

Bryan Douglas Nunes Assunção

Invariância de escala no marcador local de Chern para isolantes topológicos de Anderson

Uberlândia, Minas Gerais, Brasil

27 de julho de 2023

Bryan Douglas Nunes Assunção

Invariância de escala no marcador local de Chern para isolantes topológicos de Anderson

Dissertação de Mestrado apresentada a Pós-Graduação em Física de Materiais da Universidade Federal de Uberlândia, como requisito parcial para obtenção do título de Mestre em Física de Materiais.

Universidade Federal de Uberlândia – UFU

Instituto de Física – INFIS

Orientador: Prof. Dr. Gerson J. Ferreira (INFIS/UFU)

Coorientador: Prof. Dr. Caio H. Lewenkopf (IF/UFF)

Uberlândia, Minas Gerais, Brasil

27 de julho de 2023

Ficha Catalográfica Online do Sistema de Bibliotecas da UFU
com dados informados pelo(a) próprio(a) autor(a).

A851 Assunção, Bryan Douglas Nunes, 1999-
2023 Invariância de escala no marcador local de Chern para
isolantes topológicos de Anderson [recurso eletrônico] /
Bryan Douglas Nunes Assunção. - 2023.

Orientador: Gerson J. Ferreira.

Coorientador: Caio Lewenkopf.

Dissertação (Mestrado) - Universidade Federal de
Uberlândia, Pós-graduação em Física.

Modo de acesso: Internet.

Disponível em: <http://doi.org/10.14393/ufu.di.2023.419>

Inclui bibliografia.

Inclui ilustrações.

1. Física. I. Ferreira, Gerson J. ,1982-, (Orient.).

II. Lewenkopf, Caio ,1963-, (Coorient.). III.

Universidade Federal de Uberlândia. Pós-graduação em
Física. IV. Título.

CDU: 53

Bibliotecários responsáveis pela estrutura de acordo com o AACR2:

Gizele Cristine Nunes do Couto - CRB6/2091

Nelson Marcos Ferreira - CRB6/3074



UNIVERSIDADE FEDERAL DE UBERLÂNDIA

Coordenação do Programa de Pós-Graduação em Física
Av. João Naves de Ávila, 2121, Bloco 1A, Sala 213 - Bairro Santa Mônica, Uberlândia-MG, CEP 38400-902
Telefone: (34) 3239-4309 - www.infis.ufu.br - cpgfisica@ufu.br



ATA DE DEFESA - PÓS-GRADUAÇÃO

Programa de Pós-Graduação em:	Física				
Defesa de:	Defesa de Dissertação de Mestrado				
Data:	Quatorze de julho de 2023	Hora de início:	15:00	Hora de encerramento:	16:20
Matrícula do Discente:	12122FIS001				
Nome do Discente:	Bryan Douglas Nunes Assunção				
Título do Trabalho:	Invariância de escala no marcador local de Chern para isolantes topológicos de Anderson				
Área de concentração:	Física				
Linha de pesquisa:	Estrutura eletrônica e simulações computacionais				
Projeto de Pesquisa de vinculação:	DINÂMICA DEPENDENTE DE SPIN EM ISOLANTES TOPOLÓGICOS (FAPEMIG/PPM)				

Reuniu-se no Anfiteatro do Bloco 1X, UFU, Campus Santa Mônica, a Banca Examinadora, designada pelo Colegiado do Programa de Pós-graduação em Física, assim composta: Professores Doutores: George Balster Martins - INFIS/UFU, Paulo Eduardo de Faria Junior - Universidade de Regensburg e Gerson Ferreira Junior - INFIS/UFU, orientador do candidato.

Iniciando os trabalhos o presidente da mesa, Dr. Gerson Ferreta Junior, apresentou a Comissão Examinadora e o candidato, agradeceu a presença do público, e concedeu ao Discente a palavra para a exposição do seu trabalho. A duração da apresentação do Discente e o tempo de arguição e resposta foram conforme as normas do Programa.

A seguir o senhor(a) presidente concedeu a palavra, pela ordem sucessivamente, aos(às) examinadores(as), que passaram a arguir o(a) candidato(a). Ultimada a arguição, que se desenvolveu dentro dos termos regimentais, a Banca, em sessão secreta, atribuiu o resultado final, considerando o(a) candidato(a):

Aprovado.

Esta defesa faz parte dos requisitos necessários à obtenção do título de Mestre.

O competente diploma será expedido após cumprimento dos demais requisitos, conforme as normas do Programa, a legislação pertinente e a regulamentação interna da UFU.

Nada mais havendo a tratar foram encerrados os trabalhos. Foi lavrada a presente ata que após lida e achada conforme foi assinada pela Banca Examinadora.



Documento assinado eletronicamente por **George Balster Martins, Professor(a) do Magistério Superior**, em 18/07/2023, às 14:56, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no art. 6º, § 1º, do [Decreto nº 8.539, de 8 de outubro de 2015](#).



Documento assinado eletronicamente por **Paulo Eduardo de Faria Junior, Usuário Externo**, em 19/07/2023, às 14:34, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no art. 6º, § 1º, do [Decreto nº 8.539, de 8 de outubro de 2015](#).



Documento assinado eletronicamente por **Gerson Ferreira Junior, Professor(a) do Magistério Superior**, em 20/07/2023, às 09:38, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no art. 6º, § 1º, do [Decreto nº 8.539, de 8 de outubro de 2015](#).



A autenticidade deste documento pode ser conferida no site https://www.sei.ufu.br/sei/controlador_externo.php?acao=documento_conferir&id_orgao_acesso_externo=0, informando o código verificador **4656254** e o código CRC **C86C0B42**.

Agradecimentos

À minha família, pelo apoio

Aos meus amigos, pelo aprendizado

Ao meu orientador Gerson J. Ferreira e coorientador Caio H. Lewenkopf, pelos ensinamentos e paciência

Ao Instituto de Física da Universidade Federal de Uberlândia

À CAPES pelo apoio financeiro

Resumo

Nesta dissertação de mestrado investigamos as transições de fase em isolantes topológicos (IT) induzidas por impurezas de Anderson. Os isolantes topológicos são materiais cristalinos que apresentam estrutura de bandas isolantes, com um *gap* de energia no nível de Fermi, mas nas bordas apresentam estados condutores hélicos robustos. A caracterização de isolantes topológicos pode ser feita analisando-se o ordenamento das bandas e/ou via invariantes topológicos. Em particular, estamos interessados no número de Chern. Diz-se que o ordenamento das bandas é topologicamente não-trivial quando o invariante de Chern é um inteiro finito, e trivial quando é zero. A transição entre estes dois regimes se dá via inversões no ordenamento das bandas próximas ao nível de Fermi. Tal inversão, pode ocorrer devido ao acoplamento spin-órbita, pode ser induzida por campos elétricos, etc. Porém, nesta dissertação estamos interessados na transição topológica induzida pelas impurezas de Anderson, que dão origem à fase de isolantes topológicos de Anderson (TAI, do inglês *topological Anderson insulators*). As impurezas de Anderson quebram a simetria translacional do cristal e nos impede de usar o número de Chern, que é definido no espaço de quasi-momento explorando-se a invariância translacional dos cristais. Aqui revisamos e utilizamos o *marcador local de Chern*, que corresponde a uma representação do número de Chern no espaço de coordenadas. Porém, diferente do número de Chern, o marcador local evolui suavemente de zero até um número inteiro finito ao longo da transição de fase. Esta característica nos permite procurar curvas universais e invariância de escala no marcador local como função da intensidade das impurezas W e do tamanho do sistema $L \times L$. Em nossos resultados, mostramos que o marcador de Chern obedece a lei de escala $\mathcal{C}_0(W, L) \equiv \mathcal{C}_0([W - W_c] \cdot L^{1/\mu})$, sendo W_c o ponto fixo e μ o expoente crítico. Para isolantes topológicos descritos pelo modelo BHZ, encontramos $\mu \approx 2$. Adicionalmente, investigamos outras características dos TAIs em suas diversas fases: condutância, densidade de estados local, e funções de onda. Traçamos também diagramas de fase como função da massa M do modelo BHZ e da intensidade de impurezas W , verificando a existência de quatro fases: trivial, IT, TAI e localização de Anderson trivial. Utilizamos o pacote python Kwant para montar o Hamiltoniano e calcular a condutância, funções de onda e densidade de estados locais. Para o cálculo do marcador local de Chern, implementamos uma aproximação descrita pelo *Kernel Polynomial Method*. Todas as quantidades que dependem das impurezas de Anderson são calculadas via médias em um ensemble de amostras aleatórias.

Palavras-Chaves: Isolantes Topológicos, Desordem de Anderson, Expoentes críticos, Transição de Fase, Marcador de Chern Local.

Abstract

In this Master Dissertation, we investigate the phase transitions induced by Anderson's impurities in topological insulators. Topological insulators are crystals with an insulating band structure, that is, with a gap at the Fermi energy, but with helical conducting states at the edges. The topological insulators are characterized via their band ordering and topological invariants. Particularly, we are interested in the Chern number. One calls the band ordering as topologically non-trivial whenever the Chern number is a finite integer, and trivial if it is zero. The transition between these regimes occurs via band inversions near the Fermi level. This inversion may be induced by spin-orbit coupling, electric fields, etc. Here we are interested in the transitions induced by Anderson's impurities, a mechanism that leads to topological Anderson insulators (TAI). These impurities break the translational symmetry of the crystal and do not allow for a characterization in terms of the Chern number, which is defined in the quasimomentum space exploring the translational invariance. Therefore, here we review and the *local Chern marker*, which corresponds to a representation of the Chern number in coordinates space. Interestingly, while the Chern number is always an integer, the local marker goes smoothly from zero to integer values throughout the phase transition. This feature allow us to search for universal functions and scaling invariance of the local marker as a function of the impurity strength W and system size $L \times L$. Our results show that the local Chern marker scales as $\mathcal{C}_0 \equiv \mathcal{C}_0([W - W_c] \cdot L^{1/\mu})$, where W_c is the fix point and μ is the critical exponent. For topological insulators defined by the BHZ model, we find $\mu \approx 2$. Additionally, we investigate other characteristics of TAIs for its different phases: conductance, local density of states, and wave-functions. We have calculated its phase diagram as a function of the the BHZ mass M and impurity strength W to identify four phases: trivial, TI, TAI, and trivial Anderson localization. We use the kwant python package to build the Hamiltonian and calculate the conductance, wave functions, and local density of states. For the local Chern number, we have implemented an approximation via the *Kernel Polynomial Method*. All quantities that depend upon disorder are obtained as averages over an ensemble of random samples.

Keywords: Topological Insulators, Anderson Disorder, Critical Exponents, Phase Transition, Local Chern Marker.

