i,j} = 1$, onde $i \in$ sub-rede-A e $j \in$ sub-rede-B. O hamiltoniano de Kitaev para o estado fundamental assume a forma

$$\hat{H}_0 = \frac{1}{2} \sum_{i,j} iJ_{i,j} c_i c_j. \quad (5.14)$$

Para uma rede com condições de contorno periódicas e espaçamento $a = 1$, definimos a célula unitária na posição \mathbf{r} , formada por dois sítios das duas sub-redes, com os vetores de base $\mathbf{n}_x = \mathbf{n}_1 = \frac{1}{2}\hat{i} + \frac{\sqrt{3}}{2}\hat{j}$, $\mathbf{n}_y = \mathbf{n}_2 = \frac{-\sqrt{3}}{2}\hat{i} + \frac{1}{2}\hat{j}$ e $\mathbf{n}_z = \mathbf{0}$, como ilustrado na figura (5.4).

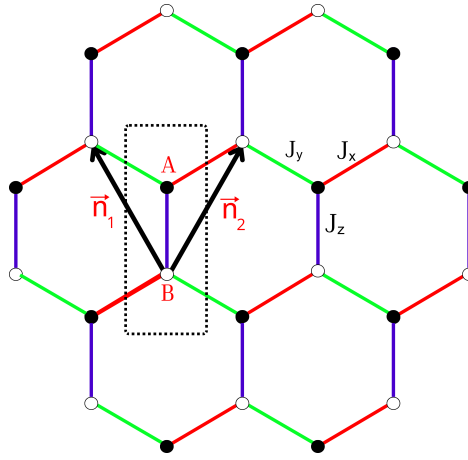


Figura 5.4

Acoplando os férmions complexos de matéria utilizando a equação (5.13), definimos a transformada de Fourier:

$$f_r = \frac{1}{\sqrt{N_u}} \sum_q f_q e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}}, \quad (5.15)$$

onde N_u é o número de células unitárias. O hamiltoniano no setor sem fluxo transforma-se em

$$H_0 = \sum_q \begin{pmatrix} f_q^\dagger & f_{-q} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \text{Re}(S_q) & i \text{Im}(S_q) \\ -i \text{Im}(S_q) & -\text{Re}(S_q) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} f_q \\ f_{-q}^\dagger \end{pmatrix}, \quad (5.16)$$

onde $S_q = \sum_\alpha J_\alpha e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{n}_\alpha} = \text{Re}(S_q) + i\text{Im}(S_q)$. Para diagonalizar o hamiltoniano, como descrito na seção (3.4.2), aplicamos a transformação de Bogoliubov [54]

$$f_q = \cos \theta_q a_q + i \sin \theta_q a_{-q}^\dagger, \quad \tan 2\theta_q = -\frac{\text{Im}(S_q)}{\text{Re}(S_q)}, \quad (5.17)$$

resultando no hamiltoniano diagonalizado:

$$H_0 = \sum_q 2|S_q| \left(a_q^\dagger a_q - \frac{1}{2} \right). \quad (5.18)$$

Os operadores diagonalizados mantêm o caráter de férmions complexos, pois a transformação de Bogoliubov não altera a estatística de troca. O estado fundamental do setor sem fluxo é definido como o estado totalmente desocupado pelos férmions a_q , satisfazendo a condição $a_q|M_0\rangle = 0$, com energia $E_0 = -\sum_q |S_q|$.

Ressalta-se que estamos analisando apenas o espectro de energia dos férmions de matéria. As excitações $a_q^\dagger|M_0\rangle$ possuem energia $E_q = 2|S_q|$. Dependendo dos valores das constantes de acoplamento J_α , o espectro de excitações pode apresentar *gap* ou ser *gapless*.

Quando $|J_z| < |J_x| + |J_y|$, incluindo suas permutações, o espectro é *gapless* [4], caracterizando a fase B no Diagrama (5.5). Nesse caso, as excitações de menor energia são os férmions de matéria, devido ao *gap* nos setores de fluxo. Um exemplo ocorre na isotropia das constantes de acoplamento ($J_x = J_y = J_z = J$), resultando em dois pontos de Dirac localizados em $\mathbf{Q} = \pm(\frac{2\pi}{3}, -\frac{2\pi}{3})$, com dispersão linear $E(\mathbf{q}) \propto |\mathbf{q}|$ [54].

Conforme as constantes de acoplamento tornam-se anisotrópicas, os pontos de Dirac movem-se pela zona de Brillouin até se encontrarem e se aniquilarem, gerando as fases *gapped*. Essas fases obedecem à condição $|J_z| > |J_x| + |J_y|$ (e suas permutações) e são caracterizadas como as fases A_α no Diagrama (5.5). O aumento da anisotropia amplia a lacuna de energia no espectro de partículas únicas, superando eventualmente a lacuna de energia dos setores de fluxo, tornando as excitações de fluxo as de menor energia.

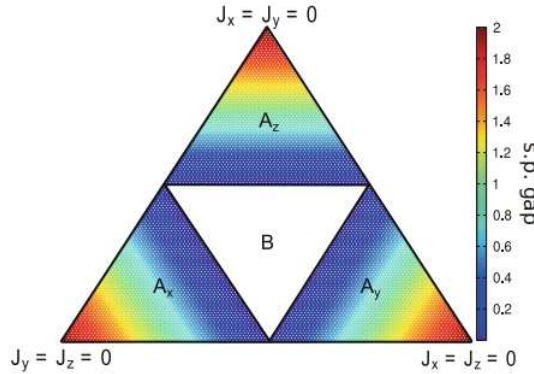


Figura 5.5: Diagrama de fases fixando $J_x + J_y + J_z = 1$, com as fases *gapped* representadas pelos triângulos em torno dos A_α 's ($\alpha = x, y, z$, referente à constante predominante), e a fase *gapless* representada pelo triângulo B. A cor indica o tamanho da lacuna (*gap*) de energia para uma única partícula, com valores maiores nos extremos. Adaptado de [54].

Além das duas características de líquido de spin já discutidas, a fracionalização, decorrente da representação de Kitaev, e a emergência de estruturas de calibre, o modelo de Kitaev apresenta a que é considerada a característica definidora mais proeminente de um LSQ [54]: a ausência de ordem magnética de longo alcance, mesmo em $T = 0$. Em outras palavras, a função de correlação de spin é de curto alcance, mesmo em temperatura nula. Esses aspectos serão explorados com mais detalhes na seção seguinte.

5.4 Funções correlação de spin

Para calcular o valor esperado da corrente de spin, é necessário compreender o comportamento das funções de correlação de spin no modelo de Kitaev. Apesar da simplicidade do hamiltoniano e da representação de Kitaev via férmions de Majorana, pode-se cometer o equívoco de supor que essa simplicidade se estenda à dinâmica das funções de correlação de spin. No entanto, determinar essa correlação dinâmica pode ser uma tarefa mais complexa e demorada do que encontrar a solução exata do espectro de energia, como demonstrado pela cadeia de Heisenberg unidimensional, que teve um intervalo de quase um século entre a obtenção de ambas as soluções [66].

Felizmente, Baskaran e colaboradores [64] mostraram que as funções de correlação de spin são extremamente locais, diferindo de zero apenas para o mesmo sítio ou para sítios vizinhos. Posteriormente, Knolle e colaboradores [54] conseguiram mapear e encontrar uma solução exata para as excitações quânticas locais. Nesta seção, apresentaremos brevemente os resultados notáveis obtidos por esses autores.

5.4.1 Mapeamento no setor sem fluxo

Devido a todos os fatores discutidos anteriormente, consideraremos o sistema em seu estado livre de fluxos. Definimos o estado fundamental como $|0\rangle = |F_0\rangle|M_0\rangle$, com a escolha de calibre adotada nas seções anteriores: $u_{i,j} = +1$. A função correlação de spin entre os sítios i e j na rede é definida como

$$S_{ij}^{\alpha\beta}(t) = \langle 0 | \sigma_i^\alpha(t) \sigma_j^\beta(0) | 0 \rangle, \quad (5.19)$$

com α e β relativos às componentes dos spins x , y e z . Usando o acoplamento dos férmions de ligação definidos na equação (5.8), com todos os estados ocupados para o calibre escolhido, ou seja, $\chi_{\langle i,j \rangle_\alpha}^\dagger \chi_{\langle i,j \rangle_\alpha} |F_0\rangle = |F_0\rangle$, podemos reescrever os operadores de spin na representação da equação (3.69) como

$$\sigma_i^\alpha = ic_i(\chi_{\langle i,j \rangle_\alpha} + \chi_{\langle i,j \rangle_\alpha}^\dagger), \quad \text{com } i \in \text{sub-rede } A, \quad (5.20a)$$

$$\sigma_j^\alpha = c_j(\chi_{\langle i,j \rangle_\alpha} - \chi_{\langle i,j \rangle_\alpha}^\dagger), \quad \text{com } j \in \text{sub-rede } B. \quad (5.20b)$$

Utilizando os operadores acima, temos:

$$S_{ij}^{\alpha\beta}(t) = \langle M_0 | \langle F_0 | ic_i(t)(\chi_{\langle i,j' \rangle_\alpha}(t) + \chi_{\langle i,j \rangle_\alpha}^\dagger(t)) c_j(0)(\chi_{\langle i',j \rangle_\beta}(0) - \chi_{\langle i,j \rangle_\beta}^\dagger(0)) | F_0 \rangle | M_0 \rangle, \quad (5.21)$$

pelo calibre escolhido, $\chi_{\langle i,j \rangle_\alpha}^\dagger |F_0\rangle = 0$, a equação toma a forma simplificada:

$$S_{ij}^{\alpha\beta}(t) = \langle M_0 | \langle F_0 | ic_i(t) \chi_{\langle i,j' \rangle_\alpha}^\dagger(t) c_j(0) \chi_{\langle i',j \rangle_\beta} | F_0 \rangle | M_0 \rangle. \quad (5.22)$$

ou de forma equivalente, usando a evolução temporal de Heisenberg para os operadores em

termos do hamiltoniano total de Kitaev, temos

$$S_{ij}^{\alpha\beta}(t) = \langle M_0 | \langle F_0 | i e^{\frac{iHt}{\hbar}} c_i \chi_{\langle i,j \rangle \alpha}^\dagger e^{-\frac{iHt}{\hbar}} c_j \chi_{\langle i',j \rangle \beta} | F_0 \rangle | M_0 \rangle. \quad (5.23)$$

A diagonalização do modelo de Kitaev foi realizada sobre os férmions de matéria e, portanto, expressões escritas apenas em termos destes são mais convenientes. Como já conhecemos os valores de ocupação dos férmions de ligação, é necessário apenas os posicionar à direita para aplicação nos estados de calibre. Considerando que a comutação entre os férmions de ligação e os férmions de Majorana é conhecida, basta lidar com a comutação com o termo de evolução temporal. Para isso, utilizaremos a seguinte identidade [67]:

$$B e^A = e^{A-D} B, \quad \text{se } [A, B] = DB \text{ e } [D, B] = 0. \quad (5.24)$$

Como discutido na seção (5.2), o hamiltoniano é composto pelos campos de calibre, expressos como $u_{i,j} = 1 - 2\chi_{\langle i,j \rangle \alpha}^\dagger \chi_{\langle i,j \rangle \alpha}$, e pelos férmions de Majorana de matéria. O cálculo do comutador com o hamiltoniano envolve dois resultados principais para os operadores de matéria e ligação: $[c_i c_j, \chi_{\langle i,j \rangle \alpha}^\dagger] = 0$ e $[\chi_{\langle i,j \rangle \alpha}^\dagger \chi_{\langle i,j \rangle \alpha}, \chi_{\langle i,j \rangle \alpha'}^\dagger] = \delta_{\alpha, \alpha'} \chi_{\langle i,j \rangle \alpha'}^\dagger$. A partir disso, obtemos:

$$\chi_{\langle i,j \rangle \alpha}^\dagger e^{-\frac{iHt}{\hbar}} = e^{-\frac{it}{\hbar}(H_0 + V_{\langle i,j \rangle \alpha})} \chi_{\langle i,j \rangle \alpha}^\dagger, \quad (5.25)$$

onde definimos $V_{\langle i,j \rangle \alpha} = -2iJ_\alpha c_i c_j$. O novo termo na exponencial pode ser interpretado como um hamiltoniano $H_\alpha = H_0 + V_{\langle i,j \rangle \alpha}$, que introduz uma mudança local de sinal na conexão $\langle i, j \rangle_\alpha$. Isso corresponde a uma troca nos autovalores do campo de calibre e à adição de dois fluxos nas plaquetas que compartilham a conexão como aresta. Assim, a comutação altera o número de ocupação do férmion de ligação.