Sumário

1	INTRODUÇÃO	9
1.1	Isolantes Topológicos	9
1.1.1	Efeito Hall quântico de spin	10
1.1.2	O modelo BHZ	11
1.1.3	Invariante topológico: o número de Chern	13
1.2	Desordem e localização de Anderson	15
1.2.1	Isolantes topológicos de Anderson	17
1.2.2	Invariante topológico: o marcador local de Chern	19
1.3	Transições de fase e expoentes críticos	21
1.3.1	Marcador local de Chern como parâmetro de ordem	23
1.4	Organização do texto	25
2	MÉTODOS	27
2.1	Modelo BHZ	27
2.2	Pacote python: kwant	28
2.3	Marcador local de Chern	33
2.3.1	Implementação via força-bruta: mapa (x,y) completo	36
2.3.2	Implementação via aproximação KPM: para apenas uma cela unitária	36
2.4	Otimizando parâmetros críticos	39
3	RESULTADOS	41
3.1	Condutância no regime TAI	41
3.2	Estados hélicos	42
3.3	Marcador de Chern local	43
3.3.1	Renormalização do marcador de Chern local	44
3.3.2	Valor esperado para o expoente crítico	46
3.4	Diagrama de fases	47
3.5	Marcador local de Chern: problemas na mudança de domínio	49
4	CONCLUSÕES	51
	APÊNDICES	53
	APÊNDICE A – RENORMALIZAÇÃO DA MASSA DEVIDO À DESORDEM: SELF-ENERGY	55

APÊNDICE B – ELEMENTO DE MATRIZ DO OPERADOR PO- SIÇÃO	57
REFERÊNCIAS	59

1 Introdução

1.1 Isolantes Topológicos

Podemos constatar em nosso cotidiano que o uso da tecnologia está cada vez mais presente em tarefas diversas que executamos, tornando estas mais simples e eficientes de serem realizadas. Devido a isso, a nossa procura por comodidades e a necessidade de eficiência, criamos demandas por novas tecnologias de todos tipos para finalidades gerais, supridas por pesquisas de diversas áreas, em vários lugares do mundo. No entanto, há uma necessidade bastante urgente que se destaca, o melhor uso dos nossos recursos, como os recursos energéticos exigidos para estas aplicações tecnológicas e demais usos, que vem sendo cada vez maior (KIM; CHO, 2019). Tal impacto nos leva como pesquisadores a procurar alternativas tecnológicas, não somente práticas para suas finalidades, mas com eficiência energética. Assim, a spintrônica, ramo que explora os graus de liberdade referentes ao momento angular intrínseco (spin) dos elétrons, se apresenta como uma alternativa computacional promissora para estas demandas, pois os componentes spintrônicos performam em altas velocidades e tem mais eficiência energética do que os eletrônicos usuais (LIN et al., 2019). A propagação de estados em dispositivos da spintrônica podem ser ainda mais eficientes ao se utilizar os isolantes topológicos, já que estes possuem estados hélicos protegidos topologicamente contra retro-espalhamento (QI; ZHANG, 2011), enquanto que no seu interior (em inglês, *bulk*) este é isolante. Estados hélicos são caracterizados por percorrem as bordas do sistema em sentidos contrários para diferentes orientações de spin, como visto na Fig. 1. Suas características permitem gerar, acumular (FAN; WANG, 2016) e filtrar (WU; LIU; LIU, 2014) correntes de spin de forma eficiente, devido a sua eficiente conversão carga-spin, que permitem manipulações em sistemas magnéticos adjacentes (HE; SUN; HE, 2019). Adicionalmente, dispositivos spintrônicos baseados em isolantes topológicos desfrutam de vantagens em novas aplicações de dispositivos computacionais, transistores, baterias, detectores, sensores de memória (HE; SUN; HE, 2019; MAZUMDER; SHIRAGE, 2021; BREUNIG; ANDO, 2021).

A presença ou não destes estados de borda é determinada pela topologia do sistema. Em uma linguagem matemática a topologia agrupa objetos em classes que não se alteram por deformações suaves. Na topologia geométrica, estas deformações correspondem de fato a deformações na forma de objetos, e são caracterizadas pela curvatura de Gauss. Já na física do estado sólido, estas deformações se referem a perturbações no Hamiltoniano que podem afetar a curvatura de Berry, que será definida ao longo desta introdução. Veremos, que esta curvatura está diretamente ligada ao ordenamento das bandas dos materiais. A integral da curvatura de Berry na zona de Brillouin define invariantes topológicos, que

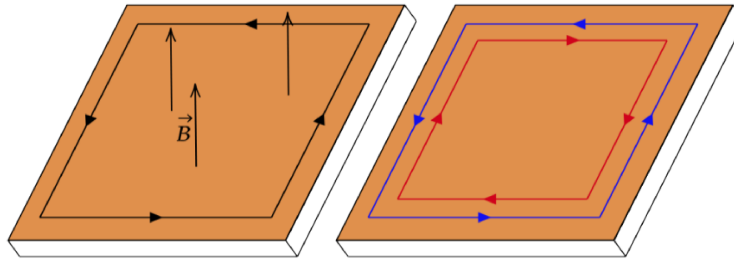


Figura 1 – Estados de borda para o efeito Hall quântico (esquerda) e efeito Hall quântico de spin (direita). No efeito Hall quântico, a força de Lorentz devido ao campo magnético \mathbf{B} induz todos os elétrons a um movimento quiral. Já no efeito Hall de spin, o acoplamento spin-órbita atua efetivamente como um campo magnético cujo sinal depende do spin, assim o movimento induzido é hélico: spins opostos contornam o material em sentidos opostos.

caracterizam os materiais como topologicamente não triviais, o que implica na presença de estados de borda, ou triviais, quando não possuem tais estados.

O surgimento de estados de borda se deve a uma noção de continuidade. Considerando-se a interface de dois materiais com ordenamentos de bandas opostos, e supondo-se que próximo a esta interface há uma mistura das propriedades dos materiais (efeito de proximidade), espera-se que na interface haja um ponto de cruzamento de bandas, ou seja, espera-se estados condutores nas bordas destes isolantes topológicos. De fato, essa é uma das características marcantes dos isolantes topológicos, juntamente com a proteção contra retroespalhamento em relação a impurezas fracas e não magnéticas. Essa proteção pode ser compreendida pelo fato de que para um estado propagando-se nas bordas sofrer reflexão, seu spin também deve se inverter, devido a estrutura de bandas hélica dos estados de borda. No entanto, essa interação requer um caso especial de impurezas magnéticas. Assim, espera-se que estes estados de borda hélicos sejam robustos e de grande interesse para aplicações na área de spintrônica (KONIG et al., 2007; BENDIAS et al., 2018; LUNCZER et al., 2019).

Outra propriedade presente nestes materiais em sistemas 2D é que estes estados possuem condutância quantizada, pois seus estados de borda são unidimensionais e não há retroespalhamento. De fato, esta característica é o grande marco já do primeiro sistema topologicamente não trivial, o do efeito Hall quântico inteiro.

1.1.1 Efeito Hall quântico de spin

O primeiro sistema topológico em semicondutores foi observado em 1980 por Klaus von Klitzing e colaboradores (KLITZING; DORDA; PEPPER, 1980) no que ficou conhecido como efeito Hall quântico inteiro. Sendo semelhante ao efeito Hall clássico, este consiste de um gás de elétrons bidimensional submetido a campo magnético transversal intenso e um campo elétrico no plano (no regime de resposta linear). No regime de baixas

temperaturas, em torno de $4K$ a $15K$ (THOULESS et al., 1982), eliminam influências termodinâmicas neste fenômeno quântico, o que resulta em uma condutância discretizada $\sigma_{xy} = Ne^2/\hbar$, tal que transporte ocorre apenas em suas bordas, sendo N um número inteiro (LAUGHLIN, 1981). Esta discretização está relacionada diretamente com a topologia do sistema, e N pode ser entendido como um invariante topológico. Esta interpretação em termos de conceitos de topologia foi desenvolvida por Thouless, Kohmoto, Nightingale e den Nigs (TKNN) no trabalho (THOULESS et al., 1982). Na procura por outros sistemas com tais características, C. Kane e G. Mele (KANE; MELE, 2005c), Bernevig, Hughes e Zhang (BERNEVIG; ZHANG, 2006), inspirados no modelo de Haldane (HALDANE, 1988) propuseram modelos sem o uso dos fortes campos magnéticos, que evitam a quebra de simetria de reversão temporal, onde o acoplamento spin-órbita faz o papel de um campo magnético dependente de spin. Estes foram os primeiros isolantes topológicos propostos teoricamente.

Os termos spin-órbita surgem na quântica através equação de Dirac (DIRAC, 1928; SAKURAI, 1994), que estende a equação de Schrödinger para o limite relativístico. Considerando-se o limite de baixas energias da equação de Dirac, recupera-se a equação de Schrödinger com correções finas, dentre elas, o acoplamento spin-órbita. Para sistemas topológicos o acoplamento spin-órbita funciona como o campo magnético no efeito Hall quântico, sendo este o responsável pelas inversões de bandas, que os tornam topologicamente não triviais. Usando o teorema de Kramers (KLEIN, 1952) e a conservação de reversão temporal pode-se verificar que estes estados são spin polarizados.

Em 2007, foi realizado experimentalmente o primeiro isolante topológico 2D (KONIG et al., 2007), usando poços quânticos de HgTe/CdTe (BERNEVIG; HUGHES; ZHANG, 2006). Outros sistemas topológicos foram propostos posteriormente, com outras simetrias protegendo estados topológicos, como os isolantes topológicos cristalinos que são protegidos por uma simetria da rede (TEO; FU; KANE, 2008), os isolantes topológicos tridimensionais (FU; KANE, 2007a; ZHANG et al., 2009) com estados de superfície, isolantes topológicos de alta ordem com estados de quinas ou arestas (SCHINDLER et al., 2018).

1.1.2 O modelo BHZ

A sigla que dá o nome ao modelo BHZ é derivada das iniciais de seus autores, Bernevig, Hughes e Zhang (BERNEVIG; ZHANG, 2006). Uma vez que o modelo de Haldane (HALDANE, 1988) trata de elétrons sem spin e não possui realização física em materiais, e o acoplamento spin-órbita no grafeno é muito pequeno para realizar-se o modelo Kane-Mele (KANE; MELE, 2005c), os autores do modelo BHZ identificaram um caso concreto de um material real que fosse um isolante topológico. Estes autores consideraram uma heteroestrutura formada pelos os materiais HgTe e CdTe, que compartilham de uma mesma estrutura cristalina tipo Zinblende, Fig. 2. Nesta heteroestrutura, os elétrons são

confinados no poço central de largura d , composto por HgTe entre barreiras de $\text{Cd}_{1-x}\text{Hg}_x\text{Te}$ (tipicamente com concentração $x \approx 0.3$). Esta configuração é interessante, pois nota-se que as estruturas de bandas dos cristais de HgTe e $\text{Cd}_{1-x}\text{Hg}_x\text{Te}$ possuem ordenamentos diferentes, Fig. 2. Enquanto $\text{Cd}_{1-x}\text{Hg}_x\text{Te}$ exibe um ordenamento normal, com a banda de condução tipo S (irrep Γ_6) e a de valência tipo P (irrep Γ_8), no HgTe as correções relativísticas da estrutura fina (principalmente o termo de Darwin) induzem uma inversão, tal que a banda de condução do HgTe é tipo P e a de valência é tipo S.

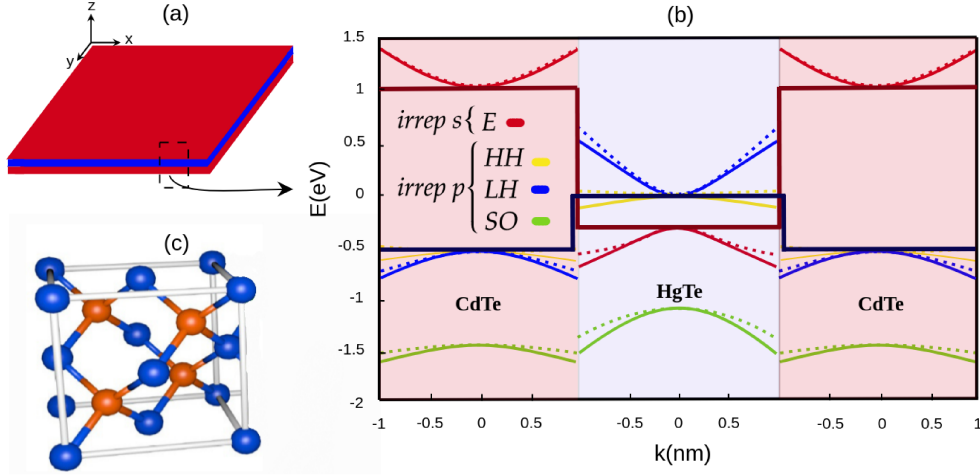


Figura 2 – (a) Representação da heteroestrutura do poço quântico de HgTe/CdTe com o confinamento na direção z ; (b) Representação das estruturas de bandas intercaladas do CdTe e do HgTe. A região em vermelho corresponde a estrutura de bandas do CdTe, levando em conta a primeira banda de condução do tipo S (representação irredutível do tipo Γ_6) e as três últimas de valência do tipo P (representação irredutível do tipo Γ_8). A região em azul corresponde a estrutura de bandas do HgTe com as mesmas bandas, porém, sua banda de condução é do tipo P e sua banda S é uma banda de valência. Vale ressaltar que esta é uma imagem com a finalidade de ilustrar o poço quântico formado entre as bandas E e o poço entre as bandas LH, não levando em conta a concentração $1 - x$ de HgTe nas bandas de CdTe; (c) Célula unitária da uma estrutura cristalina do tipo Zinblende.

O Hamiltoniano BHZ descreve a dinâmica bidimensional (2D) dos elétrons confinados no poço de HgTe. Para obter este modelo, projeta-se o Hamiltoniano 3D de Kane (WINKLER, 2003) na base dos autoestados fundamentais do poço de HgTe, Fig. 3. Devido à inversão de bandas na região do HgTe, o estado fundamental do poço de elétrons, $|E_1\rangle$, está próximo em energia do estado de buracos, $|H_1\rangle$. A largura do poço tem um papel importante, pois o ordenamento energético destes estados se inverte como função da largura d do poço de HgTe (BERNEVIG; HUGHES; ZHANG, 2006). O regime topológico surge para poços de largura $d \gtrsim 6.7$ nm, tal que o estado $|H_1\rangle$ torna-se mais energético que o $|E_1\rangle$. No modelo BHZ, a diferença de energia entre estes estados é chamada de massa $M = E_1 - H_1$, sendo E_1 e H_1 as energias dos estados $|E_1\rangle$ e $|H_1\rangle$, respectivamente. Assim, o regime topológico ocorre quando a massa $M < 0$. Denomina-se este parâmetro M como

massa, pois este entra no Hamiltoniano de forma análoga ao termo mc^2 no Hamiltoniano relativístico de Dirac, como veremos a seguir.

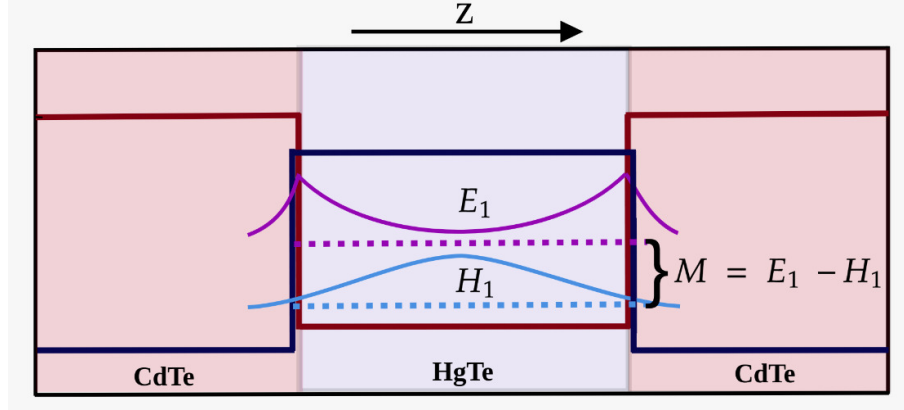


Figura 3 – Representação dos módulos das bandas E_1 e H_1 confinadas na direção z devido a diferença no ordenamento de bandas na heteroestrutura HgTe/CdTe. O parâmetro de massa M é diferença entre estas energias.

Como mencionamos acima, o modelo BHZ pode ser obtido a partir do Hamiltoniano 3D de Kane (WINKLER, 2003), utilizando-se a teoria de perturbações de Löwdin para projetar o sistema na base $\{|E_1, s_z\rangle, |H_1, s_z\rangle\}$, onde $s_z = \{\uparrow, \downarrow\}$ representa a componente majoritária de spin em cada autoestado. Esta demonstração pode ser vista na referência (CANDIDO, 2013; ZANON, 2021). O hamiltoniano do BHZ é escrito como

$$H_{\text{BHZ}} = \begin{pmatrix} H_{\uparrow} & 0 \\ 0 & H_{\downarrow} \end{pmatrix} \quad (1.1)$$

$$H_{\uparrow} = A(k_x \sigma_x - k_y \sigma_y) + (M + Bk^2)\sigma_z + (Dk^2 + C)\sigma_0, \quad (1.2)$$

sendo H_{s_z} o bloco referente à componente majoritária s_z , e $H_{\downarrow} = H_{\uparrow}^*$. Aqui $\sigma = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$ são as matrizes de Pauli atuando nas sub-bandas $\{|E_1, s_z\rangle, |H_1, s_z\rangle\}$. Em $\mathbf{k} = 0$, os autoestados de H_{\uparrow} têm energias $\pm M$, tal que o sistema é isolante com gap $2|M|$. Porém, para um sistema finito surgem estados de borda quando $M < 0$. Isto pode ser visto na estrutura de bandas de H_{\uparrow} para $M > 0$ e $M < 0$, que estão ilustradas na Fig. 4. Nota-se que para massa $M < 0$ surgem estados com dispersão linear na região do gap do cristal infinito.

1.1.3 Invariante topológico: o número de Chern

Como vimos acima, o regime topologicamente não-trivial e os estados de borda hélicos surgem no modelo BHZ quando a massa $M < 0$. Porém, só conseguimos fazer esta identificação direta quando diagonalizamos o Hamiltoniano para sistemas finitos, pois no sistema infinito as bandas sempre apresentam um gap $2|M|$. Para caracterizar a topologia do modelo para o cristal infinito, sem precisar resolver o sistema confinado, utilizamos os invariantes topológicos. Aqui, estamos particularmente interessados no número de Chern C .

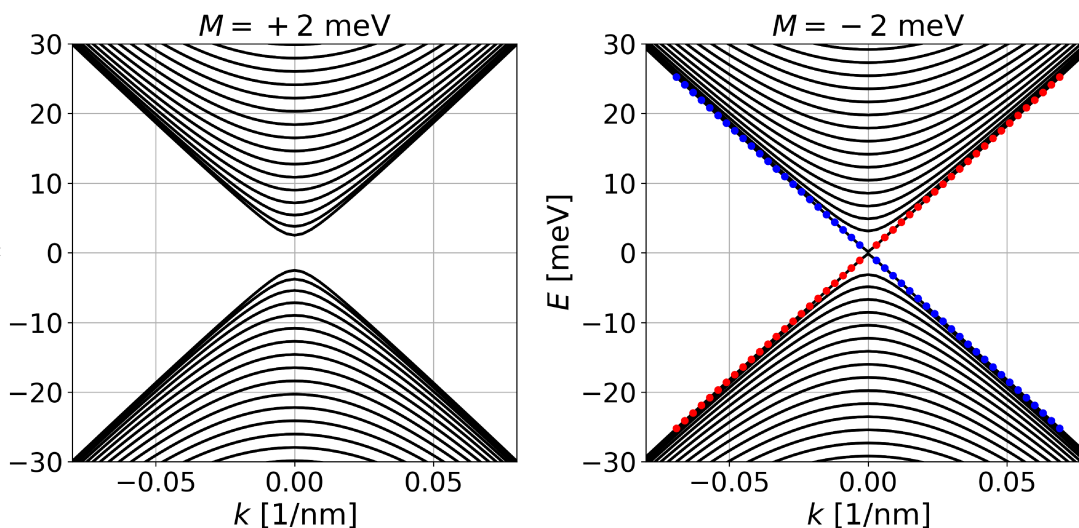


Figura 4 – Estrutura de bandas para o sistema BHZ de tamanho $L_y = 600$ nm, parâmetro de rede $a = 3$ nm, expresso no limite trivial ($M > 0$) a esquerda e no limite não-trivial ($M < 0$) a direita. No caso não-trivial foram destacadas as bandas cujos estados se propagam nas bordas, com o sinal de spin negativo na cor azul e o com spin positivo na cor vermelha.

Além deste, existem outros invariantes topológicos (TEO; FU; KANE, 2008), e a escolha do invariante apropriado depende da classe de simetria do sistema. Por exemplo, quando o hamiltoniano do sistema se divide em blocos de spins distintos $\{\uparrow, \downarrow\}$, que é o caso do modelo descrito neste trabalho, utiliza-se o número de Chern de spin $C_{spin} = (C_{\uparrow} - C_{\downarrow})/2$ (KAUFMANN; LI; WEHEFRITZ-KAUFMANN, 2016). Porém, quando os blocos estão acoplados, devemos usar o invariante \mathbb{Z}_2 (KANE; MELE, 2005a; KANE; MELE, 2005b; FU; KANE, 2007b; FU; KANE, 2006; WANG; QI; ZHANG, 2010).

Na física, o número de Chern foi introduzido pela primeira vez na interpretação topológica do efeito Hall quântico inteiro (IQHE). Neste, (THOULESS et al., 1982) mostraram que a condutividade transversal do IQHE é quantizada em múltiplos inteiros n de e^2/h . O cálculo da condutividade pode ser feito no sistema infinito via fórmula de Kubo (DATTA, 1995) ou para um sistema finito via método de Landauer-Buttiker (DATTA, 1995). No primeiro caso, o inteiro n representa o número de níveis de Landau ocupados. Já no segundo caso o número n é o número de estados de borda conduzindo corrente. A conexão entre estes dois casos é dada pela interpretação topológica do IQHE, onde n é a soma dos números de Chern, cujo valor é 1 para cada nível de Landau ocupado, e a existência de estados de borda é garantida pela correspondência volume-fronteira (QI; ZHANG, 2011).

A condutividade transversal do IQHE em termos do número de Chern é (HATSU-

(GAI, 1993; SYED, 2014)

$$\sigma_{xy} = \frac{e^2}{h} C, \quad (1.3)$$

$$C = \frac{1}{2\pi} \sum_n^{\text{oc.}} \int_{\text{ZB}} \Omega_n(\mathbf{k}) d^2k, \quad (1.4)$$

$$\Omega_n(\mathbf{k}) = -2 \text{Im} \langle \partial_{k_x} u_{n,\mathbf{k}} | \partial_{k_y} u_{n,\mathbf{k}} \rangle, \quad (1.5)$$

onde C é o número de Chern, $u_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ é a parte periódica da função de Bloch $\psi(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} u_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r})$, e $\Omega_n(\mathbf{k})$ é a componente z da curvatura de Berry. Na referência (FÜNFHAUS; KOPP; LETTL, 2022), pode ser vista a demonstração de que o C é um número inteiro. Aqui, ilustramos apenas sua correspondência com a curvatura de Gauss da topologia geométrica, onde expressa-se a característica de Euler $\chi(M)$ na forma do teorema de Gauss-Bonnet,

$$\chi(M) = \frac{1}{2\pi} \int_M K dA + \frac{1}{2\pi} \int_{\delta M} k_g ds. \quad (1.6)$$

Aqui, K é a curvatura de Gauss referente à variedade geométrica M . A primeira integral corre sobre a superfície M , e a segunda sobre a fronteira δM , sendo que k_g é a curvatura geodésica da fronteira. A característica de Euler $\chi(M) = 2 - 2g$ é um invariante topológico que mede o genus g da superfície (número de buracos). No caso do Chern number acima, a variedade é a zona de Brillouin 2D (ZB), que pode ser entendida como um torus, devido à sua periodicidade, e portanto não possui fronteira. Assim, nota-se que a curvatura de Berry é análoga à curvatura de Gauss, e o número de Chern é análogo à característica de Euler. Uma discussão mais formal desta analogia pode ser vista na referência (YANG et al., 2019; RYDER, 1991).

Como o número de Chern C acima requer uma integral no espaço \mathbf{k} , só está bem definido para sistemas que possuem simetria de invariância translacional. Porém, aqui estamos interessados nos efeitos de impurezas de Anderson, que violam esta simetria. Assim, é necessário encontrar outro invariante que possa determinar a fase topológica do sistema.

1.2 Desordem e localização de Anderson

Philip Warren Anderson em seu famoso artigo intitulado *Absence of diffusion in certain random lattices* (ANDERSON, 1958), demonstrou matematicamente o surgimento de estados localizados devido a significativas flutuações energéticas locais, resultantes de defeitos por construção ou de impurezas em uma estrutura cristalina. Tal fenômeno ficou conhecido como localização de Anderson.

No regime de desordem forte, não somente a localização é afetada, mas também outras propriedades físicas associadas diretamente a esta, como a condutividade, os níveis

de energia e outras propriedades indiretas, que também podem ser exploradas de outras formas, como por exemplo, a obtenção de transições metal-isolante (MOTT, 1968).

A localização de Anderson pode ser investigada de diversas maneiras, como por exemplo, usando matriz transferência, diagonalização exata do sistema, propagação temporal de pacotes de onda. Uma revisão recente do assunto pode ser vista na referência (GUAN; GUAN, 2019). Para ilustrar os efeitos da desordem de Anderson, consideramos aqui um gás de elétrons bidimensional dado pelo Hamiltoniano

$$H = \sum_i V_i c_i^\dagger c_i - t \sum_{\langle i,j \rangle} (c_i^\dagger c_j + \text{h.c.}), \quad (1.7)$$

onde i representam os estados $|i\rangle$ localizados nos sítios de uma rede quadrada 2D, t é o termo de *hopping* entre primeiros vizinhos $\langle i,j \rangle$, e V_i é o potencial da desordem local de Anderson. Aqui vamos considerar que V_i tem valores aleatórios distribuídos homogeneamente no intervalo $-W < V_i < W$ em cada sítio i .