Com isso, podemos calcular e eliminar os estados de calibre. No setor sem fluxo e para o calibre escolhido, temos:

$$\langle F_0 | \chi_{\langle i,j \rangle \alpha}^\dagger \chi_{\langle i',j \rangle \beta} | F_0 \rangle = \delta_{\alpha\beta} \delta_{\langle i,j \rangle \alpha}. \quad (5.26)$$

Desta forma, a função correlação de spin é de curto alcance, sendo não nula apenas para primeiros vizinhos nas conexões específicas. Além disso, apenas componentes iguais dos operadores de spin resultam em valores diferentes de zero. Assim, em termos apenas do setor de matéria, temos para $i \in A$ e $j \in B$ [64]:

$$S_{ij}^{\alpha\beta}(t) = \langle M_0 | i e^{\frac{iH_0 t}{\hbar}} c_i e^{-\frac{it}{\hbar}(H_0 + V_{\langle i,j \rangle \alpha})} c_j | M_0 \rangle \delta_{\alpha\beta} \delta_{\langle i,j \rangle \alpha}. \quad (5.27)$$

A base para compreender a origem desse comportamento foi discutida na seção (5.2). Os operadores de spin são compostos por férmions de ligação, cuja atuação altera o número de ocupação do acoplamento entre dois vizinhos, e, portanto, o campo de calibre. Como o fluxo é dado pela multiplicação dos autovalores dos campos de calibre em uma plaqueta, a atuação do operador de spin altera o autovalor do fluxo à esquerda e à direita da conexão, como ilustrado na figura (5.6). Quando dois operadores de spin correspondem a sítios não vizinhos, o

acréscimo dos fluxos leva o autoestado para setores topológicos de fluxos ortogonais ao estado fundamental, resultando em um elemento de matriz nulo: $\langle M_0 | M_F \rangle = 0$.

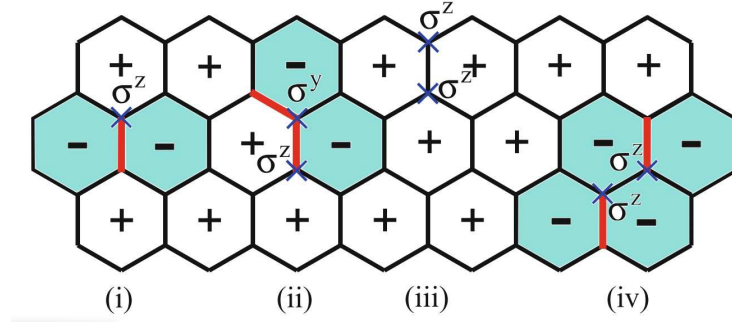


Figura 5.6: Ilustração da atuação de diversos operadores de spin no modelo de Kitaev. Em (i), o operador σ_i^z altera o autovalor do campo de calibre na conexão i, j (em vermelho), com j definido pela componente do spin. Atuar duas vezes na mesma conexão retorna o sistema ao estado sem fluxo, como mostrado em (iii). No entanto, a atuação em conexões distintas resulta em fluxos adicionais, levando o sistema a setores de fluxo topologicamente ortogonais ao estado fundamental, como em (ii) e (iv). Retirado de [54].

Os operadores de spin, na representação de Kitaev, podem ser escritos simbolicamente como [54]:

$$\sigma_i^\alpha = ic_i \hat{\prod}_{\langle i,j \rangle_\alpha}^{\text{esquerda}} \hat{\prod}_{\langle i,j \rangle_\alpha}^{\text{direita}}, \quad (5.28)$$

onde os operadores $\hat{\prod}_{\langle i,j \rangle_\alpha}^{\text{esquerda(direita)}}$ acrescentam ou removem um fluxo à esquerda (direita) da conexão. Apenas combinações de operadores que adicionam e removem os mesmos fluxos contribuem para o cálculo da função correlação.

Apesar de termos escrito a função correlação em termos do setor de matéria, resta um desafio: as evoluções temporais associadas a H_0 e $H_0 + V_{\langle i,j \rangle_\alpha}$, embora quadráticas nos férmions de Majorana de matéria, apresentam um descompasso, configurando um problema de não-equilíbrio. Como discutido em detalhe por Knolle e colaboradores [54], o férmion de Majorana adicionado ao estado fundamental evolui no tempo sob um hamiltoniano distinto de H_0 . Na próxima seção, abordaremos como corrigir esse descompasso para aplicar os conhecimentos da seção 3.6.1 [54].

Observe que a função correlação para S^{zz} pode ser transformada em S^{xx} ou S^{yy} por meio de uma troca cíclica nas constantes de interação [54]. Em virtude disto, seguindo a escolha de Knolle e colaboradores, procederemos apenas ao cálculo de S^{zz} . Considerando uma célula unitária centrada em \mathbf{r} , como ilustrado na figura (5.4), existem quatro combinações possíveis de sítios nas sub-redes A e B [54]:

$$S_{ArBr}^{zz}(t) = -i \langle M_0 | e^{\frac{iH_0 t}{\hbar}} c_{Ar} e^{-\frac{it}{\hbar}(H_0 + V_{\langle i,j \rangle_z})} c_{Br} | M_0 \rangle, \quad (5.29a)$$

$$S_{ArAr}^{zz}(t) = \langle M_0 | e^{\frac{iH_0 t}{\hbar}} c_{Ar} e^{-\frac{it}{\hbar}(H_0 + V_{\langle i,j \rangle_z})} c_{Ar} | M_0 \rangle, \quad (5.29b)$$

$$S_{BrBr}^{zz}(t) = \langle M_0 | e^{\frac{iH_0 t}{\hbar}} c_{Br} e^{-\frac{it}{\hbar}(H_0 + V_{\langle i,j \rangle_z})} c_{Br} | M_0 \rangle, \quad (5.29c)$$

$$S_{BrAr}^{zz}(t) = i \langle M_0 | e^{\frac{iH_0 t}{\hbar}} c_{Br} e^{-\frac{it}{\hbar}(H_0 + V_{\langle i,j \rangle_z})} c_{Ar} | M_0 \rangle. \quad (5.29d)$$

5.4.2 Aproximação adiabática

Demonstraremos a solução apenas para a função de correlação $S_{\text{ArAr}}^{zz}(t)$, sendo as demais resolvidas de forma análoga. A equação (5.29b) indica que cada atuação dos operadores de spin adiciona o mesmo par de fluxos π nas plaquetas adjacentes à conexão z da célula unitária localizada em \mathbf{r} (representada pelo potencial $V_{\langle i,j \rangle_z}$), além de introduzir um férmion de Majorana na sub-rede A . Assim, a função de correlação descreve a dinâmica desse férmion de Majorana em um tempo t após o acréscimo repentino do fluxo em $t = 0$ [55]. Baskaran e colaboradores resolveram esse problema exatamente, tratando-o como um problema de espalhamento de raio-X [64].

Posteriormente, Knolle e colaboradores aplicaram uma aproximação de baixas energias, na qual o potencial $V_{\langle i,j \rangle_z}$ é considerado ligado em um passado infinitamente remoto e suavemente desligado em um futuro infinitamente distante, similar a uma aproximação adiabática. Essa abordagem é justificada pela presença de um espectro de Dirac no modelo de Kitaev, que apresenta uma densidade de estados linearmente nula para baixas energias [54].

A equação (5.29b) pode ser reescrita em termos do hamiltoniano com o par extra de fluxos, $H_z = H_0 + V_{\langle i,j \rangle_z}$, como:

$$S_{\text{ArAr}}^{zz}(t) \approx e^{iE_0 t/\hbar} {}_z \langle c_{\text{Ar}} e^{-iH_z t/\hbar} c_{\text{Ar}} \rangle_z, \quad (5.30)$$

calculada em relação ao estado fundamental de H_z , diferentemente da equação (5.29b), cuja média é calculada utilizando os estados de H_0 .

Utilizando a relação $e^{iE_0 t/\hbar} \langle M_z | = e^{i(E_0 - E_z)t/\hbar} \langle M_z | e^{iH_z t/\hbar}$, obtemos:

$$S_{\text{ArAr}}^{zz}(t) = e^{-i\Delta_F t/\hbar} {}_z \langle c_{\text{Ar}}(t) c_{\text{Ar}}(0) \rangle_z, \quad (5.31)$$

onde $c_{\text{Ar}}(t) = e^{iH_z t/\hbar} c_{\text{Ar}} e^{-iH_z t/\hbar}$ e $\Delta_F = E_z - E_0$ é a energia necessária para adicionar os fluxos [55]. Substituindo os operadores de Majorana por férmions complexos, temos:

$$S_{\text{ArAr}}^{zz}(t) = -e^{-i\Delta_F t/\hbar} {}_z \langle \left(f_{\mathbf{r}}(t) + f_{\mathbf{r}}^\dagger(t) \right) \left(f_{\mathbf{r}}(0) + f_{\mathbf{r}}^\dagger(0) \right) \rangle_z. \quad (5.32)$$

Agora, o cálculo da função de correlação reduz-se ao valor esperado calculado em termos do hamiltoniano conhecido somado a um pequeno potencial adicional, podendo ser resolvido conforme abordado na seção 3.6.1. Definindo a frequência correspondente à diferença de energia entre os setores topológicos como $\Omega_F = \Delta_F/\hbar$, obtemos no espaço recíproco:

$$\begin{aligned} S_{\text{ArAr}}^{zz}(t) = & -\frac{e^{-i\Omega_F t}}{N_u} \sum_{qq'} \left[\langle f_{-q}(t) f_{-q'}^\dagger(0) \rangle_z + \langle f_{-q}(t) f_{q'}(0) \rangle_z + \right. \\ & \left. + \langle f_q^\dagger(t) f_{q'}(0) \rangle_z + \langle f_q^\dagger(t) f_{-q'}^\dagger(0) \rangle_z \right] e^{i(\mathbf{q}-\mathbf{q}')\mathbf{r}}. \end{aligned} \quad (5.33)$$

Similarmente, obtém-se a função correlação para o sítio da sub-rede B :

$$S_{\text{BrBr}}^{zz}(t) = e^{-i\Delta_F t/\hbar} {}_z \langle \left(f_{\mathbf{r}}(t) - f_{\mathbf{r}}^\dagger(t) \right) \left(f_{\mathbf{r}}(0) - f_{\mathbf{r}}^\dagger(0) \right) \rangle_z, \quad (5.34)$$

que no espaço dos momentos toma a forma:

$$S_{BrBr}^{zz}(t) = \frac{e^{-i\Omega_F t}}{N} \sum_{qq'} \left[-\langle f_{-q}(t) f_{-q'}^\dagger(0) \rangle_z + \langle f_{-q}(t) f_{q'}(0) \rangle_z + \right. \\ \left. -\langle f_q^\dagger(t) f_{q'}(0) \rangle_z + \langle f_q^\dagger(t) f_{-q'}^\dagger(0) \rangle_z \right] e^{i(\mathbf{q}-\mathbf{q}')\mathbf{r}}. \quad (5.35)$$

Assim, a função correlação total, somando em todas células, é escrita como:

$$S^{zz}(t) = \sum_r [S_{ArAr}^{zz}(t) + S_{BrBr}^{zz}(t)] \quad (5.36)$$

$$S^{zz}(t) = -2e^{-i\Omega_F t} \sum_q \left[\langle f_{-q}(t) f_{-q}^\dagger(0) \rangle_z + \langle f_q^\dagger(t) f_q(0) \rangle_z \right], \quad (5.37)$$

ou, no espaço real:

$$S^{zz}(t) = -2e^{-i\Omega_F t} \sum_r \left[\langle f_r(t) f_r^\dagger(0) \rangle_z + \langle f_r^\dagger(t) f_r(0) \rangle_z \right]. \quad (5.38)$$

5.5 Função de Green não perturbada

Em vias de realizar o cálculo da equação (5.38), é necessário determinar primeiramente a função de Green para os férmions de matéria no modelo de Kitaev sem perturbações, ou seja, no caso em que $V_z = 0$. A função de Green é, então, dada por:

$$\langle f_r(t) f_r^\dagger(0) \rangle_0 = \frac{1}{N_u} \sum_{qq'} \langle f_q(t) f_{q'}^\dagger(0) \rangle_0 e^{i(\mathbf{q}-\mathbf{q}')\mathbf{r}}, \quad (5.39)$$

que, utilizando a transformação de Bogoliubov definida na equação (5.17), torna-se:

$$\langle f_r(t) f_r^\dagger(0) \rangle_0 = \frac{1}{N_u} \sum_{qq'} \langle [\cos \theta_q a_q(t) + i \sin \theta_q a_q(t)] \times \\ [\cos \theta_{q'} a_{q'}(0) - i \sin \theta_{q'} a_{q'}(0)] \rangle_0 e^{i(\mathbf{q}-\mathbf{q}')\mathbf{r}}. \quad (5.40)$$

Com base nos resultados obtidos na equação (5.18), podemos definir a frequência $\omega_q = E_q/\hbar$ e a respectiva distribuição de Fermi-Dirac $f_q = f(E_q)$, obtendo:

$$\langle f_r(t) f_r^\dagger(0) \rangle_0 = \frac{1}{N_u} \sum_q [e^{-i\omega_q t} \cos^2 \theta_q (1 - f_q) + e^{i\omega_q t} \sin^2 \theta_q f_q]. \quad (5.41)$$

De forma similar, temos:

$$\langle f_r(t) f_r(0) \rangle_0 = \frac{1}{N_u} \sum_q \cos \theta_q \sin \theta_q [e^{-i\omega_q t} (1 - f_q) - e^{i\omega_q t} f_q], \quad (5.42)$$

mas, como a soma é realizada sobre um intervalo simétrico da zona de Brillouin, envolvendo uma função ímpar e uma função par, temos $\langle f_r(t) f_r(0) \rangle_0 = 0$. Cálculos semelhantes demonstram que $\langle f_r^\dagger(t) f_r^\dagger(0) \rangle_0 = 0$. Portanto, todos os termos anômalos podem ser ignorados.