Para o hamiltoniano 1.7, calculamos a densidade de estados (DOS em função da energia para intensidade da desordem $W = 0$ e $W \neq 0$, Fig. 5. Na ausência de desordem, vemos que a DOS é aproximadamente constante próxima dos extremos de energia, e apresenta uma singularidade de van Hove na energia $E = 0$. Já para desordem $W \neq 0$, observamos que a tanto a singularidade quando a DOS próxima aos extremos de energia são suavizadas. Em particular, os estados que agora aparecem nos extremos suavizados são localizados. Para verificar esta afirmação, podemos olhar para a razão de participação a seguir.

O inverso da razão de participação R_n^{-1} de um estado $|\psi_n\rangle = \sum_i a_{ni} |i\rangle$ é definido por

$$R_n^{-1} = \sum_i |a_{ni}|^4. \quad (1.8)$$

Para um estado maximamente localizado no sítio i_0 , a função de onda é dada por apenas uma componente finita $a_{ni} = \delta_{i,i_0}$, o que implica em $R = 1$. Já para um estado maximamente estendido, os sítios tenderam a ser igualmente ocupados, o que implica em todos com $a_{ni} = 1/\sqrt{N}$. Assim, $R_n = N \gg 1$. Logo, um sistema é caracterizado como localizado quando o valor do raio de participação é próximo de 1 e estendido quando se aproxima de N . De fato vemos esta característica nos estados próximos dos extremos de energia na Fig. 5. Outra forma de se observar a localização dos estados no regime de localização de Anderson é plotar o quadrado da função de onda, como feito na Fig. 6.

Para uma configuração de desordem forte o suficiente, até sistemas topológicos podem se tornar isolantes triviais com estados localizados. Mas de maneira contraintuitiva, a adição de desordem moderada pode fazer o contrário: verificou-se em (LI et al., 2009) que a desordem pode induzir uma transição de isolante trivial para topológico, como veremos a seguir.

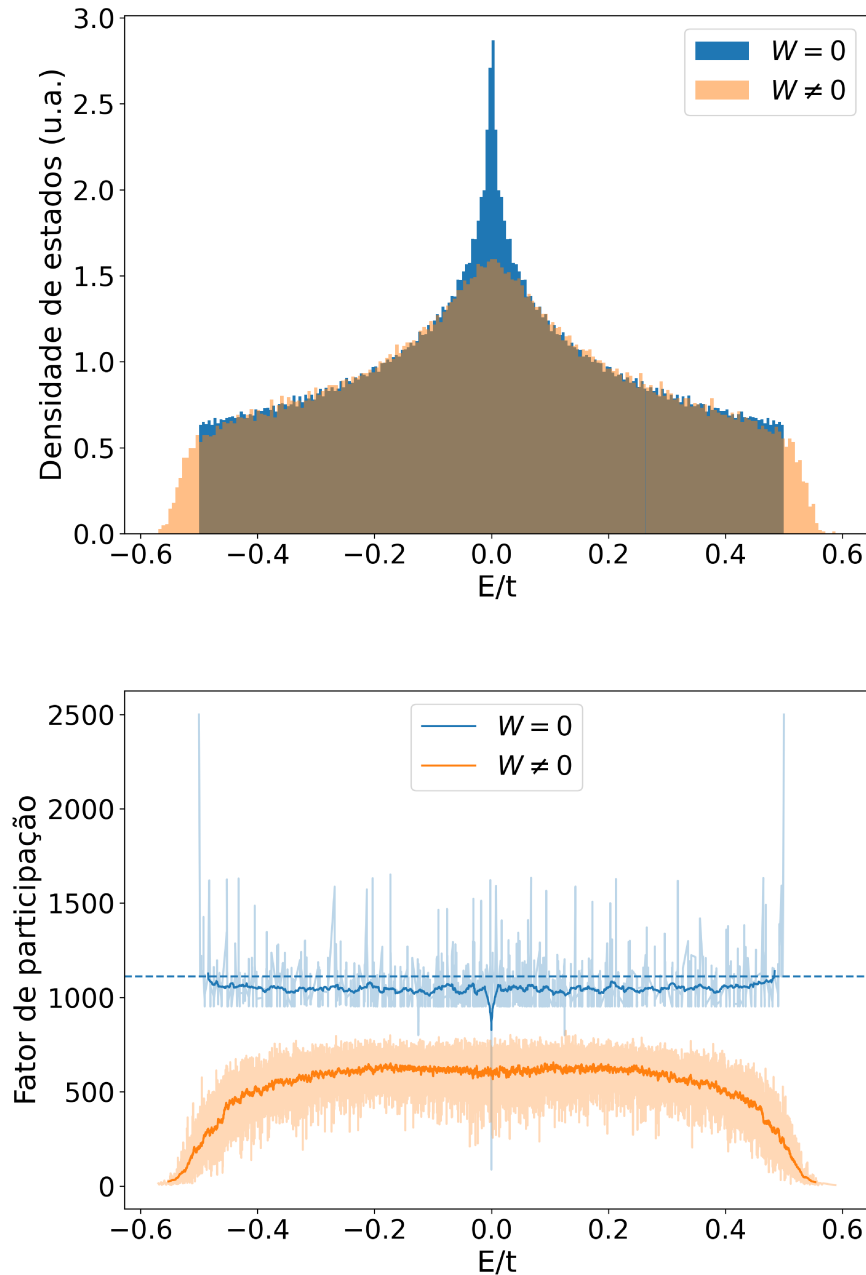


Figura 5 – Densidade de estados e fator de participação para o sistema limpo de impurezas (azul) e no regime de localização de Anderson (laranja), com $W = 0.1t$. A região saturada no gráfico do fator de participação, corresponde a media móvel.

1.2.1 Isolantes topológicos de Anderson

Como descrito na seção anterior, a introdução de desordem do tipo Anderson em um sistema condutor, pode causar a localização dos seus estados, o que o torna um isolante trivial. Tal comportamento ocorre até mesmo para isolantes topológicos para intensidade de desordem suficientemente grande, o que implica na quebra da proteção dos estados de borda. Porém, para uma certa configuração de parâmetros de sistemas topológicos,

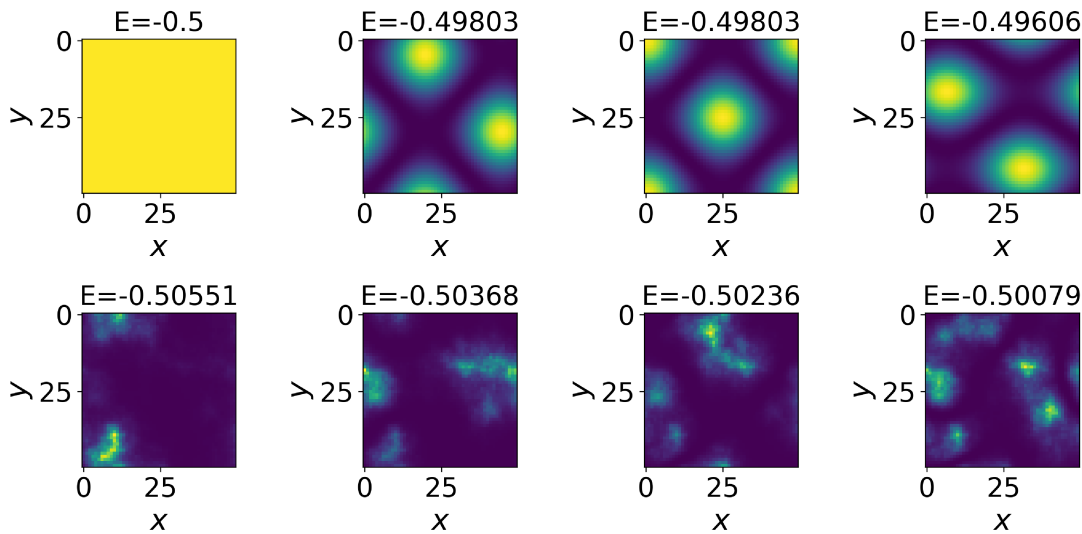


Figura 6 – Mapa de cores do modulo ao quadrado dos estados para o regime de localização de Anderson com $W = 0.03t$ (fileira inferior) e fora do regime de localização de Anderson, com $W = 0$ (fileira superior).

pode ocorrer o contrario, o sistema pode sair de um estado isolante trivial e fazer uma transição para um topológico ao se adicionar desordem, estes são denominados isolantes topológicos de Anderson (TAI, do inglês *topological Anderson insulators*). Esta surpresa foi descoberta por Li, Chu, Jain e Shen na referência (LI et al., 2009) e posteriormente aprofundada nas referências (JIANG et al., 2009; GROTH et al., 2009) por meio de simulações computacionais no modelo BHZ. Nestes, partindo-se de um regime de isolante trivial com $M > 0$, mostrou-se que com o aumento da intensidade da desordem W surge um platô de condutância quantizada, sugerindo a existência de estados de borda topológicos.

Na referência (LI et al., 2009), os autores também verificaram que a condutância G na fase trivial recai em uma curva universal perante a transformação $G \rightarrow GL_x/L_y$, indicando que o transporte se dá pelo *bulk*. Porém, para desordem W maior, na fase TAI, G é independente do tamanho do sistema, sugerindo que não há contribuição de estados de *bulk* e confirmando-se que o transporte se dá pelas bordas do sistema. Adicionalmente, a decomposição dos coeficientes de transporte por spin, mostrou que estes estados de borda são spin-polarizados e hélicos. O que foi confirmado em trabalhos posteriores (JIANG et al., 2009; GROTH et al., 2009).

O BHZ é um conhecido isolante topológico mesmo sem desordem. Para entender como a desordem induz a transição de isolante trivial para TAI, (GROTH et al., 2009) mostraram que o efeito da desordem é de renormalizar os valores da massa M em uma massa efetiva \bar{M} , passando de $\bar{M} = M > 0$ para $W = 0$ para $\bar{M} < 0$ para valores de W moderados. Adicionalmente, para valores de W mais elevados, recupera-se um regime de localização de Anderson trivial. De fato, os autores desta referência mostraram que, considerando-se que

a desordem é dada por um potencial de impurezas de posições e intensidades aleatórias (no intervalo $\pm W$), a *self-energy* Σ devido a desordem na aproximação auto-consistente de Born (BRUUS; FLENSBERG, 2003) é

$$\Sigma = \frac{1}{12} W^2 (a/2\pi)^2 \int_{BZ} \left[E_F + i0^+ - H_s(\mathbf{k}) - \Sigma \right]^{-1} d^2k, \quad (1.9)$$

sendo a o parâmetro de rede do sistema (passo da discretização), W a intensidade da desordem, E_F a energia de Fermi, $H_s(\mathbf{k})$ o hamiltoniano (1.1). A parte real de Σ renormaliza os termos do Hamiltoniano $H_s(\mathbf{k})$. No Apêndice A mostramos que as únicas componentes finitas de Σ são $\Sigma = \Sigma_0 \sigma_0 + \Sigma_z \sigma_z$, onde σ são as matrizes de Pauli definidas no modelo BHZ acima (Seção 1.1.2). Assim, podemos definir

$$\bar{M} = M + \text{Re} \Sigma_z \approx M - \frac{W^2 a^2}{48\pi\hbar^2} \frac{B}{B^2 - D^2} \ln \left| \frac{B^2 - D^2}{E_F^2 - M^2} \left(\frac{\pi\hbar}{a} \right)^4 \right|, \quad (1.10)$$

$$\bar{\mu} = E_F - \text{Re} \Sigma_0 \approx E_F - \frac{W^2 a^2}{48\pi\hbar^2} \frac{D}{B^2 - D^2} \ln \left| \frac{B^2 - D^2}{E_F^2 - M^2} \left(\frac{\pi\hbar}{a} \right)^4 \right|. \quad (1.11)$$

Aqui, \bar{M} e $\bar{\mu}$ são a massa e potencial químico renormalizados pela desordem. Nas equações acima, as expressões são obtidas na primeira aproximação de Born. Nota-se que a correção da massa $\bar{M} - M$ depende da intensidade da desordem com W^2 e pode induzir uma troca no sinal da massa efetiva \bar{M} , levando ao regime TAI.