5.6 Função de Green magnética

No capítulo (4), demonstra-se que a corrente de spin na interface entre um condutor normal e um material magnético depende da função de Green magnética no espaço das frequências, representada por $D_{ij}^{-+}(\nu)$, conforme detalhado na equação (4.50). A função de Green magnética encapsula os efeitos das excitações magnéticas e suas contribuições à dinâmica da corrente de spin.

Considere a função de Green magnética definida por:

$$\begin{aligned} D_{ij}^{-+}(t) &= \langle S_i^-(t) S_j^+(0) \rangle_0, \\ &= \langle S_i^x(t) S_j^x(0) \rangle_0 - i \langle S_i^x(t) S_j^y(0) \rangle_0 \\ &\quad + i \langle S_i^y(t) S_j^x(0) \rangle_0 + \langle S_i^y(t) S_j^y(0) \rangle_0, \end{aligned} \quad (5.43)$$

que, usando a equação (5.27), fornece a transformada de Fourier:

$$\tilde{D}_{ij}^{-+}(\nu) = \int dt \left(\langle S_i^x(t) S_j^x(0) \rangle_0 + \langle S_i^y(t) S_j^y(0) \rangle_0 \right) e^{i\nu t}. \quad (5.44)$$

Portanto iremos encontrar nessa seção a função correlação para z , pois, como discutido na seção (5.4.1), a correlação para as componentes x e y são obtidas a partir da correlação para z permutando as constantes de troca. Assim, a fim de escrever a parte magnética em termos apenas das funções retardadas e avançadas, as quais são fornecidas de forma mais simples pelo formalismo de tempo imaginário, definiremos outras funções de Green [42] para z :

$$\hbar G_r^>(t) = -i \langle f_r(t) f_r^\dagger(0) \rangle_z, \quad (5.45a)$$

$$\hbar G_r^<(t) = i \langle f_r^\dagger(0) f_r(0) \rangle_z, \quad (5.45b)$$

$$\hbar G_r(t) = -i \langle T_t f_r(t) f_r^\dagger(0) \rangle_z, \quad (5.45c)$$

$$\begin{aligned} \hbar G_r^{ret}(t) &= -i \theta(t) \langle \{ f_r(t), f_r^\dagger(0) \} \rangle_z, \\ &= \hbar G_r(t) - \hbar G_r^<(t), \end{aligned} \quad (5.46a)$$

$$\begin{aligned} \hbar G_r^{adv}(t) &= i \theta(-t) \langle \{ f_r(t), f_r^\dagger(0) \} \rangle_z, \\ &= \hbar G_r(t) - \hbar G_r^>(t). \end{aligned} \quad (5.46b)$$

Dessa forma, a equação (5.38) pode ser reescrita como:

$$S^{zz}(t) = -2ie^{i\Omega_F t} \sum_r \hbar (G_r^>(t) - G_r^<(t)), \quad (5.47)$$

cuja transformada de Fourier é expressa como:

$$\tilde{S}^{zz}(\nu) = -2i\hbar \sum_r \int dt e^{i(\nu - \Omega_F)t} (G_r^>(t) - G_r^<(t)), \quad (5.48)$$

$$\tilde{S}^{zz}(\nu) = -2i\hbar \sum_{\mathbf{r}} (\tilde{G}_{\mathbf{r}}^{>}(\nu - \Omega_F) - \tilde{G}_{\mathbf{r}}^{<}(-\nu + \Omega_F)). \quad (5.49)$$

Como as funções de correlação para a célula unitária não dependem da posição da célula [54], tem-se que $\sum_{\mathbf{r}} G_{\mathbf{r}} = N_u G$. Nosso objetivo agora é encontrar $\tilde{G}_{\mathbf{r}}^{<}(\nu)$ escrita apenas em termos das funções retardadas. Para isto, iremos primeiro achar uma relação entre $\tilde{G}_{\mathbf{r}}^{<}(\nu)$ e $\tilde{G}_{\mathbf{r}}^{>}(\nu)$. Usando a propriedade cíclica da formulação de tempo imaginário:

$$i\langle f_{\mathbf{r}}^{\dagger}(0)f_{\mathbf{r}}(t) \rangle_z = i\langle f_{\mathbf{r}}(t - i\beta\hbar)f_{\mathbf{r}}^{\dagger}(0) \rangle_z, \quad (5.50)$$

assim podemos relacionar $\tilde{G}_{\mathbf{r}}^{<}(\nu)$ e $\tilde{G}_{\mathbf{r}}^{>}(\nu)$ mediante uma substituição simples da forma:

$$\hbar\tilde{G}_{\mathbf{r}}^{<}(\nu) = i \int dt e^{i\nu t} \langle f_{\mathbf{r}}(t - i\beta\hbar)f_{\mathbf{r}}^{\dagger}(0) \rangle_z, \quad (5.51)$$

$$\tilde{G}_{\mathbf{r}}^{<}(\nu) = -e^{-\beta\hbar\nu} \tilde{G}_{\mathbf{r}}^{>}(\nu). \quad (5.52)$$

portanto, obtemos a relação:

$$\tilde{G}_{\mathbf{r}}^{ret}(\nu) - \tilde{G}_{\mathbf{r}}^{adv}(\nu) = \tilde{G}_{\mathbf{r}}^{>}(\nu) - \tilde{G}_{\mathbf{r}}^{<}(\nu) = (1 + e^{-\beta\hbar\nu})\tilde{G}_{\mathbf{r}}^{>}(\nu), \quad (5.53)$$

$$\tilde{G}_{\mathbf{r}}^{>}(\nu) = (1 - f(\hbar\nu)) (\tilde{G}_{\mathbf{r}}^{ret}(\nu) - \tilde{G}_{\mathbf{r}}^{adv}(\nu)). \quad (5.54)$$

Como estamos considerando o limite de baixas temperaturas, ou seja, $\beta \gg \hbar\nu$, é possível aproximar $1 - f(\hbar\nu) \approx \theta(\nu)$, com $\theta(\nu)$ sendo a função degrau no espaço das frequências. Desta forma, a equação (5.54) é reescrita como

$$\tilde{G}_{\mathbf{r}}^{>}(\nu) = \theta(\nu) (\tilde{G}_{\mathbf{r}}^{ret}(\nu) - \tilde{G}_{\mathbf{r}}^{adv}(\nu)). \quad (5.55)$$

Agora a equação (5.49), após realizar a soma em \mathbf{r} , pode ser escrita como:

$$\begin{aligned} \tilde{S}^{zz}(\nu) = & -2i\hbar N_u \theta(\nu - \Omega_F) [\tilde{G}^{ret}(\nu - \Omega_F) - \tilde{G}^{adv}(\nu - \Omega_F) + \\ & + \tilde{G}^{ret}(-\nu + \Omega_F) - \tilde{G}^{adv}(-\nu + \Omega_F)]. \end{aligned} \quad (5.56)$$

Note que $\tilde{G}^{ret}(\omega) = (\tilde{G}^{adv}(\omega))^*$ e $\tilde{G}^{ret}(\omega) - \tilde{G}^{adv}(\omega) = 2i \text{Im}\tilde{G}^{ret}(\omega)$. Fazendo uso destes resultados, finalmente temos:

$$\tilde{S}^{zz}(\nu) = 4\hbar N_u \theta(\nu - \Omega_F) \text{Im} [\tilde{G}^{ret}(\nu - \Omega_F) - \tilde{G}^{ret}(-\nu + \Omega_F)] \quad (5.57)$$

5.6.1 Função de Green retardada

Para determinar as funções de Green retardadas descritas na equação (5.57), podemos empregar o formalismo de tempo imaginário [42]. A função de Green imaginária ordenada temporalmente é definida como:

$$\hbar\mathcal{L}_q(\tau) = -\langle T_{\tau} f_q(\tau) f_q^{\dagger}(0) \rangle, \quad (5.58)$$

em que $f_q(\tau) = e^{H_z\tau} f_q e^{-H_z\tau}$. Utilizando o formalismo de interação (ver seção 3.6.2), obtemos:

$$f_q(\tau) = e^{H_z\tau} e^{-H_0\tau} \hat{f}_q e^{H_0\tau} e^{-H_z\tau} = S(0, \tau) \hat{f}_q(\tau) S(\tau, 0), \quad (5.59)$$

onde H_0 é o hamiltoniano de Kitaev sem a introdução de fluxos adicionais. Assim, temos:

$$\hbar\mathcal{G}_q(\tau) = -\frac{1}{Z} \text{Tr}(T_\tau e^{-\beta H_z} f_q(\tau) f_q^\dagger(0)). \quad (5.60)$$

A matriz de espalhamento no formalismo de tempo imaginário é definida por:

$$S(\beta) = \exp\left(-\frac{1}{\hbar} \int_0^{\beta\hbar} d\tau' \hat{V}_z(\tau')\right), \quad (5.61)$$

desta forma, podemos reescrever a função partição com relação ao hamiltoniano após a inclusão dos fluxos como:

$$Z = \text{Tr}(e^{-\beta H_z}) = \text{Tr}(e^{-H_0\tau} e^{H_0\tau} e^{-H_z\tau}) = \langle S(\beta) \rangle_0, \quad (5.62)$$

e portanto a função de Green no tempo imaginário é:

$$\hbar\mathcal{G}_q(\tau) = -\frac{1}{\langle S(\beta) \rangle_0} \langle T_\tau \hat{f}_q(\tau) \hat{f}_q^\dagger(0) S(\beta) \rangle_0. \quad (5.63)$$

A partir desse ponto, é possível obter a função de Green não perturbada. Com base na seção 5.5, expressamos:

$$\hbar\mathcal{G}_q^{(0)}(\tau) = \cos^2 \theta_q e^{-\omega_q \tau} (f_q - \theta(\tau)) - \sin^2 \theta_q e^{\omega_q \tau} (f_q - \theta(-\tau)). \quad (5.64)$$

e aplicando a transformada de Fourier, obtemos:

$$\hbar\tilde{\mathcal{G}}_q^{(0)}(i\Omega_l) = \cos^2 \theta_q (f_q - 1) \int_0^{\beta\hbar} e^{(i\Omega_l - \omega_q)\tau} d\tau - \sin^2 \theta_q f_q \int_0^{\beta\hbar} e^{(i\Omega_l + \omega_q)\tau} d\tau. \quad (5.65)$$

Note que, ao se tratar de uma função de Green fermiônica, as frequências seguem a relação $\Omega_l = \pi(2n + 1)/\beta\hbar$, que resultam em $e^{i\beta\hbar\Omega_l} = -1$. Desta forma, a função de Green tempo imaginário no espaço das frequências é dada por:

$$\tilde{\mathcal{G}}_q^{(0)}(i\Omega_l) = \frac{\cos^2 \theta_q}{i\hbar\Omega_l - E_q} - \frac{\sin^2 \theta_q}{i\hbar\Omega_l + E_q}. \quad (5.66)$$

Para a função de Green no tempo imaginário perturbada, escrevemos o potencial de interação em termos dos férmions de matéria como:

$$V_z = g \left(f_r^\dagger f_r - \frac{1}{2} \right), \quad (5.67)$$

com $g = -4J_z$. Portanto, podemos expandir a matriz $S(\beta)$ na equação (5.63), resultando em uma soma de Dyson cujos termos são representados pelos diagramas de Feynman conectados

[42], mostrados na figura (5.7). Assim, a função de Green total é fornecida por:

$$\mathcal{G}_r(\tau) = -\langle T_\tau \hat{f}_r(\tau) \hat{f}_r^\dagger(0) \rangle_0 + g \int d\tau' \langle T_\tau \hat{f}_r(\tau) \hat{f}_r^\dagger(0) \hat{f}_r^\dagger(\tau') \hat{f}_r(\tau') \rangle_c + \dots \quad (5.68)$$

$$= \mathcal{G}_r^{(0)}(\tau) + g \int d\tau' \mathcal{G}_r^{(0)}(\tau - \tau') \mathcal{G}_r^{(0)}(\tau' - 0) + \dots \quad (5.69)$$

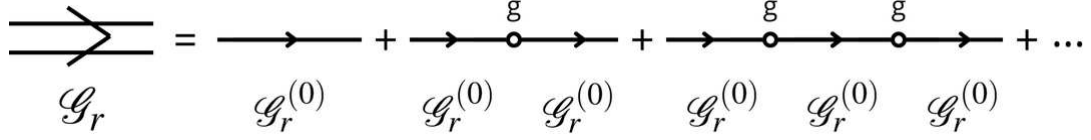


Figura 5.7: Diagrama de Feynman representando a função de Green perturbada, decomposta como uma soma de Dyson das funções de Green não perturbadas, onde a interação g atua como um termo que contabiliza o número de férmions de matéria.