1.2.2 Invariante topológico: o marcador local de Chern

O número de Chern discutido acima é definido como uma integral no espaço de quasi-momento \mathbf{k} , portanto válido apenas para sistemas com invariância translacional, periódicos. Aqui, estamos interessados em sistemas na presença de desordem de Anderson, portanto a invariância translacional é quebrada e devemos olhar para alternativas de caracterização da fase topológica. Neste contexto podemos usar dois invariantes topológicos que não dependem de \mathbf{k} : (i) o índice de Bott (HASTINGS; LORING, 2010; LORING; HASTINGS, 2010; HASTINGS; LORING, 2011) e (ii) o marcador local de Chern (BIANCO; RESTA, 2011; KITAEV, 2006; SYKES; BARNETT, 2021). O índice de Bott é dado pela expressão

$$B = \frac{1}{2\pi} \text{Im} \left\{ \text{Tr} \left[\log(VUV^\dagger U^\dagger) \right] \right\} \quad (1.12)$$

em que $U = P e^{i2\pi X} P$ e $V = P e^{i2\pi Y} P$, com P sendo o operador projeção para os estados ocupados do sistema. Este índice é equivalente ao número de Chern (TONIOLO, 2022), porém, sua expressão não é dependente da periodicidade da rede cristalina. Enquanto que o índice de Bott é global, o marcador local de Chern provê uma representação local no espaço (x, y) , capturando informações sobre as flutuações locais das propriedades topológicas devido à desordem. Aqui, estamos interessados em investigar as características deste marcador local.

O marcador local de Chern foi inicialmente proposto por Kitaev (KITAEV, 2006) para modelos discretos, e posteriormente generalizada para modelos contínuos por Bianco e Resta (BIANCO; RESTA, 2011). Mais recentemente, (SYKES; BARNETT, 2021) generalizaram os resultados de Bianco-Resta para sistemas de dimensões ímpares (1D e 3D, por exemplo). Na Seção 2.3 apresentamos a dedução deste marcador em detalhes, aqui, por hora, apresentamos apenas sua concepção geral.

Vimos anteriormente que o número de Chern é definido pela integral da curvatura de Berry no espaço \mathbf{k} e pode ser escrito como

$$C = -\frac{1}{\pi} \text{Im} \sum_n^{\text{oc.}} \int_{\text{ZB}} d^2k \langle \partial_{k_x} u_{n,\mathbf{k}} | \partial_{k_y} u_{n,\mathbf{k}} \rangle, \quad (1.13)$$

onde a soma corre apenas sobre bandas ocupadas e a integral em \mathbf{k} é sobre toda a zona de Brillouin (ZB). O elemento de matriz está definido em termos das funções periódicas de Bloch, tal que $\psi_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} u_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r}) / \sqrt{N_\infty}$, sendo N_∞ o número de celas unitárias (este fator de normalização será importante na demonstração). Para converter esta expressão em uma representação no espaço de coordenadas, (BIANCO; RESTA, 2011) primeiro introduzem a completeza $1 = \sum_{n'} |u_{n',\mathbf{k}}\rangle \langle u_{n',\mathbf{k}}|$ no elemento de matriz acima para obter a equação

$$C = -\frac{1}{\pi} \text{Im} \sum_n^{\text{oc.}} \sum_{n'}^{\text{livres}} \int_{\text{ZB}} d^2k \langle \partial_{k_x} u_{n,\mathbf{k}} | u_{n',\mathbf{k}} \rangle \langle u_{n',\mathbf{k}} | \partial_{k_y} u_{n,\mathbf{k}} \rangle. \quad (1.14)$$

Acima já simplificamos a somatória em n' que agora corre apenas por estados livres (mais detalhes na Seção 2.3). Uma vez nesta forma, a integral acima pode ser transformada para o espaço de coordenadas através da identidade

$$\langle u_{n',\mathbf{k}} | \nabla_{\mathbf{k}} u_{n,\mathbf{k}} \rangle = -i \langle \psi_{n',\mathbf{k}} | \mathbf{r} | \psi_{n,\mathbf{k}} \rangle, \quad (1.15)$$

que converte um elemento de matriz das derivadas com relação a \mathbf{k} em um elemento de matriz de \mathbf{r} . Esta identidade não é trivial e foi demonstrada na referência (BLOUNT, 1962), que é apresentada no Apêndice B por completeza. Note que além de trocar o operador de \mathbf{k} para \mathbf{r} , a identidade muda o domínio das funções onda, indo do termo periódico de Bloch $|u_{n,\mathbf{k}}\rangle$ para a função de onda completa $|\psi_{n,\mathbf{k}}\rangle$. Por fim, usando a identidade acima e outras manipulações que serão detalhadas na Seção 2.3, obtemos definição do marcador local $\mathcal{C}(\mathbf{R})$ como

$$C = \frac{1}{N_\infty} \sum_{\mathbf{R}} \mathcal{C}(\mathbf{R}), \quad (1.16)$$

$$\mathcal{C}(\mathbf{R}) = \frac{4\pi}{A_R} \text{Im} \sum_{\alpha} \int_{\mathbf{R}} d^2r \langle \mathbf{r}, \alpha | P_x P_y P | \mathbf{r}, \alpha \rangle, \quad (1.17)$$

sendo que \mathbf{R} representam as posições das celas unitárias do cristal ou delimitam áreas de interesse em um sistema desordenado, A_R é a área referente a este domínio definido

por \mathbf{R} , α são graus de liberdade internos (spin, orbitais, etc), (x, y) são os operadores de posição, e P é o projetor sobre os estados ocupados,

$$P = \sum_n \sum_{\mathbf{k}}^{\text{oc.}} |\psi_{n,\mathbf{k}}\rangle \langle \psi_{n,\mathbf{k}}| \rightarrow \sum_j |\psi_j\rangle \langle \psi_j|. \quad (1.18)$$

A primeira definição de P acima é uma identidade que surge naturalmente na dedução de $\mathcal{C}(\mathbf{R})$ e está definida em todo espaço (x, y) do cristal infinito e sem fronteiras. Na segunda definição é feita uma mudança de domínio *ad hoc*, onde $(n, \mathbf{k}) \rightarrow j$ passam a ser índices dos autoestados de um sistema finito com fronteiras. Esta é a única aproximação na demonstração original (BIANCO; RESTA, 2011). A aproximação funciona muito bem, pois é de se esperar que para $\mathbf{r} \approx \mathbf{R}$ próximo ao centro do cristal os autoestados $\psi_j(\mathbf{r})$ do sistema finito sejam indissociáveis dos autoestados de Bloch $\psi_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r})$. De fato, na Fig. 7 vemos que na região central do cristal $\mathcal{C}(\mathbf{R}) \approx +1$ indicando uma fase topológica. Mais detalhes sobre estas figuras serão apresentadas no Capítulo 3 e a demonstração de $\mathcal{C}(\mathbf{R})$ e consequências da aproximação acima serão discutidas nas Seções 2.3 e 3.5.

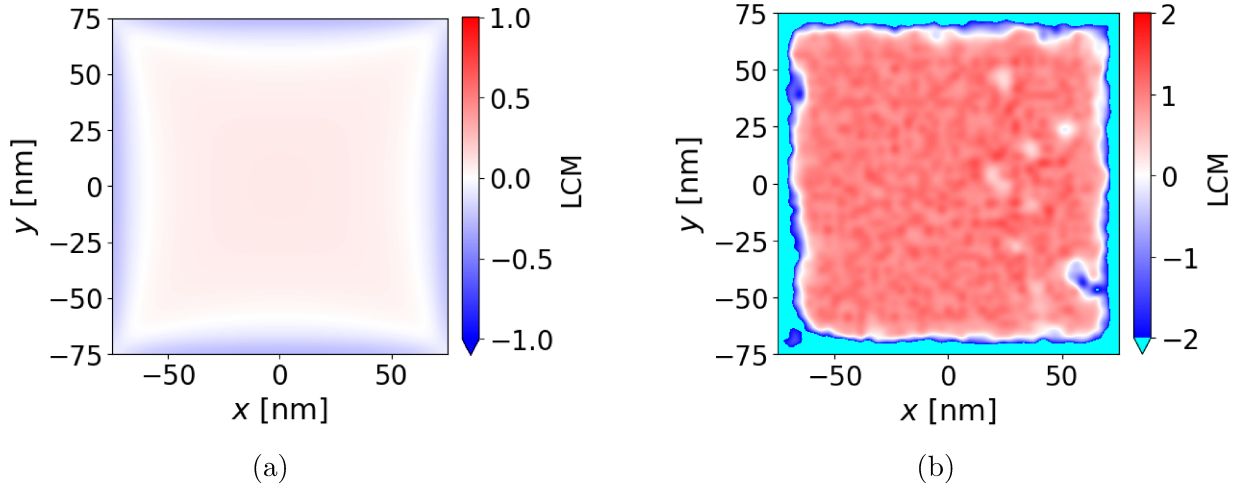


Figura 7 – Mapa de calor do Local Chern number para o BHZ com $L_x = L_y = 150$ nm, parâmetro de rede $a = 3$ nm e $M = 2$ meV com intensidade de desordem $W = 0$ em (a), $W = 500$ meV em (b).

1.3 Transições de fase e expoentes críticos

A teoria de transições de fase de Landau provê uma abordagem simples para a compreensão das características de transições de fase clássicas em torno de um ponto crítico. Nesta seção, iremos ilustrar os fundamentos desta teoria e a definição de expoentes críticos. Vamos considerar o tradicional caso de materiais ferromagnéticos (KITTEL, 1949; ACHARYYA, 2005). Neste caso, o parâmetro de ordem é a magnetização M , que é nula para temperaturas acima da temperatura de Curie, $T > T_c$, e finita para $T < T_c$. Aqui, T_c representa o ponto crítico da transição de fase.

Podemos assumir que a energia livre do sistema ferromagnético, $F \equiv F(B, T, M)$, é um funcional das grandezas macroscópicas: campo magnético B , temperatura T e magnetização M . Vamos considerar apenas o caso $B = 0$, tal que a energia livre F deve ser invariante por simetria de reversão temporal. Como esta simetria leva $M \rightarrow -M$, queremos que F seja uma função par em M . Como na transição de fase o parâmetro de ordem M deve ir a zero, podemos considerar uma expansão de F para $M \rightarrow 0$ na forma

$$F(T, M) - F_0 \approx a(T)M^2 + \frac{b(T)}{2}M^4, \quad (1.19)$$

sendo F_0 a energia livre em $M = 0$, e $a(T)$ e $b(T)$ são coeficientes da expansão que dependem da temperatura. O coeficiente que acompanha a mais alta ordem de M deve ser positivo, i.e. $b(T) > 0$, para que $F(T, M)$ cresça com $|M|$ para $|M|$ grande e a descrição seja termodinamicamente estável. Por simplicidade, podemos assumir uma constante $b(T) = b > 0$. Extremizando-se $\partial F / \partial M = 0$, vemos que os extremos da energia livre são $M = 0$ e $M = \pm \sqrt{-a(T)/b}$. Para $a(T) > 0$, a única solução real é $M = 0$, que de fato é o mínimo de energia, e a curvatura de F neste ponto é $\partial^2 F / \partial M^2 = 2a(T)$. Já para $a(T) < 0$, esta curvatura fica negativa e $M = 0$ é um máximo. Neste caso, os outros extremos $M = \pm \sqrt{-a(T)/b}$ tornam-se mínimos reais com curvatura positiva $|4a(T)|$. Estes dois casos estão ilustrados na Fig. 8.