No espaço das frequências a função de Green pode ser simplificada como:

$$\tilde{\mathcal{G}}_r(i\Omega_l) = \tilde{\mathcal{G}}_r^{(0)}(i\Omega_l) \sum_{n=0}^{\infty} \left(g \tilde{\mathcal{G}}_r^{(0)}(i\Omega_l) \right)^n = \frac{\tilde{\mathcal{G}}_r^{(0)}(i\Omega_l)}{1 - g \tilde{\mathcal{G}}_r^{(0)}(i\Omega_l)}, \quad (5.70)$$

ao qual podemos realizar uma transformada de Fourier no espaço dos momentos e utilizar a independência da posição da célula unitária para obter:

$$\tilde{\mathcal{G}}_r^{(0)}(i\Omega_l) = \frac{1}{N_u} \sum_q \tilde{\mathcal{G}}_q^{(0)}(i\Omega_l). \quad (5.71)$$

A continuação analítica, $i\Omega_l \rightarrow \omega \pm i\varepsilon$, fornece a função de Green retardada $\tilde{\mathcal{G}}_q^{(0)}(\omega + i\varepsilon) = \tilde{G}_q^{\text{ret}(0)}(\omega)$ e avançada $\tilde{\mathcal{G}}_q^{(0)}(\omega - i\varepsilon) = \tilde{G}_q^{\text{adv}(0)}(\omega)$ [42]. Desta forma, encontramos a função de Green retardada não perturbada:

$$\tilde{G}_q^{\text{ret}(0)}(\omega) = \frac{\hbar\omega + i\varepsilon + E_q \cos 2\theta_q}{(\hbar\omega + i\varepsilon)^2 - E_q^2}, \quad (5.72)$$

que pode ser simplificada utilizando as definições feitas na transformação de Bogoliubov pela equação (5.17), resultando em:

$$\tilde{G}_q^{\text{ret}(0)}(\omega) = \frac{\hbar\omega + 2S'_q + i\varepsilon}{(\hbar\omega + i\varepsilon)^2 - E_q^2}, \quad (5.73)$$

$$\tilde{G}_q^{\text{adv}(0)}(\omega) = \frac{\hbar\omega + 2S'_q - i\varepsilon}{(\hbar\omega - i\varepsilon)^2 - E_q^2}. \quad (5.74)$$

Finalmente, a função de Green retardada completa é dada por:

$$\tilde{G}^{\text{ret}}(\omega) = \frac{\tilde{G}^{\text{ret}(0)}(\omega)}{1 + 4J_\alpha \tilde{G}^{\text{ret}(0)}(\omega)}. \quad (5.75)$$

6 Corrente de spin

6.1 Corrente de spin na interface entre a rede hexagonal FM e condutor normal

Para explorar as propriedades de transporte de spin em ferromagnetos e compará-las com características topológicas do modelo de Kitaev, adotamos um modelo ferromagnético bidimensional com sítios localizados nos vértices de uma rede hexagonal. É relevante observar que, no regime de longos comprimentos de onda, os resultados tornam-se independentes da geometria da rede, exceto por fatores constantes. Para garantir uma fase ordenada em temperaturas finitas, o hamiltoniano é formulado com a inclusão de uma anisotropia de eixo fácil, dada pela seguinte expressão:

$$H_{\text{FM}} = -J_e \sum_{\langle ij \rangle} \left(S_i^x S_j^x + S_i^y S_j^y + \lambda S_i^z S_j^z \right), \quad (6.1)$$

onde $J_e > 0$ e $\lambda > 1$ representam, respectivamente, a constante de troca ferromagnética e o parâmetro anisotrópico. Aplicando a representação de spin de Holstein-Primakoff na aproximação linear de onda de spin, fornecida pela equação (3.62c), obtemos:

$$H_{\text{FM}} = -J_e \sum_{i \in A} \sum_{j \in B} \left[S \left(a_i a_j^\dagger + a_i^\dagger a_j \right) + \lambda S^2 - \lambda S \left(a_i^\dagger a_i + a_j^\dagger a_j \right) \right]. \quad (6.2)$$

A transformada de Fourier para o espaço dos momentos é dada por:

$$a_i = \frac{1}{\sqrt{N_u}} \sum_{\mathbf{q}} a_{\mathbf{q}} e^{-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}_i}, \quad (6.3)$$

portanto, desconsiderando os termos constantes, o hamiltoniano se torna:

$$H_{\text{FM}} = \frac{J_e S}{N_u} \sum_{i, q, q'} \sum_{\alpha} \left[a_q^\dagger a_{q'} e^{i(\mathbf{q}' - \mathbf{q}) \cdot \mathbf{r}_i} (\lambda - e^{-i\mathbf{q} \cdot \eta_\alpha}) + a_q^\dagger a_q e^{i(\mathbf{q} - \mathbf{q}') \cdot \mathbf{r}_i} (\lambda - e^{i\mathbf{q} \cdot \eta_\alpha}) \right]. \quad (6.4)$$

cujos vetores de base para os primeiros vizinhos $\vec{\eta}_\alpha$ são:

$$\vec{\eta}_x = \left(\frac{\sqrt{3}a}{2}, \frac{a}{2} \right); \quad \vec{\eta}_y = \left(-\frac{\sqrt{3}a}{2}, \frac{a}{2} \right); \quad \vec{\eta}_z = (0, -a). \quad (6.5)$$

Definindo o fator de estrutura como:

$$\gamma_{\mathbf{q}} = z^{-1} \sum_{\alpha} e^{-i\mathbf{q} \cdot \eta_\alpha} = \gamma'_{\mathbf{q}} + i\gamma''_{\mathbf{q}} = \frac{2 \cos(\sqrt{3}q_x a/2) e^{iq_y a/2} + e^{-iq_y a}}{3}, \quad (6.6)$$

obtemos o hamiltoniano diagonalizado:

$$H_{\text{FM}} = \sum_{\mathbf{q}} \hbar \omega_{\mathbf{q}} a_{\mathbf{q}}^\dagger a_{\mathbf{q}}, \quad (6.7)$$

na qual $e_{\mathbf{q}} = \hbar\omega_{\mathbf{q}} = 6J_e S(\lambda - \text{Re } \gamma_{\mathbf{q}})$ representa a energia do mágnon.

No limite de grandes comprimentos de onda, a dispersão é caracterizada por uma equação não relativística com uma lacuna, expressa por:

$$e_{\mathbf{q}} \approx \Delta_{\lambda} + \frac{3J_e S a^2 q^2}{2}, \quad (6.8)$$

em que $\Delta_{\lambda} = 6J_e S(1 - \lambda)$ é a energia da lacuna originada pela interação anisotrópica. Note que a relação de dispersão é quadrática nos momentos, não possuindo característica de cones de Dirac.

A correlação entre spins assume uma forma simples, dada por:

$$D_{\text{FM}}^{-+}(t) = \sum_i D_{ii}^{-+}(t) = 4S \sum_{\mathbf{q}} e^{i\omega_{\mathbf{q}} t} n_{\mathbf{q}}, \quad (6.9)$$

sendo $n(e_{\mathbf{q}}) = n_{\mathbf{q}} = \left(e^{\beta e_{\mathbf{q}}} - 1\right)^{-1}$ a distribuição de Bose-Einstein dos mágnons. No espaço de frequências, obtemos:

$$\tilde{D}_{\text{FM}}^{-+}(\omega) = 8\pi S \sum_{\mathbf{q}} n_{\mathbf{q}} \delta(\omega + \omega_{\mathbf{q}}), \quad (6.10)$$

demonstrando que as frequências são bem definidas e iguais as frequências das energias referentes.

6.1.1 Corrente de spin

Usando a equação (4.50), podemos escrever a susceptibilidade para o caso ferromagnético usual como:

$$\tilde{\chi}''(\omega) = -(\pi\rho_F)^2 4\pi S \left(1 - e^{-\beta(\hbar\omega + \Delta\mu)}\right) \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\varepsilon}{2\pi} \frac{\varepsilon - \hbar\omega - \Delta\mu}{e^{\beta\hbar(\varepsilon - \hbar\omega - \Delta\mu)} - 1} \sum_{\mathbf{q}} n_{\mathbf{q}} \delta(\varepsilon + e_{\mathbf{q}}), \quad (6.11)$$

quando a frequência assume o valor $\omega = 0$, temos:

$$\tilde{\chi}''(0) = 2S(\pi\rho_F)^2 \left(1 - e^{-\beta\Delta\mu}\right) \sum_{\mathbf{q}} (e_{\mathbf{q}} + \Delta\mu) n(-e_{\mathbf{q}} - \Delta\mu) n(e_{\mathbf{q}}). \quad (6.12)$$

A equação acima pode ser simplificada reescrevendo a distribuição de Bose-Einstein como:

$$n(-e_{\mathbf{q}} - \Delta\mu) = \frac{1}{e^{\beta(-e_{\mathbf{q}} - \Delta\mu)} - 1} = -e^{\beta(e_{\mathbf{q}} + \Delta\mu)} n(e_{\mathbf{q}} + \Delta\mu), \quad (6.13)$$

além disso, a multiplicação das distribuições de Bose são relacionadas pela diferença entre as mesmas por:

$$n(e_{\mathbf{q}} + \Delta\mu) n(e_{\mathbf{q}}) = -(n(e_{\mathbf{q}} + \Delta\mu) - n(e_{\mathbf{q}})) \frac{e^{-\beta(e_{\mathbf{q}} + \Delta\mu)}}{1 - e^{-\beta\Delta\mu}}, \quad (6.14)$$

fornecendo a susceptibilidade:

$$\chi''(0) = 2S(\pi\rho_F)^2 \left(1 - e^{-\beta\Delta\mu}\right) \sum_{\mathbf{q}} (e_{\mathbf{q}} + \Delta\mu) \frac{n(e_{\mathbf{q}} + \Delta\mu) - n(e_{\mathbf{q}})}{1 - e^{-\beta\Delta\mu}}. \quad (6.15)$$

Para $\Delta\mu \ll e_{\mathbf{q}}$, podemos usar a aproximação:

$$n(e_{\mathbf{q}} + \Delta\mu) - n(e_{\mathbf{q}}) \approx \Delta\mu \frac{dn(e_{\mathbf{q}})}{de_{\mathbf{q}}} = -\beta\Delta\mu \frac{e^{\beta e_{\mathbf{q}}}}{(e^{\beta e_{\mathbf{q}}} - 1)^2}, \quad (6.16)$$

e então temos a susceptibilidade aproximada:

$$\tilde{\chi}''(0) \approx -\rho_m A 2S(\pi\rho_F)^2 \beta \Delta\mu \frac{1}{N_u} \sum_{\mathbf{q}} \left(e_{\mathbf{q}} e^{\beta e_{\mathbf{q}}} n(e_{\mathbf{q}})^2 + \Delta\mu e^{\beta e_{\mathbf{q}}} n(e_{\mathbf{q}})^2 \right). \quad (6.17)$$

Para valores $aq \ll 1$, podemos aproximar a energia por $e_{\mathbf{q}} \approx 2zJ_e S(\lambda - 1) + \frac{3J_S^2}{2} a^2 q^2$, e, conforme demonstrado no Apêndice (B), obtemos:

$$\tilde{\chi}''(0) = -\sqrt{3}\rho_m A (\pi\rho_F)^2 \frac{\Delta\mu}{J_e 2\pi} \left[\Delta\lambda (n(\Delta\lambda) + 1) + \frac{1}{\beta} \ln(n(\Delta\lambda)) \right]. \quad (6.18)$$

Finalmente, a densidade de corrente de spin é fornecida por:

$$J_S = \frac{\langle I_S \rangle}{A} = -2 \left(\frac{2J_{sd}}{N_e} \right)^2 \frac{\tilde{\chi}''}{A}, \quad (6.19)$$

$$J_S \approx 2\sqrt{3}\rho_m \left(\frac{2\pi\rho_F J_{sd}}{N_e} \right)^2 \frac{\Delta\mu}{2\pi J_e} \left[\Delta\lambda (n(\Delta\lambda) + 1) + \frac{1}{\beta} \ln(n(\Delta\lambda)) \right]. \quad (6.20)$$

Uma análise direta da equação acima, aplicando o limite para um modelo isotrópico em temperaturas diferentes de zero, evidencia a necessidade da anisotropia para garantir a convergência dos resultados:

$$J_S \rightarrow 2\sqrt{3}\rho_m \left(\frac{2\pi\rho_F J_{sd}}{N_e} \right)^2 \frac{\Delta\mu}{2\pi J_e \beta} [1 - \ln(\beta\Delta\lambda)] \rightarrow +\infty, \quad (6.21)$$

ou seja, à medida que $\lambda \rightarrow 1$ e a lacuna de energia tende a zero, correspondendo ao caso sem anisotropia, a densidade de corrente de spin apresenta um comportamento divergente, ou seja, o modelo não abarca essa situação.

A figura (6.1) ilustra o comportamento da corrente de spin em um ferromagneto. Para uma diferença de potencial químico pequena entre os elétrons de spin *up* e spin *down*, a corrente apresenta um comportamento ôhmico, dado por $I_S \approx G\Delta\mu$. Um fenômeno análogo é observado em junções compostas por camadas ferromagnéticas tridimensionais [70, 71].

Por outro lado, materiais ferromagnéticos bidimensionais com anisotropia de eixo fácil típicos possuem um acoplamento de troca J_e geralmente na faixa de meV. Nestes casos, com $S = 5/2$ e $\lambda \approx 1,005$, a temperatura de transição situa-se na ordem de dezenas de Kelvin [69].

Além disso, observa-se um aumento da corrente de spin à medida que a temperatura cresce,

resultado esperado, já que a população de mágnons aumenta com o aumento da temperatura.

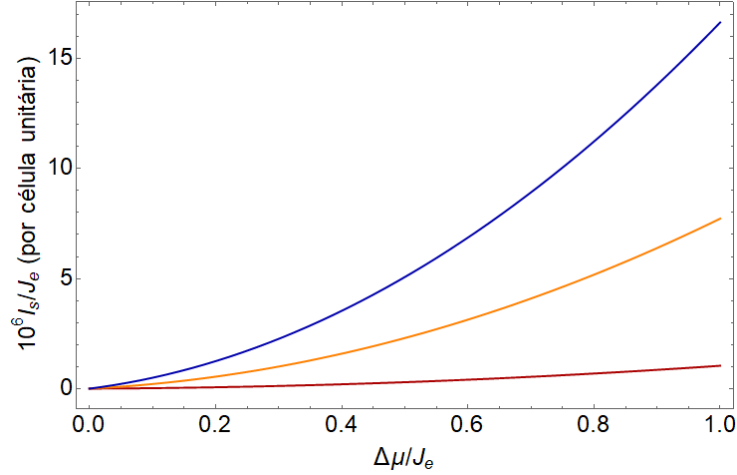


Figura 6.1: Corrente de Spin (por célula unitária) injetada na camada ferromagnética expressada em função do acúmulo de potencial químico de spin. As temperaturas utilizadas estão definidas como $T = 0, 1J_e/K_B$ (linha vermelha), $T = 0, 5J_e/K_B$ (linha amarela) e $T = 1J_e/K_B$ (linha azul). Todos resultados obtidos para $J_e = 10^{-3} eV$, $\lambda = 1.005$ e $S = 5/2$.

6.2 Corrente de spin na interface entre o modelo de Kitaev e condutor normal

Utilizando os resultados apresentados nos capítulos anteriores, determinaremos o valor da corrente de spin na interface entre o Modelo de Kitaev e um metal condutor normal. Com base na modelagem descrita no capítulo 4, para uma interface entre um condutor e uma parte magnética genérica, obtemos as Equações (4.50) e (4.49), que, combinadas, fornecem:

$$\langle I_s \rangle = \left(\frac{2\pi J_{sd} \rho_F}{N_e} \right)^2 \hbar \left(1 - e^{-\beta \Delta \mu} \right) \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\nu}{2\pi} \frac{\nu - \Omega_\mu}{e^{\beta \hbar (\nu - \Omega_\mu)} - 1} \sum_{\mathbf{r}} \tilde{D}_{\mathbf{r}}^{-+}(\nu), \quad (6.22)$$

em que, no espaço temporal temos:

$$D_{\mathbf{r}}^{-+}(t) = \langle S_{\mathbf{r}A}^x(t) S_{\mathbf{r}A}^x(0) \rangle_0 + \langle S_{\mathbf{r}A}^y(t) S_{\mathbf{r}A}^y(0) \rangle_0 + \langle S_{\mathbf{r}B}^x(t) S_{\mathbf{r}B}^x(0) \rangle_0 + \langle S_{\mathbf{r}B}^y(t) S_{\mathbf{r}B}^y(0) \rangle_0. \quad (6.23)$$

No caso isotrópico, no qual $J_x = J_y = J_z = J_K$, as funções de correlação para x, y e z são iguais. Assim, podemos escrever:

$$D_{\mathbf{r}}^{-+}(t) = 2 \langle S_{\mathbf{r}A}^z(t) S_{\mathbf{r}A}^z(0) \rangle_0 + 2 \langle S_{\mathbf{r}B}^z(t) S_{\mathbf{r}B}^z(0) \rangle_0 = 2S_{A\mathbf{r}A\mathbf{r}}^{zz}(t) + 2S_{B\mathbf{r}B\mathbf{r}}^{zz}(t) = 2S_{\mathbf{r}}^{zz}(t), \quad (6.24)$$

e, no espaço das frequências, temos $\sum_{\mathbf{r}} \tilde{D}_{\mathbf{r}}^{-+}(\nu) = 2 \sum_{\mathbf{r}} \tilde{S}_{\mathbf{r}}^{zz}(\nu)$. Utilizando a equação (5.57), obtemos:

$$\sum_{\mathbf{r}} \tilde{D}_{\mathbf{r}}^{-+}(\nu) = 8\hbar N_u \theta(\nu - \Omega_F) \text{Im} \left[\tilde{G}^{ret}(\nu - \Omega_F) - \tilde{G}^{ret}(-\nu + \Omega_F) \right]. \quad (6.25)$$

Considerando o limite de baixas temperaturas, $\beta\hbar(v - \Omega_\mu) \gg 1$, podemos aproximar:

$$\frac{1}{e^{\beta\hbar(v - \Omega_\mu)} - 1} \approx -\theta(\Omega_\mu - v), \quad (6.26)$$

de modo que as funções degrau limitam a integração. Assim, obtemos a corrente de spin:

$$\begin{aligned} \langle I_s \rangle &= 2N_u \theta(\Omega_\mu - \Omega_F) \left(\frac{4\pi\hbar J_{sd}\rho_F}{N_e} \right)^2 (1 - e^{-\beta\Delta\mu}) \times \\ &\times \int_{\Omega_F}^{\Omega_\mu} \frac{d\nu}{2\pi} (\nu - \Omega_\mu) \text{Im} [\tilde{G}^{ret}(\nu - \Omega_F) + \tilde{G}^{ret}(-\nu + \Omega_F)], \end{aligned} \quad (6.27)$$

ou, alternativamente:

$$\begin{aligned} \langle I_s \rangle &= N_u \theta(\Delta\mu - \Delta_F) \left(\frac{4\sqrt{\pi} J_{sd}\rho_F}{N_e} \right)^2 (1 - e^{-\beta\Delta\mu}) \times \\ &\times \int_0^{\Delta\mu - \Delta_F} (E - \Delta\mu + \Delta_F) \text{Im} [\tilde{G}^{ret}(E) + \tilde{G}^{ret}(-E)] dE, \end{aligned} \quad (6.28)$$

Portanto apenas quando o condutor apresenta um acúmulo de potencial químico maior que a diferença de energia entre os setores sem e com fluxo, haverá uma corrente de spin fluindo na interface. Isso estabelece uma relação entre o fluxo dos campos de calibre e o transporte de corrente de spin. Essa situação é análoga à corrente de spin em uma interface supercondutora, onde a propagação ocorre somente quando o acúmulo de potencial químico excede a energia necessária para romper um par de Cooper.

6.2.1 Aproximação de cones de Dirac

No espaço das posições os vetores de base do modelo *honeycomb*, ilustrados na figura (6.2a), são:

$$\vec{a}_1 = \sqrt{3}a \hat{i}; \quad \vec{a}_2 = \frac{\sqrt{3}}{2}a \hat{i} + \frac{3}{2}a \hat{j}. \quad (6.29)$$

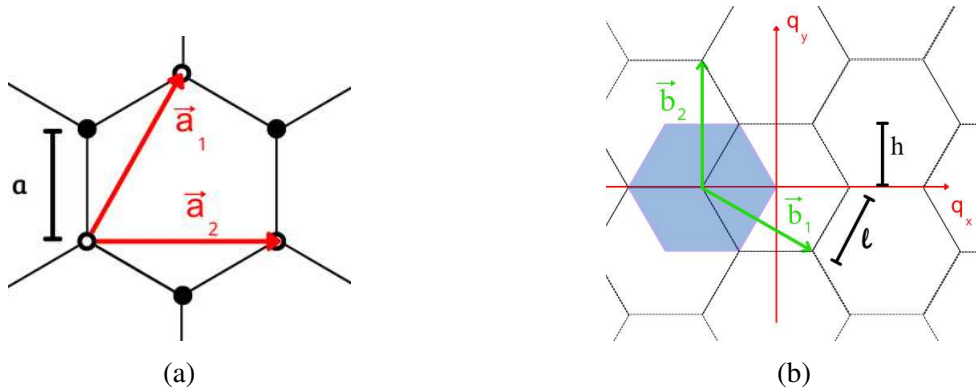


Figura 6.2: Representação das redes real e recíproca e seus vetores de base. (a) Rede real com espaçamento a . (b) Rede no espaço recíproco com espaçamento $l = \frac{4\sqrt{3}\pi}{9a}$ e $h = \frac{2\pi}{3a}$. A primeira zona de Brillouin é demarcada pela região sombreada em azul.

No espaço recíproco temos os vetores de base:

$$\vec{b}_1 = \frac{2\pi}{a} \left(\frac{\sqrt{3}}{3} \hat{i} - \frac{1}{3} \hat{j} \right); \vec{b}_2 = \frac{2\pi}{a} \frac{2}{3} \hat{j}, \quad (6.30)$$

A área total da zona de Brillouin é dada por $A_{ZB} = \frac{8\sqrt{3}}{9a^2} \pi^2$. Cada vértice do hexágono corresponde a um ponto de Dirac, totalizando dois pontos de Dirac dentro da 1ª zona de Brillouin. O espectro de energia das excitações fermiônicas no estado fundamental, no caso isotrópico, apresenta seis pontos onde a energia se anula, conforme ilustrado na figura (6.3). Esses seis pontos, conhecidos como pontos de Dirac, são dados por [68]:

$$\vec{q}_c = \pm \left(\frac{4\pi}{3\sqrt{3}a}, 0 \right), \vec{q}_c = \pm \left(\frac{2\pi}{3\sqrt{3}a}, \pm \frac{2\pi}{3a} \right). \quad (6.31)$$

No limite de baixas energias, consideramos uma expansão da matriz S_q para regiões próximas ao ponto $\vec{q}_c = \left(\frac{4\pi}{3\sqrt{3}a}, 0 \right)$, escrevendo $\vec{q} = \vec{q}_c + \vec{q}'$. Assim, temos:

$$S_{\vec{q}_c + \vec{q}'} \approx -\frac{3}{2} J_K a (q'_x + i q'_y). \quad (6.32)$$

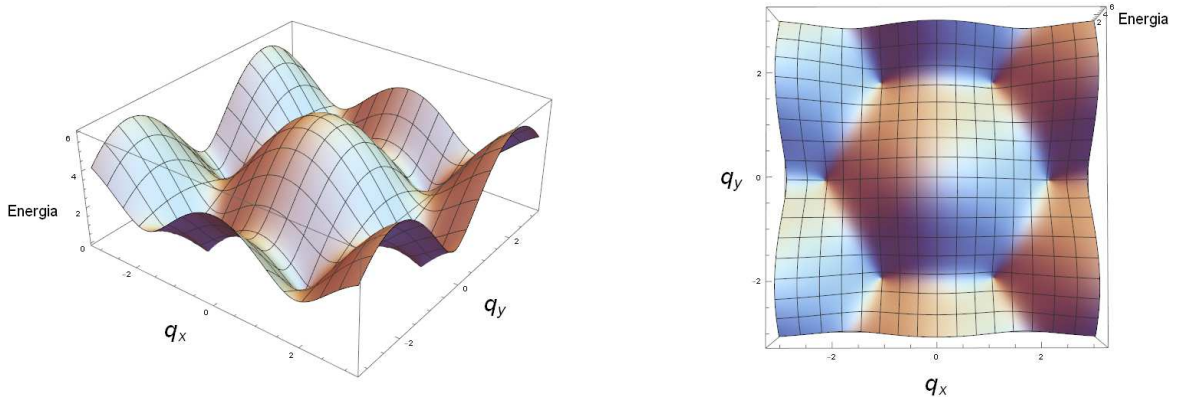


Figura 6.3: Espectro de energia das excitações para uma plaqueta na rede recíproca, em unidades de J e parâmetro de rede $a = 1$ para fins ilustrativos.