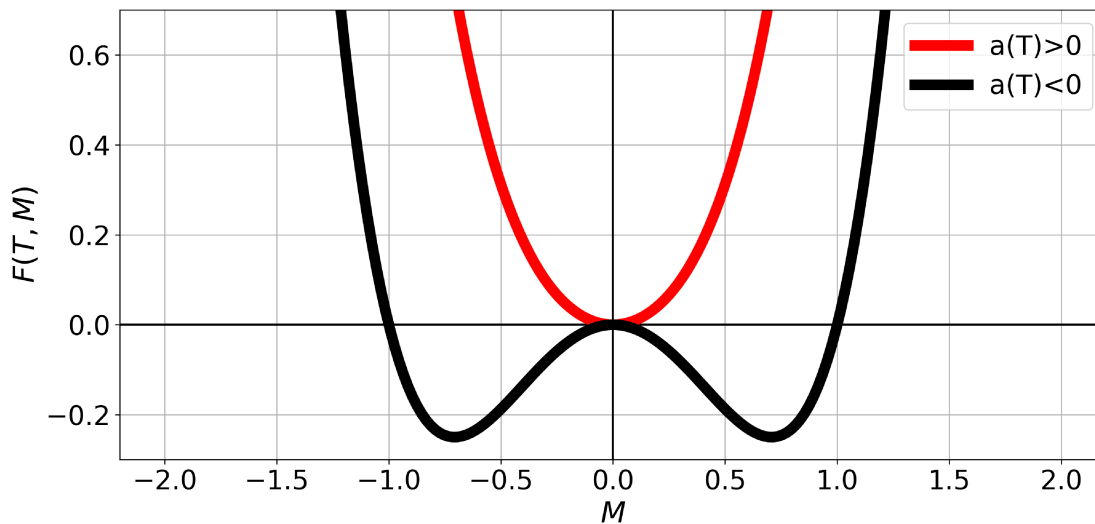


Figura 8 – Gráficos da energia livre $F(T, M)$ para T acima e abaixo da temperatura crítica T_c .

A análise acima mostra que devemos ter $a(T) > 0$ na fase não-magnética com $T > T_c$, e $a(T) < 0$ na fase magnética com $T < T_c$. Consequentemente, devemos ter $a(T_c) = 0$ no ponto crítico $T = T_c$, o que caracteriza uma transição de fase de segunda ordem. Assim, considera-se a relação $a(T) = a' \cdot (T - T_c)$, com $a' > 0$, obtendo-se o

comportamento da magnetização em torno do ponto crítico como

$$M = \begin{cases} \pm \sqrt{\frac{a'}{b}}(T_c - T)^{1/2}, & T < T_c, \\ 0, & T > T_c. \end{cases} \quad (1.20)$$

De forma semelhante, é possível extrair comportamentos críticos de outras grandezas termodinâmicas, como o calor específico magnético C_M e a susceptibilidade magnética χ_M . Mais detalhes podem ser vistos em livros textos (LÜBECK, 2004; STANLEY, 1971). Aqui, apresentamos apenas os resultados na forma

$$C_M = -T \frac{\partial^2 F}{\partial T^2} \Big|_M = \begin{cases} \frac{(a')^2}{b}, & T < T_c, \\ 0, & T > T_c, \end{cases} \quad (1.21)$$

$$\frac{1}{\chi_M} = \frac{\partial^2 F}{\partial M^2} \Big|_{B \rightarrow 0} = \begin{cases} 2a'(T_c - T), & T < T_c, \\ a'(T - T_c), & T > T_c. \end{cases} \quad (1.22)$$

Estes resultados são genéricos para qualquer sistema que possa ser representado pela energia livre F definida acima, e apresente uma transição de fase de segunda ordem. A especificidade do sistema está restrita aos valores dos parâmetros a' , b e T_c . Porém, as leis de potência que descrevem a dependência do sistema com a temperatura é única e descreve a *classe de universalidade* deste sistema genérico. Os expoentes das temperaturas são denominados *expoentes críticos* desta classe de universalidade. Ou seja, para $T \approx T_c$ as grandezas acima são funções universais nas formas $C_M \equiv C_M([T_c - T]^\alpha)$, $\chi_M \equiv \chi_M([T_c - T]^\beta)$ e $M \equiv M([T_c - T]^\gamma)$, com expoentes críticos $\alpha = 0$, $\beta = 1$, e $\gamma = 1/2$.

1.3.1 Marcador local de Chern como parâmetro de ordem

Foi observado que em um sistema finito marcador de Chern local varia de forma contínua em relação ao seu parâmetro de transição de fase. Isto nos remete a transições de fases clássicas, discutidas anteriormente e nos leva a estudar a utilização de classes de universalidade e expoentes críticos, no contexto de fase topológica.

A variação contínua do marcador de Chern local foi observada no trabalho (CAIO et al., 2019). Nesse trabalho os autores investigaram a transição de fase topológica, utilizando o marcador de Chern local no centro geométrico de sistemas cristalinos de dimensões $L \times L$, para oito valores de L , indo de 17 a 29 células unitárias, do modelo de Haldane (HALDANE, 1988). Esse modelo descreve um sistema com bandas topológicas sem a inclusão de campo magnético externo, e deu uma importante contribuição no desenvolvimento de isolantes topológicos. Tal modelo é definido em uma rede bidimensional *honeycomb*, sendo

$$H = -t_1 \sum_{\langle ij \rangle} (c_i^\dagger c_j + \text{h.c.}) - t_2 \sum_{\langle\langle ij \rangle\rangle} (e^{i\phi_{i,j}} c_i^\dagger c_j + \text{h.c.}) + M \sum_{i \in A} c_i^\dagger c_i - M \sum_{i \in B} c_i^\dagger c_i, \quad (1.23)$$

aqui c_i^\dagger e c_i são os operadores de criação e aniquilação, t_1 e t_2 são os *hoppings* de primeiros e segundos vizinhos, com $\langle \rangle$ e $\langle \langle \rangle \rangle$ sendo a soma para os respectivos primeiros e segundos vizinhos. O parâmetro M (parâmetro de massa) possui sinais opostos nas subrede A e B , o que quebra a simetria de inversão entre as subredes.

O marcador de Chern local no centro deste sistema, variou conforme ilustrado na Fig.9 (a), obtido por (CAIO et al., 2019) e, reproduzido por nós. Percebe-se que ao variar o parâmetro de transição, o marcador de Chern varia continuamente de 0 a 1, tendendo a uma função **heaviside** para sistemas maiores, como é o caso do número de Chern definido em sistema periódico. A variação do marcador de Chern local para se observar esta transição foi efetuada variando M de 1.4 a 2 meV. A forma como estas curvas variam, sugere uma possível renormalização do parâmetro M que poderia resultar em uma curva única para qualquer tamanho de sistema, o que foi feito na Fig.9 (b), ao se tomar $M \rightarrow (M - M_c)L^{1/\mu}$ com $\mu = 0.995 \approx 1$.

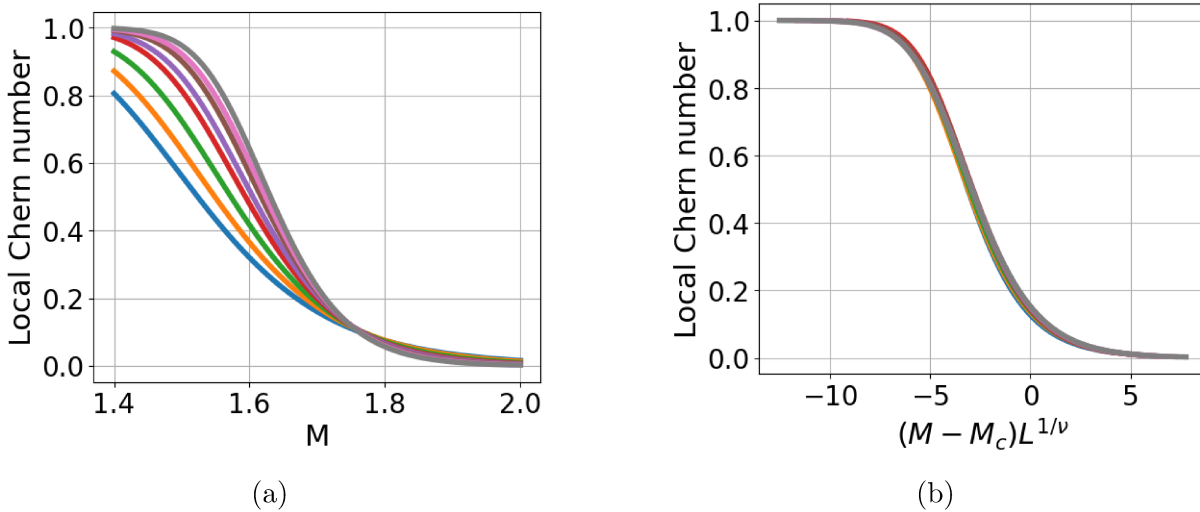


Figura 9 – (a) Transições de fase topológica no modelo de Haldane, avaliadas pelo marcador de Chern local no centro de sistemas de tamanhos $L \times L$, com $L = 15, 17, \dots, 29$ células unitárias, variando L em passos de 2. (b) Renormalização das curvas em (a), com $M \rightarrow (M - M_c)L^{1/\mu}$ e $\mu = 0.995 \approx 1$.

A renormalização $(M - M_c)L^{1/\mu}$ observada nos remete às classes de universalidade da teoria de transição de fase de Landau, descrita na seção anterior, com μ sendo um expoente crítico. Pensando nisso, nós propusemos como o principal objetivo deste trabalho, a obtenção de classes de universalidade para a renormalização de sistemas fortemente desordenados. No entanto, com a intensidade de desordem W como parâmetro de transição, em isolantes topológicos de Anderson, que devido a falta de periodicidade são topologicamente caracterizados por invariantes locais como o marcador de Chern local.

1.4 Organização do texto

Neste capítulo introduzimos os conceitos fundamentais utilizados no contexto desta dissertação: isolantes topológicos, invariantes topológicos, desordem de Anderson, marcadores locais, e transições de fase. No Capítulo 2 apresentamos (i) o Hamiltoniano modelo investigado nesta dissertação, (ii) uma breve apresentação de como usamos o pacote python kwant para auxiliar nos cálculos numéricos, e (iii) a demonstração da expressão do marcador local de Chern e suas implementações práticas, incluindo a aproximação do *Kernel Polynomial Method* (KPM), fundamental para investigação numérica de sistemas grandes de forma eficiente. No Capítulo 3 apresentamos nossos resultados sobre a caracterização das propriedades topológicas de sistemas na presença de desordem de Anderson. Em particular, mostramos que o marcador local colapsa em uma curva universal perante um reescalamiento da intensidade da desordem com o tamanho do sistema. No Capítulo 4 apresentamos nossas conclusões e perspectivas. E nos Apêndices apresentamos demonstrações auxiliares que complementam a discussão no texto principal.

2 Métodos

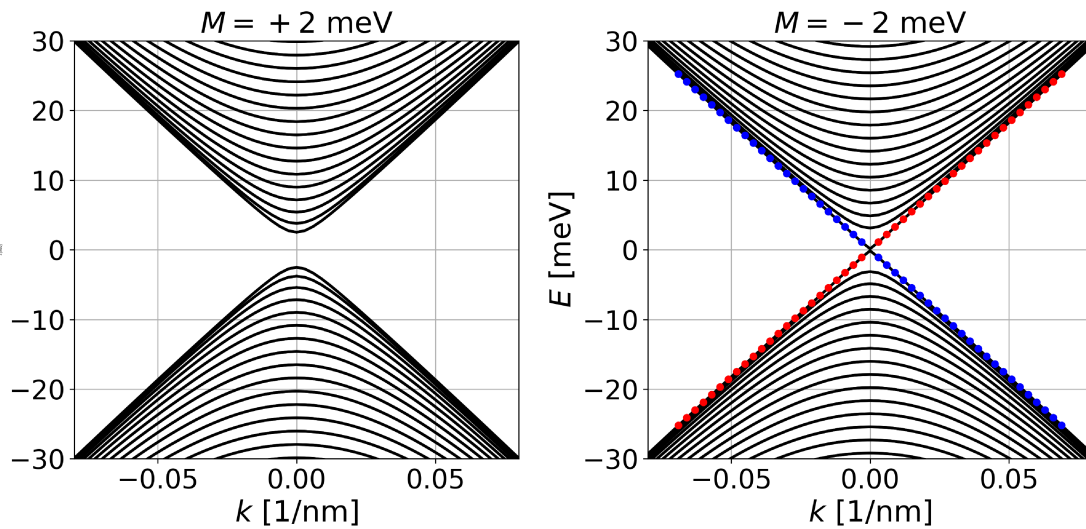
Nosso objetivo neste projeto é considerar os Hamiltonianos modelo mais usados nos estudos de isolantes topológicos. São estes: (i) modelo de Haldane (HALDANE, 1988); (ii) modelo de Kane-Mele (KANE; MELE, 2005c); (iii) o isolante topológico cristalino (FU, 2011); (iv) e o modelo BHZ (BERNEVIG; HUGHES; ZHANG, 2006; BERNEVIG; ZHANG, 2006). Nesta Dissertação, discutiremos apenas os resultados obtidos para o modelo BHZ. Porém, adiantamos que resultados preliminares para os outros modelos são equivalentes e resultam no mesmo expoente crítico. Os resultados completos de todos os modelos serão compilados em uma publicação científica a ser submetida em breve.