Portanto, para baixas energias, podemos aproximar a energia por uma relação de dispersão linear, dada por:

$$E_q = 2|S_q| \approx 3J_K a |q| = \hbar c |q|, \text{ com } c = \frac{3J_K a}{\hbar}. \quad (6.33)$$

A soma nos momentos da função de Green retardada, dada pela equação (5.73), é escrita, no limite contínuo, como:

$$\tilde{G}^{ret(0)}(\omega) = \frac{1}{A_{MZB}} \int_{MZB} d^2q \frac{\hbar\omega + 2S'_q + i\varepsilon}{(\hbar\omega + i\varepsilon)^2 - E_q^2}, \quad (6.34)$$

onde A_{MZB} é metade da área da primeira zona de Brillouin. Retornando à integral na equação

(6.34) e utilizando a aproximação linear da equação (6.33), obtemos:

$$\tilde{G}^{ret(0)}(\omega) = \frac{1}{A_{MZB}} \int_{MZB} d^2q \frac{\hbar\omega + i\varepsilon + 2\hbar cq_x}{(\hbar\omega + i\varepsilon)^2 - \hbar^2 c^2 q^2}. \quad (6.35)$$

O termo $q_x = q \cos \theta$ se anula após a integração em θ , ao passar para coordenadas polares. A integração é feita até um valor de corte no número de onda, $q_{\max} = Q$, que corresponde ao raio da área da zona de Brillouin integrada, conforme ilustrado na figura (6.4). A aproximação de baixas energias na função de Green exibe dependência da área considerada na zona de Brillouin, de modo que Q atua como um parâmetro variacional, representando um corte no número de onda da ordem de π/a . Definindo $\hbar\omega = \hbar cq_\omega$ e ajustando as dimensões da parte infinitesimal $\varepsilon \rightarrow \hbar c\varepsilon$, temos:

$$\tilde{G}^{ret(0)}(\omega) = \frac{4\pi}{A_{ZB}} \int_0^Q dq \frac{(q_\omega + i\varepsilon)q}{q_\omega^2 - q^2 + 2iq_\omega\varepsilon}. \quad (6.36)$$

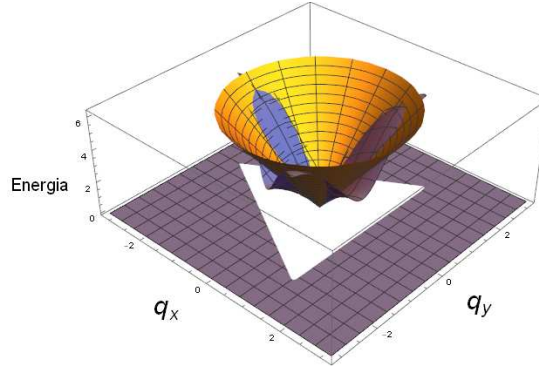


Figura 6.4: Em roxo claro, o espectro de energia das excitações próximo ao ponto de Dirac, na metade da zona de Brillouin. Em amarelo, o cone de Dirac utilizado para aproximar a energia.

Podemos simplificar o termo no denominador como:

$$\frac{1}{q_\omega^2 - q^2 + 2iq_\omega\varepsilon} = P\left(\frac{1}{q_\omega^2 - q^2}\right) - \frac{i\pi}{2q_\omega}(\delta(q_\omega - q) + \delta(q_\omega + q)). \quad (6.37)$$

Portanto, temos:

$$\begin{aligned} \tilde{G}^{ret(0)}(\omega) &= \frac{4\pi}{A_{HBZ}} \int_0^Q dq (q_\omega + i\varepsilon)q \times \\ &\times \left[P\left(\frac{1}{q_\omega^2 - q^2}\right) - i\pi(\delta(q_\omega - q) + \delta(q_\omega + q)) \right], \end{aligned} \quad (6.38)$$

que, no limite $\varepsilon \rightarrow 0$, resulta em:

$$\tilde{G}^{ret(0)}(\omega) = \frac{4\pi q_\omega}{A_{ZB}} \int_0^Q dq \left[P\left(\frac{q}{q_\omega^2 - q^2}\right) - \frac{i\pi q}{q_\omega}(\delta(q_\omega - q) + \delta(q_\omega + q)) \right]. \quad (6.39)$$

Para $q_\omega < Q$, o valor principal de Cauchy é dado por:

$$\begin{aligned} \int_0^Q dq P\left(\frac{q}{q_\omega^2 - q^2}\right) &= \int_0^{q_\omega} dq \frac{q}{q_\omega^2 - q^2} - \int_{q_\omega}^Q dq \frac{q}{q^2 - q_\omega^2}, \\ &= -\frac{1}{2} \ln \frac{Q^2 - q_\omega^2}{q_\omega^2}. \end{aligned} \quad (6.40)$$

Assim, obtemos:

$$\begin{aligned} \tilde{G}^{ret(0)}(\omega) &= -\frac{2\pi q_\omega}{\hbar c A_{ZB}} \frac{1}{2} \ln \left(\frac{Q^2 - q_\omega^2}{q_\omega^2} \right) - \frac{2i\pi^2}{\hbar c A_{ZB}} (q_\omega \theta(\omega) - q_\omega \theta(-\omega)), \\ \tilde{G}^{ret(0)}(\omega) &= -\frac{2\pi q_\omega}{\hbar c A_{ZB}} \frac{1}{2} \ln \left(\frac{Q^2 - q_\omega^2}{q_\omega^2} \right) - \frac{2i\pi^2}{\hbar c A_{ZB}} |q_\omega|. \end{aligned} \quad (6.41)$$

Note que, para um cenário típico, as energias são menores ou da ordem da diferença de energia entre os setores topológicos, ou seja, $|\hbar\omega| \lesssim \Delta_F \sim 0,26J_K \ll \hbar Qc \sim 3J_K$, justificando a aproximação $q_\omega \ll Q$. Assim, a função de Green não perturbada é dada por:

$$\tilde{G}^{ret(0)}(\omega) = -\frac{2\pi q_\omega}{\hbar c A_{ZB}} \frac{1}{2} \ln \left(\frac{Q^2}{q_\omega^2} \right) - \frac{2i\pi^2}{\hbar c A_{ZB}} |q_\omega|. \quad (6.42)$$

Definindo $\tilde{G}^{ret(0)}(\omega) = g_r(\omega) + ig_i(\omega)$, em que $g_r(\omega)$ é uma função ímpar e $g_i(\omega)$ é uma função par, podemos reescrever a função de Green retardada total, a partir da equação (5.75), como:

$$\begin{aligned} \tilde{G}^{ret}(\omega) &= \frac{g_r + ig_i}{1 + 4Jg_r + 4iJg_i}, \\ &= \frac{(g_r + ig_i)(1 + 4Jg_r - 4iJg_i)}{(1 + 4Jg_r)^2 + (4Jg_i)^2}. \end{aligned} \quad (6.43)$$

Assim, a parte imaginária da função de Green retardada é dada por:

$$\text{Im} \tilde{G}^{ret}(\omega) = \frac{g_i(\omega)}{(1 + 4Jg_r(\omega))^2 + (4Jg_i(\omega))^2}. \quad (6.44)$$

Utilizando as paridades das funções $g_r(\omega)$ e $g_i(\omega)$, temos:

$$\begin{aligned} \text{Im} \tilde{G}^{ret}(\omega) + \text{Im} \tilde{G}^{ret}(-\omega) &= \frac{g_i(\omega)}{(1 + 4Jg_r(\omega))^2 + (4Jg_i(\omega))^2} + \frac{g_i(\omega)}{(1 - 4Jg_r(\omega))^2 + (4Jg_i(\omega))^2}, \\ &= \frac{2 [1 + 16J^2(g_r^2 + g_i^2)] g_i}{[1 + 16J^2(g_r^2 + g_i^2)]^2 - (8Jg_r)^2}, \\ &= 2Z_g(\omega) \text{Im} \tilde{G}^{ret(0)}(\omega). \end{aligned} \quad (6.45)$$

Aqui, $Z_g(\omega)$ funciona como um fator de renormalização, definido por:

$$Z_g(\omega) = \frac{1 + g^2 |G^{ret(0)}(\omega)|^2}{[1 + g^2 |G^{ret(0)}(\omega)|^2]^2 - 4g^2 [\text{Re} G^{ret(0)}(\omega)]^2}. \quad (6.46)$$

Note que, no limite $g = 0$, temos $Z_g(\omega) = 1$, recuperando o resultado do caso não interagente, como mostra a figura (6.5). A função de Green pode ser reescrita, usando a equação (6.42), como:

$$\tilde{G}^{ret(0)}(\nu) \approx \frac{2\pi}{\hbar c^2 A_{ZB}} \left[2\nu \ln \left(\frac{|\nu|}{Qc} \right) - i\pi|\nu| \right]. \quad (6.47)$$

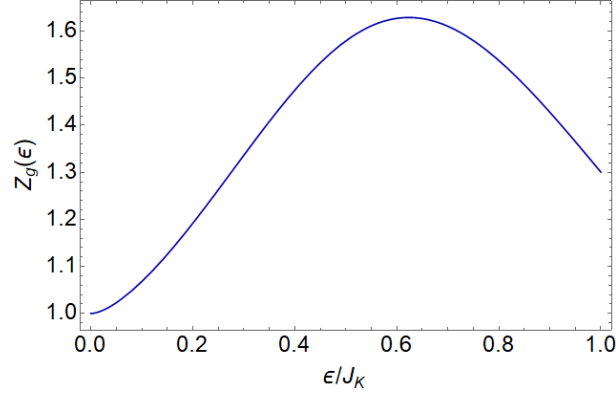


Figura 6.5: O fator de renormalização em função da energia, normalizada pela constante de troca.

O valor de Q pode ser determinado minimizando a diferença entre a função de Green aproximada e a exata. Em cenários típicos, posteriormente verificados, $|\hbar\nu| \lesssim \Delta_F \ll \hbar Qc \sim 6J_K$. Assim, o valor que fornece a melhor aproximação para os intervalos desejados é obtido com $Q = 2, 1a^{-1}$, conforme ilustrado na figura (6.6).

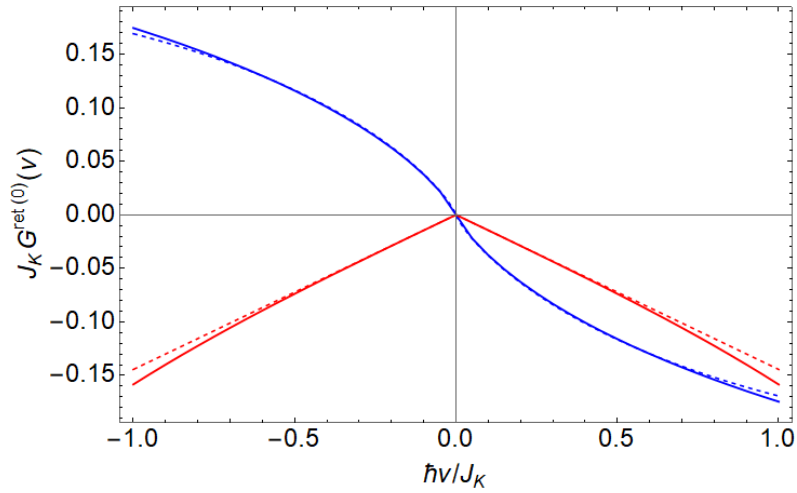


Figura 6.6: A função de Green retardada aproximada (linha tracejada) é comparada com o resultado exato (linha sólida), obtido por integração numérica. A linha azul representa a parte real de $G^{ret(0)}(\nu)$, enquanto a linha vermelha corresponde à sua parte imaginária.

Para metais normais, temos valores típicos de $a \sim 10^{-9} \text{ m}$, $E_F \sim 10 \text{ eV}$, $J_{sd} \sim 0.1 \text{ eV}$, $\rho_e = N_e/V_e \sim 10^{28} \text{ m}^{-3}$, $\rho_F/N_e \approx 2.16 \text{ eV}^{-1}$ e $K_B T_{\text{amb}} \sim 2.5 \times 10^{-2} \text{ eV}$. Além disso, o número de células unitárias pode ser expresso em termos da área da célula e da área total como $N_u = A/A_{uc} = \rho_m A$, onde definimos a densidade magnética de sítio como $\rho_m = 2\sqrt{3}/9a^2 \sim 10^{18} \text{ m}^{-2}$.

Portanto, podemos escrever a corrente de spin como:

$$\langle I_S \rangle = N_u \frac{2\sqrt{3}}{3J_K^2} \left(\frac{2\sqrt{\pi} J_{sd} \rho_F}{N_e} \right)^2 (1 - e^{-\beta\Delta\mu}) \theta(\Delta\mu - \Delta_F) \int_0^{\Delta\mu - \Delta_F} E (\Delta\mu - \Delta_F - E) Z_g(E) dE. \quad (6.48)$$

A densidade de corrente de spin $J_S = I_S/A$ e a condutância de spin $G_S = \frac{dJ_S}{d\Delta\mu}$, são fornecidas por:

$$G_S = \rho_m \left(\frac{4\pi J_{sd} \rho_F}{N_e} \right)^2 \theta(\Delta\mu - \Delta_F) \int_0^{\Delta\mu - \Delta_F} dE \left[(E - \Delta\mu + \Delta_F) \beta e^{-\beta\Delta\mu} - (1 - e^{-\beta\Delta\mu}) \right] \text{Im} [\tilde{G}^{ret}(E) + \tilde{G}^{ret}(-E)]. \quad (6.49)$$

Finalmente, a figura (6.7) apresenta a dependência da corrente de spin (por célula unitária) em função do acúmulo de potencial químico em diferentes temperaturas, comparando os resultados exatos e os obtidos pela aproximação no regime de baixa temperatura.

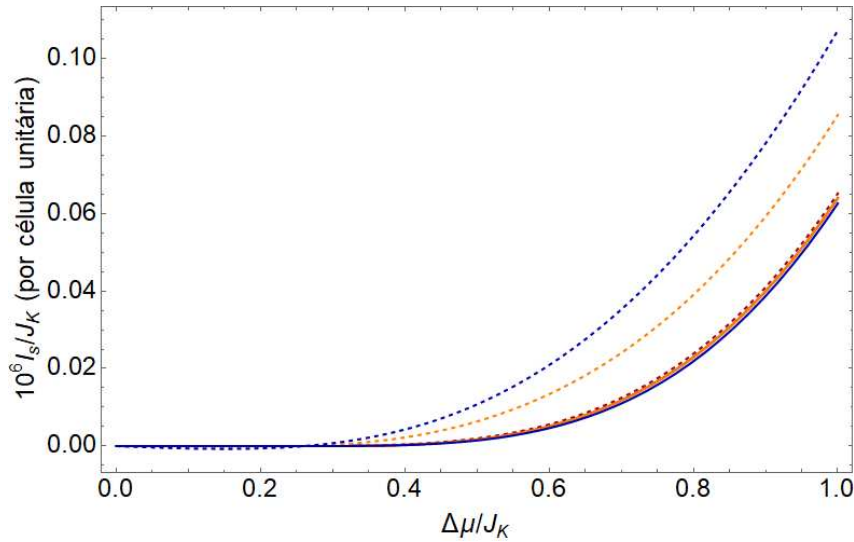


Figura 6.7: A corrente de spin por célula unitária injetada na camada de Kitaev é representada como uma função do desequilíbrio químico $\Delta\mu$. A cor das curvas indica a temperatura: o vermelho corresponde a $T = 0, 1\Delta_F/k_B$, o laranja representa $T = 0, 5\Delta_F/k_B$ e o azul indica $T = \Delta_F/k_B$. As linhas sólidas representam os resultados obtidos pela aproximação de baixa temperatura, enquanto as linhas tracejadas correspondem aos resultados exatos. Na aproximação de baixas temperaturas, a influência da temperatura sobre a corrente de spin é insignificante, com os resultados válidos para $k_B T \lesssim 0, 1\Delta_F$.

7 Resumo e conclusão

Neste trabalho, investigamos o transporte de spin em uma junção entre um metal normal e o modelo de Kitaev, comparando-o com o comportamento observado em junções ferromagnéticas usuais. Para isso, utilizamos diversos métodos da física da matéria condensada e teoria quântica de campos.

A não localidade dos férmions de Majorana e sua interação via campos de calibre \mathbb{Z}_2 [43] permitem a redução do hamiltoniano interagente a uma forma quadrática nos operadores de Majorana. As flutuações quânticas são descritas como perturbações sobre um campo de calibre estático e representadas por operadores fermiônicos. Ajustando adequadamente o campo de calibre, é possível determinar o estado fundamental, que corresponde a uma fase de líquido de spin. Além disso, o produto dos campos de calibre em uma plaqueta define os chamados fluxos, que distinguem diferentes setores topológicos separados por uma lacuna de energia.

Característico de sistemas de líquidos de spin, o modelo de Kitaev apresenta fracionalização e uma dinâmica não trivial no transporte de spin. Os férmions complexos, formados pelo acoplamento de dois férmions de Majorana, descrevem um estado de spin inteiro [62], compatível com as excitações que transportam spin, de maneira análoga aos mágnons.

Diferentemente dos sistemas ferromagnéticos, o modelo de Kitaev exibe corrente de spin mesmo a temperatura $T = 0$. Esse comportamento decorre da ausência de ordem magnética no estado de líquido de spin, resultando em uma dinâmica incomum no zero absoluto que favorece o transporte de spin mediado por férmions de Majorana.

No regime de baixas temperaturas, a corrente de spin assume valores não nulos para $\Delta\mu > \Delta_F$, devido à lacuna topológica de energia associada ao setor com dois fluxos. Esse resultado destaca a importância da topologia para o transporte de spin. À medida que a temperatura aumenta para valores próximos de $T \sim \Delta_F/k_B$, observa-se uma corrente de spin residual. Nesse regime, a corrente de spin mostra-se pouco sensível ao aumento da temperatura, apresentando resultados consistentes no limite $k_B T \lesssim 0,1\Delta_F$, conforme ilustrado na Figura (6.7). No entanto, para $k_B T$ próximo à energia da lacuna, estados excitados de outros setores topológicos, não considerados nos cálculos, tornam-se relevantes para a corrente de spin.

Por outro lado, em junções ferromagnéticas, o transporte de spin segue um comportamento ôhmico usual, com a corrente de spin sendo proporcional ao gradiente de potencial químico $\Delta\mu$. Esse contraste evidencia a natureza peculiar do modelo de Kitaev, onde o transporte de spin exibe uma resposta não linear, análoga ao funcionamento de um diodo, especialmente no regime em que a lacuna topológica é relevante.

Em síntese, os resultados deste trabalho demonstram que o modelo de Kitaev, com suas propriedades topológicas e a presença de férmions de Majorana, oferece um cenário singular para o transporte de spin. Esse modelo revela comportamentos inéditos, ausentes em sistemas ferromagnéticos convencionais. Como o transporte de spin no modelo de Kitaev pode ser não linear, surgem novas possibilidades para a manipulação de fenômenos spintrônicos em materiais com características topológicas. Além disso, o transporte a temperatura nula e a necessidade de superar a lacuna de energia entre setores topológicos para que o transporte de spin ocorra

são assinaturas características desse sistema. Portanto, a diferença no comportamento da corrente de spin constitui uma nova ferramenta para a identificação de estados de líquido de spin, corroborando propostas como as de S. Chatterjee e S. Sachdev, que sugeriram a relação entre corrente de spin e voltagem como um método para caracterizar diferentes tipos de excitações em líquidos de spin quântico [14], com resultados semelhantes para redes kagome. Um trabalho análogo foi realizado por Chui-Zhen Chen e colaboradores na detecção de spinons em isolantes Mott [15].

Apêndice

A Relação entre \tilde{F}_{ij}^{-+} e \tilde{F}_{ij}^{+-}

Iremos nesta seção do Apêndice encontrar a relação entre \tilde{F}_{ij}^{-+} e \tilde{F}_{ij}^{+-} . Pela equação (4.41), temos que $F_{ij}^{+-}(t)$ é dado por:

$$\langle \hat{A}_{ikp}^\dagger(0) \hat{A}_{ikp}(t) \rangle_0 = \frac{1}{Z_0} \text{Tr} \left(e^{-\beta K_0} e^{i\beta K_0} \tilde{A}_{ikp}(t) e^{-\beta K_0} \tilde{A}_{ikp}^\dagger(0) \right) e^{\frac{i\Delta\mu t}{\hbar}}, \quad (\text{A.1a})$$

$$= \langle \tilde{A}_{ikp}(t - \beta\hbar) \tilde{A}_{ikp}^\dagger(0) \rangle_0 e^{\frac{i\Delta\mu t}{\hbar}}. \quad (\text{A.1b})$$

Portanto a transformada de Fourier é:

$$\tilde{F}_{ii}^{+-}(\omega) = \sum_{kp} \int dt e^{i\omega t} \langle \hat{A}_{ikp}^\dagger(0) \hat{A}_{ikp}(t) \rangle_0, \quad (\text{A.2a})$$

$$\tilde{F}_{ii}^{-+}(\omega) = \sum_{kp} \int dt e^{i(\hbar\omega + \Delta\mu)t/\hbar} \langle \tilde{A}_{ikp}(t - i\beta\hbar) \tilde{A}_{ikp}^\dagger(0) \rangle_0 \quad (\text{A.2b})$$

$$\tilde{F}_{ii}^{+-}(\omega) = e^{-\beta(\hbar\omega + \Delta\mu)} \tilde{F}_{ii}^{-+}(\omega). \quad (\text{A.2c})$$

B Cálculo da susceptibilidade no FM usual

A partir da equação (6.17), aproximando a energia para $\varepsilon_q \approx 2zJS(\lambda - 1) + \frac{3JS^2}{2}a^2q^2 \equiv \kappa + \alpha q^2$, podemos escrever:

$$\frac{1}{N_u} \sum_q \varepsilon_q e^{\beta\varepsilon_q} n_q^2 \approx \int \frac{d^2q}{A_{ZB}} \varepsilon_q e^{\beta\varepsilon_q} n_q^2 \approx \frac{2\pi}{A_{ZB}} \frac{\partial}{\partial\beta} \int_0^\infty dq \frac{q}{e^{\beta(\kappa + \alpha q^2)} - 1} \quad (\text{B.1a})$$

$$= \frac{\pi}{A_{ZB}\beta\alpha} \left[\frac{1}{\beta} \ln(e^{\beta\kappa} n(\kappa)) + \kappa n(\kappa) \right] \quad (\text{B.1b})$$

$$= \frac{\pi}{A_{ZB}\beta\alpha} [\kappa(n(\kappa) + 1) + \beta^{-1} \ln(n(\kappa))]. \quad (\text{B.1c})$$

Além disso, o outro termo assume a forma:

$$\frac{1}{N_u} \sum_q \Delta\mu e^{\beta\varepsilon_q} n_q^2 = \frac{\Delta\mu}{A_{ZB}} \int_0^\infty d^2q \frac{e^{\beta\varepsilon_q}}{(e^{\beta\varepsilon_q} - 1)^2} \approx \frac{2\pi\Delta\mu}{A_{ZB}} \int_0^\infty dq \frac{q e^{\beta(\kappa + \alpha q^2)}}{(e^{\beta(\kappa + \alpha q^2)} - 1)^2}, \quad (\text{B.2a})$$

$$= \frac{\pi\Delta\mu}{A_{ZB}\alpha\beta} \frac{1}{e^{\beta\kappa} - 1} = \frac{\pi\Delta\mu}{A_{ZB}\alpha\beta} n(\kappa). \quad (\text{B.2b})$$

Note que as constantes são escritas como $\kappa = \Delta_\lambda$ e $A_{ZB}\alpha = 4\pi^2JS/\sqrt{3}$, de forma que obtemos a susceptibilidade:

$$\tilde{\chi}''(0) = -\sqrt{3}\rho_m A (\pi\rho_F)^2 \frac{\Delta\mu}{J_e 2\pi} [\Delta_\lambda (n(\Delta_\lambda) + 1) + \beta^{-1} \ln(n(\Delta_\lambda)) + \Delta_\mu n(\Delta_\lambda)]. \quad (\text{B.3})$$