2.1 Modelo BHZ

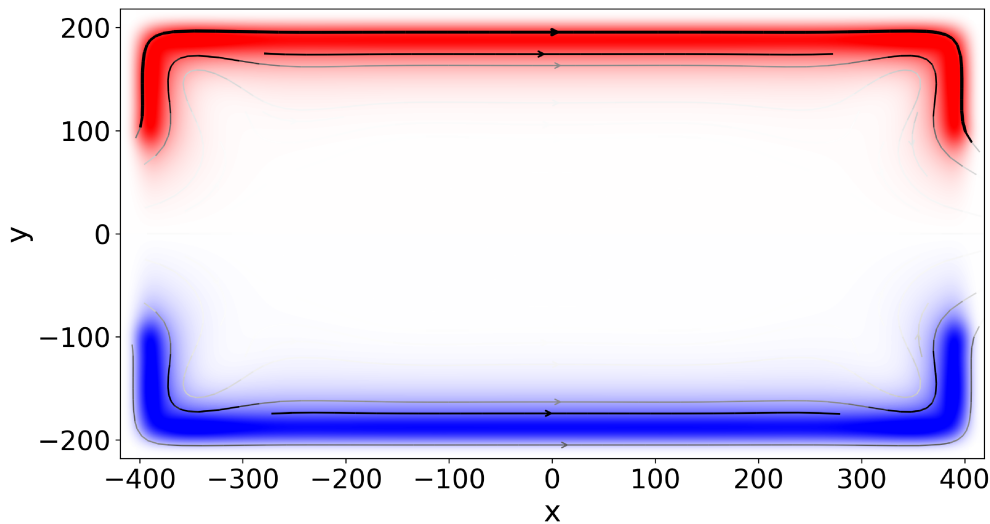
No capítulo de introdução, já apresentamos o modelo BHZ. Porém, por praticidade, repetimos aqui que seu Hamiltoniano é dado por

$$H_{\text{BHZ}} = A(k_x\sigma_x - k_y\sigma_y) + (M + Bk^2)\sigma_z + (Dk^2 + C)\sigma_0, \quad (2.1)$$

onde optamos por representar apenas o bloco de spin majoritário $s_z = \uparrow$, sendo que o bloco complementar é seu par por invariância temporal, dado por H_{BHZ}^* . Aqui, $A = 364.5 \text{ meV nm}$, $B = 686 \text{ meV nm}^2$, $D = C = 0$ por simplicidade, e o valor da massa varia ao longo do texto tipicamente no intervalo $-10 < M < 10 \text{ meV}$. Para as implementações numéricas, H_{BHZ} é discretizado em uma rede quadrada de passos $a = 3 \text{ nm}$ e os quasi-momentos são transformados $k_\nu \rightarrow -i\partial_\nu$, sendo $\nu = \{x, y\}$, segundo a aproximação da função envelope (BASTARD, 1988). Adicionalmente, as impurezas de Anderson são representadas por flutuações de energia aleatórias locais em cada sítio da rede discreta, com valores distribuídos uniformemente no intervalo de $-W$ a W . A Fig. 10 mostra a estrutura de bandas e estados de borda no regime topológico obtidas por este modelo.



(a)



(b)

Figura 10 – (a) Estrutura de bandas para o sistema BHZ de tamanho $L_y = 600$ nm, parâmetro de rede $a = 3$ nm, expresso no limite trivial ($M > 0$) a esquerda e no limite não-trivial ($M < 0$) a direita. No caso não-trivial foram destacadas as bandas cujos estados se propagam nas bordas, com o sinal de spin negativo na cor azul e o com spin positivo na cor vermelha. (b) Densidade de estados com cores distintas para diferentes spins e densidades de correntes representadas por seta, para o sistema BHZ sem desordem, de tamanho $L_x = 800$ nm e $L_y = 400$ nm, parâmetro de rede $a = 3$ nm e $M = -10$ meV.

2.2 Pacote python: kwant

O pacote python kwant (GROTH et al., 2014) é uma ferramenta de código aberto que auxilia na implementação de Hamiltonianos numéricos na representação discreta para

calcular propriedades espectrais e do transporte. Nesta dissertação, utilizamos o kwant para:

- Construir as matrizes numéricas dos Hamiltonianos modelo;
- Calcular as estruturas de bandas dos sistemas periódicos;
- Calcular autovalores e autovetores dos modelos de tamanho finito;
- Calcular a condutância e densidade de corrente de sistemas limpos e desordenados;
- Calcular a densidade de estados local.

Nesta seção, ilustramos cada uma destas operações com exemplos curtos de códigos e uma descrição de como funcionam.

Construção do modelo. Para construir a representação matricial discreta do modelo BHZ, utilizamos o subpacote `kwant.continuum` (`kc`), que lê uma *string* que descreve o modelo e a transforma na representação matricial. Por exemplo, considere o código abaixo:

```

1  import kwant
2  import kwant.continuum as kc
3  import numpy as np
4
5  # constants
6  default_A = 364.5 # meV.nm
7  default_B = 686.0 # meV.nm2
8  default_D = 0 # chiral case
9
10 def make_finite_sys(Lx, Ly, a, A=default_A, B=default_B, D=default_D):
11     # define BHZ template and build generic finite system
12     h = ''' A*(k_x * sigma_x - k_y * sigma_y) + (M + B*(k_x2 + k_y2))*sigma_z
13           + D*(k_x2 + k_y2)*sigma_0 + V(x,y)*sigma_0'''
14     locpars = {'A': A, 'B': B, 'D': D}
15     bhz = kc.discretize(h, locals=locpars, grid=a)
16     syst = kwant.Builder()
17     # define shape function
18     def rectangle(site):
19         x, y = site.pos
20         return (np.abs(x) <= Lx/2 + 1e-8) and (np.abs(y) <= Ly/2 + 1e-8)
21     # build the matrix representation
22     syst.fill(bhz, rectangle(Lx, Ly, 'site'), (0, 0))
23     # return kwant object
24     return syst

```

Na rotina `make_finite_sys`, definimos uma *string* `h` que representa o modelo BHZ. Nesta, algumas palavras chaves são nativamente interpretadas pelo *kwant* (via pacote *sympy*). Assim, os termos `sigma_ν` são automaticamente convertidos nas matrizes de Pauli σ_ν , e os termos `k_x` e `k_y` são representados na forma matricial de diferenças finitas. Mais explicitamente, os momentos são transformados nos operadores

$$\mathbf{k}_x \psi(x) \rightarrow -i \frac{\partial}{\partial x} \psi(x) \approx -i \frac{\psi(x+a) - \psi(x-a)}{2a}, \quad (2.2)$$

$$\mathbf{k}_x^2 \psi(x) \rightarrow -\frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi(x) \approx -\frac{\psi(x+a) - 2\psi(x) + \psi(x-a)}{a^2}, \quad (2.3)$$

sendo a o passo de discretização. Esta representação dos momentos k_ν é composta com as matrizes de Pauli via produto tensorial, tal que $Ak_x \sigma_x$ torna-se $Ak_x \otimes \sigma_x$, por exemplo. O dicionário `locpars` identifica os valores que devem ser atribuídos às constantes indicadas, e o parâmetro `grid` define o passo de discretização informado pelo parâmetro `a` da função principal. O objeto `syst` do tipo *Builder* auxilia na construção final da representação matricial. Para isso, precisamos informar quais sítios serão utilizados através da função de forma (`rectangle`), que é informada para a rotina `fill`. Esta percorre os sítios para os quais a função de forma retorna `True` e constrói a representação da função de onda e do Hamiltoniano automaticamente segundo a regra dos operadores acima. Nota-se que acima não foi definido o valor da massa M e nem a expressão do potencial local $V(x, y)$. Estes serão definidos em tempo de execução posteriormente nas chamadas de cálculos finais em cada método pelo dicionário `params`. A rotina acima retorna a representação do sistema `syst` na estrutura do *kwant*, e pode ser utilizada posteriormente para retornar o Hamiltoniano do sistema, ou outros observáveis como veremos a seguir.

Estrutura de bandas. Para gerar a figura da estrutura de banda do modelo BHZ, considere o código abaixo:

```

1  import numpy as np
2  import matplotlib.pyplot as plt
3  import kwant
4  from TAI import bhz
5
6  plt.rcParams.update({'font.size': 18})
7  a=3
8  Ly=150
9  M = 2
10 lead = bhz.make_lead(Ly, a).finalized()
11 ks = np.linspace(-1, 1, 101)*0.1
12
13 # trivial
14 bands = kwant.physics.Bands(lead, params={'M': +M})
15 ek0 = np.array([bands(k*a) for k in ks])
16 bands = kwant.physics.Bands(lead, params={'M': -M})
17 ek1 = np.array([bands(k*a) for k in ks])

```

A função `make_lead` que foi desenvolvida na rotina `bhz` é similar a `make_finite_sys`. No entanto, uma diferenciação notável entre elas é a inclusão da periodicidade na direção x , ao se utilizar a função `kwant.TranslationalSymmetry([-a, 0])`, no Builder. Vale ressaltar que o valor a corresponde ao passo de discretização, parâmetro que também deve ser colocado na rotina `fill` no lugar de Lx , como segue

```
1 lead = kwant.Builder(kwant.TranslationalSymmetry([-a, 0]))
2 lead.fill(bhzclean, rectangle(a, Ly, 'site'), (0, 0))
```

Definido o sistema atribuído a `lead`, a rotina `Bands` recebe este sistema como argumento e, a partir dos hamiltoniano *tight binding* construído nesta, a rotina calcula para todos os momentos definidos em `ks`, os autovalores do hamiltoniano, por meio da função `numpy.linalg.eigh`.

Condutividade e densidade de corrente.

É possível realizar o cálculo da condutância de um sistema utilizando os recursos da biblioteca `kwant`. Para isso, é necessário construir o sistema como uma região de espalhamento, conectada por dois ou mais terminais. Neste caso, utiliza-se as funções já definidas `make_finite_sys` e `make_lead`, na construção da rotina `make_ribbon` como segue

```
1 def make_ribbon(Lx, Ly, a, A=default_A, B=default_B, D=default_D, operators=False):
2     # call functions above to build sys and lead
3     syst = make_finite_sys(Lx, Ly, a, A, B, D)
4     lead = make_lead(Ly, a, A, B, D)
5     # attach leads
6     syst.attach_lead(lead) # 0
7     syst.attach_lead(lead.reversed()) # 1
8     # finalize system
9     syst = syst.finalized()
10    # return syst and operators
11    if operators == False:
12        return syst
13    else:
14        J0 = kwant.operator.Current(syst)
15        D0 = kwant.operator.Density(syst)
16        return syst, J0, D0
```

Neste código acima, acoplamos os terminais (*leads*) ao sistema utilizando o comando `attach_lead`. Durante sua chamada, é atribuído um número a cada *lead*, o qual será utilizado para referenciá-lo quando for analisar a transmissão de corrente no sistema. Essa

transmissão é computada utilizando a função `kwant.smatrix().transmission(0, 1)`, que calcula a transmissão por meio da amplitude de probabilidade de transmissão, através definição da matriz-S (DATTA, 1997). A implementação do calculo da condutância, variando o potencial químico μ e a intensidade de desordem W , está ilustrada no código abaixo.

```

1  a = 3 # nm
2  M = 2 # meV (edge state width = A/M, A = 365.5)
3  Lx = 150 # nm (3 or 4 times A/M should be sufficient)
4  Ly = Lx # nm
5  Ef = 150 # meV (lead shift)
6  NT = 0 # current total number of samples
7  Ws = np.linspace(0, 1200, 50) # list of W values
8  mus = np.linspace(-150, 150, 101) # list of mu values
9  # define the system
10 syst = bhz.make_ribbon(Lx, Ly, a, D=0)
11 for iw in tqdm(range(len(Ws))):
12     for ie in range(len(mus)):
13         params = {'V':V(Ws[iw]), 'M':M, 'Ef': Ef+mus[ie]}
14         Gmap = kwant.smatrix(syst, mus[ie], params=params).transmission(0, 1)

```

Neste código, a rotina `V(W)` retorna um gerador de números aleatórios uniformemente aleatório no intervalo $[-W, W]$, que são adicionados às energias locais de cada sítio.