Referências

- [1] **BLOG Ciência 38: Matemática - Qual é o propósito da Ciência?**. Disponível em: <https://impa.br/noticias/qual-e-o-proposito-da-ciencia/>. Acesso em: 29 dez. 2024.
- [2] ANDERSON, P. W. **More is different: Broken symmetry and the nature of the hierarchical**. Science, v. 177, n. 4047, p. 393-396, 1972.
- [3] REZENDE, S. M. **Fundamentals of Magnonics**. Cham: Springer, 2020.
- [4] KITAEV, A. **Anyons in an exactly solved model and beyond**. Annals of Physics, v. 321, n. 1, p. 2-111, 2006.
- [5] ZHOU, Y.; KANODA, K.; NG, T.-K. **Spin liquids**. Reviews of Modern Physics, v. 89, p. 025003, 2017.
- [6] SAVARY, L.; BALENTS, L. **Quantum spin liquids: a review**. Reports on Progress in Physics, v. 80, p. 016502, 2016.
- [7] HALDANE, F. D. M. **Model for a quantum Hall effect without Landau levels: Condensed-matter realization of the "parity anomaly"**. Physical Review Letters, v. 61, p. 1029, 1988.
- [8] ANDERSON, P. W. **Resonating valence bond state in La_2CuO_4 and superconductivity**. Materials Research Bulletin, v. 8, n. 2, p. 153-160, 1973.
- [9] DES CLOIZEAUX, J.; PEARSON, J. J. **Spin-wave spectrum of the antiferromagnetic linear chain**. Physical Review, v. 128, p. 2131, 1962.
- [10] KENZELMANN, M. et al. **Neutron scattering evidence for a two-dimensional quantum spin liquid in Li_2CuO_2** . Physical Review Letters, v. 90, p. 087202, 2003.
- [11] KENZELMANN, M. et al. **Quantum phase transition in a metallic spin liquid**. Physical Review Letters, v. 93, p. 017204, 2004.
- [12] DIEP, H. T. (Ed.). **Frustrated spin systems**. 2. ed. Singapore: World Scientific, 2013. Inclui referências bibliográficas e índice.
- [13] HIROBE, D. et al. **One-dimensional spinon spin currents**. Nature Physics, v. 13, p. 30, 2016.
- [14] CHATTERJEE, S.; SACHDEV, S. **Insulating magnetic and superconducting ground states of Kitaev materials**. Physical Review B, v. 92, p. 165113, 2015.
- [15] CHEN, C.-Z.; SUN, Q.-F.; WANG, F.; XIE, X. C. **Disorder and interaction effects on the topological properties of quantum spin Hall insulators**. Physical Review B, v. 88, p. 041405, 2013.

- [16] BASKARAN, G.; SEN, D.; SHANKAR, R. **Spin-S Kitaev model: Classical ground states, order from disorder, and emergent spin orders**. Physical Review B, v. 78, p. 115116, 2008.
- [17] DONG, X.-Y.; SHENG, D. N. **Quantum phase transition in Kitaev materials**. Physical Review B, v. 102, p. 121102, 2020.
- [18] XU, C. et al. **Revealing the topological magnetic excitations in Kitaev magnets**. Physical Review Letters, v. 124, p. 087205, 2020.
- [19] BRADLEY, O. et al. **Thermodynamics of the quantum spin liquid in the Kitaev model**. Physical Review E, v. 103, p. 022109, 2021.
- [20] KHAIT, I. et al. **Spin dynamics and hidden symmetry in the Kitaev-Heisenberg model**. Physical Review Research, v. 3, p. 013160, 2021.
- [21] BROHOLM, C. et al. **Quantum spin liquids**. Science, v. 367, eaay0668, 2020.
- [22] TAKAGI, H. et al. **Concept and realization of Kitaev quantum spin liquids**. Nature Reviews Physics, v. 1, p. 264, 2019.
- [23] TREBST, S.; HICKEY, C. **Kitaev materials**. Physics Reports, v. 950, p. 1, 2022.
- [24] SANDILANDS, L. J. et al. **Spin-orbit excitations in the Kitaev magnet α -RuCl₃**. Physical Review Letters, v. 114, p. 147201, 2015.
- [25] DO, S.-H. et al. **Majorana fermions in the Kitaev quantum spin liquid on a honeycomb lattice**. Nature Physics, v. 13, p. 1079, 2017.
- [26] BANERJEE, A. et al. **Proximate Kitaev quantum spin liquid behaviour in a honeycomb magnet**. Science, v. 356, p. 1055, 2017.
- [27] BANERJEE, A. et al. **Excitations in the field-induced quantum spin liquid state of α -RuCl₃**. npj Quantum Materials, v. 3, n. 79, 2018. Disponível em: <https://doi.org/10.1038/s41535-018-0079-2>.
- [28] KIM, S.; YUAN, B.; KIM, Y.-J. **Optical signatures of the Kitaev quantum spin liquid**. APL Materials, v. 10, p. 080903, 2022.
- [29] NASU, J.; YOSHITAKE, J.; MOTOME, Y. **Thermal fractionalization of quantum spins in a Kitaev model: Temperature-linear specific heat and coherent transport of Majorana fermions**. Physical Review Letters, v. 119, p. 127204, 2017.
- [30] TAKIKAWA, D.; YAMADA, M. G.; FUJIMOTO, S. **Quantum spin liquids and their instability towards spin order in Kitaev-type materials**. Physical Review B, v. 105, p. 115137, 2022.

- [31] MINAKAWA, T. et al. **Kitaev magnet under strong magnetic field: Fractionalized excitations and their field dependence**. *Physical Review Letters*, v. 125, p. 047204, 2020.
- [32] KOGA, A. et al. **Excitation dynamics in the Kitaev model under strong magnetic field**. *Journal of the Physical Society of Japan*, v. 89, p. 033701, 2020.
- [33] TAGUCHI, H.; MURAKAMI, Y.; KOGA, A. **Theoretical analysis of spin excitations in Kitaev systems**. *Physical Review B*, v. 105, p. 125137, 2022.
- [34] NASU, J.; MURAKAMI, Y.; KOGA, A. **Thermodynamic and dynamical properties of Kitaev magnets**. *Physical Review B*, v. 106, p. 024411, 2022.
- [35] ANASTASIOU, B. **Quantum Field Theory I**. Institute for Theoretical Physics, ETH Zurich, 2020.
- [36] ALTLAND, A.; SIMONS, B. **Condensed Matter Field Theory**. 2. ed. Cambridge: Cambridge University Press, 2010.
- [37] FRALEIGH, J. B. **A First Course in Abstract Algebra**. 7^a ed. Boston: Addison-Wesley, 2002.
- [38] SHANKAR, R. **Principles of Quantum Mechanics**. 2. ed. New York: Plenum Press, 1994.
- [39] PIRES, A. S. T. **Theoretical Tools for Spin Models in Magnetic Systems**. Bristol: Institute of Physics Publishing, 2021.
- [40] AUERBACH, A. **Interacting Electrons and Quantum Magnetism**. New York: Springer-Verlag, 1994.
- [41] CHALKER, J. **Lecture Notes**. University of Oxford. Disponível em: <https://www-thphys.physics.ox.ac.uk/people/JohnChalker/qtcm/lecture-notes.pdf>. Acesso em: 18 jul. 2024.
- [42] MAHAN, G. D. **Many-Particle Physics**. 3. ed. New York: Springer, 2000.
- [43] CHUA, V. K. M. **Explorations into the Role of Topology and Disorder in Some Exactly Solvable Hamiltonians**. 2013. Dissertação (Doutorado) — University of Texas at Austin, 2013.
- [44] VALENZUELA, S. O.; TINKHAM, M. **Direct detection of the spin Hall effect**. *Nature*, v. 442, p. 176, 2006.
- [45] SAITOH, E. et al. **Conversion of spin current into charge current at room temperature: Inverse spin-Hall effect**. *Applied Physics Letters*, v. 88, p. 182509, 2006.

- [46] LINDER, J.; YOKOYAMA, T.; SUDBØ, A. **Pure spin current generated by reflection at a normal metal/two-dimensional electron gas interface**. *Physical Review B*, v. 81, 2010.
- [47] HIROHATA, A.; TAKANASHI, K. **Future perspectives for spintronic devices**. *Journal of Physics D*, 2014.
- [48] TAKAHASHI, S.; MAEKAWA, S. **Spin current through a normal-metal/insulating-ferromagnet junction**. *Physical Review B*, v. 67, n. 5, p. 052409, 2003.
- [49] SLONCZEWSKI, J. C. **Current-driven excitation of magnetic multilayers**. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, v. 159, p. L1, 1996.
- [50] BERGER, L. **Emission of spin waves by a magnetic multilayer traversed by a current**. *Physical Review B*, v. 54, p. 9353, 1996.
- [51] TSERKOVNYAK, Y.; BRATAAS, A.; BAUER, G. E. W. **Enhanced Gilbert damping in thin ferromagnetic films**. *Physical Review Letters*, v. 88, p. 117601, 2002.
- [52] TSERKOVNYAK, Y.; BRATAAS, A.; BAUER, G. E. W. **Spin pumping and magnetization dynamics in metallic multilayers**. *Physical Review B*, v. 66, p. 224403, 2002.
- [53] KONDO, J. **Resistance minimum in dilute magnetic alloys**. *Progress of Theoretical Physics*, v. 32, p. 37, 1964.
- [54] KNOLLE, J. **Dynamics of a quantum spin liquid**. 2016. Tese (Doutorado em Física) – Max Planck Institute for the Physics of Complex Systems, Dresden, Alemanha, 2016.
- [55] AFTERGOOD, J.; TAKEI, S. **Probing quantum spin liquids in equilibrium using the inverse spin Hall effect**. *Physical Review Research*, v. 2, p. 033439, 2020.
- [56] AGUADO, R. **Majorana quasiparticles in condensed matter**. *La Rivista del Nuovo Cimento*, v. 40, n. 11, p. 523-593, 2017.
- [57] PACHOS, J. K. **Kitaev's honeycomb lattice model**. In: *Introduction to Topological Quantum Computation*. Cambridge University Press, p. 102-128, 2012.
- [58] CHOI, S. K.; COLDEA, R.; JEVTIC, M.; et al. **Spin Waves and Revised Crystal Structure of Honeycomb Iridate Na_2IrO_3** . *Physical Review Letters*, v. 108, n. 12, p. 127204, 2012.
- [59] SANDILANDS, L. J.; TIAN, Y.; PLUMB, K. W.; KIM, Y.-J.; BURCH, K. S. **Scattering Continuum and Possible Fractionalized Excitations in $\alpha\text{-RuCl}_3$** . *Physical Review Letters*, v. 114, p. 147201, 2015.
- [60] CHALOUPKA, J.; JACKELI, G.; KHALIULLIN, G. **Zigzag Magnetic Order in the Iridium Oxide Na_2IrO_3** . *Physical Review Letters*, v. 110, p. 097204, 2013.

- [61] YAO, H.; QI, X.-L. **Entanglement entropy and entanglement spectrum of the Kitaev model**. *Physical Review Letters*, v. 105, n. 8, p. 080501, 2010.
- [62] SHASTRY, B. S.; SEN, D. **Majorana fermion representation for an antiferromagnetic spin-chain**. *Physical Review B*, v. 55, n. 5, p. 2988–2994, 1997.
- [63] YAO, H.; ZHANG, S.-C.; KIVELSON, S. A. **Algebraic spin liquid in an exactly solvable spin model**. *Physical Review Letters*, v. 102, n. 21, p. 217202, 2009.
- [64] BASKARAN, G.; MANDAL, S.; SHANKAR, R. **Exact results for spin dynamics and fractionalization in the Kitaev model**. *Physical Review Letters*, v. 98, n. 24, p. 247201, 2007.
- [65] LIEB, E. H. **Flux phase of the half-filled band**. *Physical Review Letters*, v. 73, n. 16, p. 2158-2161, 1994.
- [66] CAUX, J.-S. **Correlation functions of integrable models: a description of the ABACUS algorithm**. *Journal of Mathematical Physics*, v. 50, n. 9, p. 095214, 2009.
- [67] VON DELFT, J.; SCHOELLER, H. **Bosonization for beginners: refermionization for experts**. *Annals of Physics*, v. 7, n. 4, p. 225–305, 1998.
- [68] PACHOS, J. K. **Kitaev’s honeycomb lattice model**. In: *Introduction to Topological Quantum Computation*. Cambridge University Press, p. 102-128, 2012.
- [69] MOURA, A. R. **Theoretical determination of Ising-type transition by using the Self-Consistent Harmonic Approximation**. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, v. 587, p. 171267, 2023.
- [70] TAKAHASHI, S.; SAITOH, E.; MAEKAWA, S. **Spin transport in layered junctions**. *Journal of Physics: Conference Series*, v. 200, p. 062030, 2010.
- [71] OKAMOTO, S. **Spin dynamics in layered magnetic structures**. *Physical Review B*, v. 93, p. 064421, 2016.
- [72] PRADA, E.; SAN-JOSE, P.; DE MOOR, M. W. A.; et al. **From Andreev to Majorana bound states in hybrid superconductor-semiconductor nanowires**. *Nature Reviews Physics*, v. 2, p. 575, 2020.