Densidade de estados local.

Para efetivamente observar os estados de borda em sistemas topológicos, é possível utilizar os recursos disponíveis na biblioteca `kwant` para determinar a densidade de spin e densidade de corrente de sistemas. Essa análise permite observar o caráter helicoidal dos estados do sistema. Para realizar essa análise, são utilizados os operadores de densidade (`kwant.operator.Density`) e corrente (`kwant.operator.Current`). Ao chamar esses operadores, eles retornam os vetores resultantes da aplicação $A(\psi)$ sobre os sítios. Segue o trecho do código onde para cada sítio do sistema nós calculamos a densidade de spin e densidade de corrente

```

1  syst, J0, D0 = make_ribbon2(Lx = 800, Ly = 400, a = 3, operators=True)
2
3  e0 = 9
4  wf = kwant.wave_function(syst, energy=e0, params={'V': V(0), 'M': -10, 'Ef': 0})
5  psi = wf(0)
6  spin = 0
7  curr = 0
8  for p in psi:
9      curr += J0(p)
10     spin += D0(p)

```

Neste código calculamos a aplicação $\langle i|A|\psi\rangle$ dos operadores de corrente e densidade definidos na rotina `make_ribbon2`, e somamos para os autoestados da região de espalhamento, obtidos pela função `kwant.wave_function`.

Outras informações podem ser encontradas na documentação do `kwant`. Adicionalmente, o código-fonte dos cálculos implementados nesta dissertação serão disponibilizados no repositório `gitlab`: <https://gitlab.com/subgnano/topological-anderson-insulator>.

2.3 Marcador local de Chern

Usaremos o marcador local de Chern, $\mathcal{C}(\mathbf{R})$, introduzido conceitualmente na Seção 1.2.2, para obter diagramas de fase e para caracterização das transições de fase discutidos no próximo capítulo. Este marcador foi proposto originalmente por Kitaev (KITAEV, 2006) e Bianco-Resta (BIANCO; RESTA, 2011). Aqui, reproduziremos a demonstração de Bianco-Resta preenchendo lacunas que não estão claras no artigo original e contém detalhes que precisam ser bem compreendidos. Para tanto, mudaremos ligeiramente a notação usada no artigo original a fim de facilitar as manipulações. Por exemplo, usaremos somas discretas em \mathbf{k} ao invés de integrais no contínuo, pois a forma de somatórias nos levam a Deltas de Kronecker que são mais fáceis de analisar do que as de Dirac. De qualquer forma, a mudança de notação é trivial, pois

$$\sum_{\mathbf{k}}^{\text{ZB}} (\dots) \Delta k^2 \rightarrow \int_{\text{ZB}} (\dots) d^2 k, \quad (2.4)$$

sendo $\Delta k^2 = (2\pi)^2/A_\infty$, e A_∞ é a área do cristal infinito. Adicionalmente, vamos considerar o teorema de Bloch na forma

$$\psi_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{N_\infty}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} u_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r}), \quad (2.5)$$

sendo $u_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ a parte periódica e definida no domínio da cela unitária de área A_c , e o fator de normalização N_∞ é o número de celas unitárias, tal que $A_\infty = N_\infty A_c$. Desta definição segue a normalização

$$\int_\infty |\psi_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r})|^2 d^2 r = \frac{1}{N_\infty} \int_\infty |u_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r})|^2 d^2 r = \sum_{\mathbf{R}} \frac{1}{N_\infty} \int_{\mathbf{R}} |u_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r})|^2 d^2 r = \sum_{\mathbf{R}} \frac{1}{N_\infty} = 1, \quad (2.6)$$

onde o índice ∞ na integral indica que a integral é sobre todo o cristal de área $A_\infty \rightarrow \infty$ e o vetor da rede \mathbf{R} rotula cada uma das celas unitárias. Acima usamos também que a parte periódica de Bloch está normalizada na cela unitária, ou seja $\int_{\mathbf{R}} |u_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r})|^2 d^2 r = 1$. Todos estes detalhes serão importantes na dedução que segue e no complemento apresentado no Apêndice B.

Para obter o marcador local de Chern, começamos manipulando a expressão do número de Chern para sistemas *com invariância translacional*. Como apresentado na introdução, este é

$$C = -\frac{\Delta k^2}{\pi} \text{Im} \sum_n^{\text{oc.}} \sum_{\mathbf{k}}^{\text{ZB}} \langle \partial_{k_x} u_{n,\mathbf{k}} | \partial_{k_y} u_{n,\mathbf{k}} \rangle, \quad (2.7)$$

$$= -\frac{\Delta k^2}{\pi} \text{Im} \sum_n^{\text{oc.}} \sum_{n'}^{\text{livres}} \sum_{\mathbf{k}}^{\text{ZB}} \langle \partial_{k_x} u_{n,\mathbf{k}} | u_{n',\mathbf{k}} \rangle \langle u_{n',\mathbf{k}} | \partial_{k_y} u_{n,\mathbf{k}} \rangle. \quad (2.8)$$

Na segunda linha acima, inserimos no elemento de matriz a identidade $1 = \sum_{n'}^{\text{todos}} |u_{n',\mathbf{k}}\rangle \langle u_{n',\mathbf{k}}|$ e simplificamos a somatória de n' para correr apenas pelos estados livres, pois a contribuição dos ocupados é real e a expressão do C requer apenas a parte imaginária. Para verificar esta afirmação, separe a soma de n' nas duas contribuições, $\sum_{n'}^{\text{todos}} = \sum_{n'}^{\text{oc.}} + \sum_{n'}^{\text{livres}}$, e note que os termos que estão faltando em (2.8) (chamaremos de \mathcal{N}) são iguais ao seu complexo conjugado \mathcal{N}^* ,

$$\mathcal{N} = \sum_n^{\text{oc.}} \sum_{n'}^{\text{oc.}} \langle \partial_{k_x} u_{n,\mathbf{k}} | u_{n',\mathbf{k}} \rangle \langle u_{n',\mathbf{k}} | \partial_{k_y} u_{n,\mathbf{k}} \rangle, \quad (2.9)$$

$$\mathcal{N}^* = \sum_n^{\text{oc.}} \sum_{n'}^{\text{oc.}} \langle u_{n',\mathbf{k}} | \partial_{k_x} u_{n,\mathbf{k}} \rangle \langle \partial_{k_y} u_{n,\mathbf{k}} | u_{n',\mathbf{k}} \rangle = \sum_n^{\text{oc.}} \sum_{n'}^{\text{oc.}} \langle \partial_{k_x} u_{n',\mathbf{k}} | u_{n,\mathbf{k}} \rangle \langle u_{n,\mathbf{k}} | \partial_{k_y} u_{n',\mathbf{k}} \rangle. \quad (2.10)$$

Na primeira parte de \mathcal{N}^* apenas aplicamos o conjugado trocando bras e kets, e na segunda forma aplicamos integração por partes nos dois elementos de matriz para trocar as derivadas de lugar. Por fim, a igualdade entre $\mathcal{N} \equiv \mathcal{N}^*$ segue do fato das somas em n e n' serem intercambiáveis, pois ambas correm sobre os mesmos estados ocupados. Portanto apenas os estados livres contribuem na soma em n' no número de Chern C .

O próximo passo é transformar os elementos de matriz das derivadas $\partial_{\mathbf{k}}$ em elementos de matriz das coordenadas \mathbf{r} , para isso, utiliza-se a identidade

$$-i \langle \psi_{n',\mathbf{k}'} | \mathbf{r} | \psi_{n,\mathbf{k}} \rangle = \delta_{\mathbf{k}',\mathbf{k}} \langle u_{n',\mathbf{k}'} | \nabla_{\mathbf{k}} u_{n,\mathbf{k}} \rangle, \quad \text{para } n' \neq n. \quad (2.11)$$

Note que, na expressão de C acima a condição $n' \neq n$ é naturalmente satisfeita, uma vez que n corre sobre estados ocupados e n' sobre os livres. A demonstração desta identidade pode ser vista no livro (BLOUNT, 1962), mas por praticidade, reproduzimos os passos no Apêndice B.

Note que a identidade da Eq. 2.11 envolve uma mudança do elemento de matriz de $|u_{n,\mathbf{k}}\rangle$ para $|\psi_{n,\mathbf{k}}\rangle$. Enquanto o primeiro corresponde a uma integral no domínio da cela unitária A_c , o segundo é definido por integrais em toda a área A_∞ do cristal. Esta mudança de domínio é fundamental para trocarmos o domínio do cristal infinito para sistemas finitos mais adiante .

Assim, por enquanto, o número de Chern toma a forma

$$C = -\frac{\Delta k^2}{\pi} \text{Im} \sum_n^{\text{oc.}} \sum_{n'}^{\text{livres}} \sum_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}^{\text{ZB}} \langle \psi_{n,\mathbf{k}} | x | \psi_{n',\mathbf{k}'} \rangle \langle \psi_{n',\mathbf{k}'} | y | \psi_{n,\mathbf{k}} \rangle. \quad (2.12)$$

Aqui introduzimos soma \mathbf{k}' tirando proveito do $\delta_{\mathbf{k}',\mathbf{k}}$ da Eq. 2.11. As somas em n' e \mathbf{k}' podem ser condensadas no projetor dos estados livres Q e a somatória em n pode ser estendida para todos os estados introduzindo-se o projetor dos estados ocupados $P = 1 - Q$. Assim temos,

$$C = -\frac{\Delta k^2}{\pi} \text{Im} \sum_n \sum_{\mathbf{k}}^{\text{todos ZB}} \langle \psi_{n,\mathbf{k}} | PxQyP | \psi_{n,\mathbf{k}} \rangle, \quad (2.13)$$

$$Q = \sum_{n',\mathbf{k}'}^{\text{livres}} |\psi_{n',\mathbf{k}'}\rangle \langle \psi_{n',\mathbf{k}'}|, \quad (2.14)$$

$$P = \sum_{n',\mathbf{k}'}^{\text{oc.}} |\psi_{n',\mathbf{k}'}\rangle \langle \psi_{n',\mathbf{k}'}|. \quad (2.15)$$

Com estas modificações, as somas em n e \mathbf{k} em C agora correm sobre todos os estados e podemos usar relações de ortogonalidade para simplificar a expressão.

Vamos inserir a completeza $1 = \sum_{\alpha} \int_{A_{\infty}} d^2r |\mathbf{r}, \alpha\rangle \langle \mathbf{r}, \alpha|$ entre P e os bra e ket na expressão de C acima. Aqui, α representa graus de liberdade internos do sistema (spin, orbitais, etc). Reorganizando a expressão, temos

$$C = -\frac{\Delta k^2}{\pi} \text{Im} \sum_{\alpha,\alpha'} \int_{A_{\infty}} d^2r \int_{\infty} d^2r' \langle \mathbf{r}, \alpha | PxQyP | \mathbf{r}', \alpha' \rangle \sum_{n,\mathbf{k}} \langle \mathbf{r}', \alpha' | \psi_{n,\mathbf{k}} \rangle \langle \psi_{n,\mathbf{k}} | \mathbf{r}, \alpha \rangle, \quad (2.16)$$

$$C = -\frac{\Delta k^2}{\pi} \text{Im} \sum_{\alpha} \int_{A_{\infty}} d^2r \langle \mathbf{r}, \alpha | PxQyP | \mathbf{r}, \alpha \rangle \quad (2.17)$$

$$= \frac{\Delta k^2}{\pi} \text{Im} \sum_{\alpha} \int_{A_{\infty}} d^2r \langle \mathbf{r}, \alpha | PxPyP | \mathbf{r}, \alpha \rangle, \quad (2.18)$$

onde usamos a completeza $\sum_{n,\mathbf{k}} |\psi_{n,\mathbf{k}}\rangle \langle \psi_{n,\mathbf{k}}| = 1$ (pois agora n e \mathbf{k} correm sob todos os estados) e $\langle \mathbf{r}, \alpha | \mathbf{r}', \alpha' \rangle = \delta_{\alpha,\alpha'} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$. Na última expressão acima usamos $Q = 1 - P$ e notamos que a contribuição do termo 1 não contribui, pois é real. Para verificar esta afirmação, basta notar que $[x, y] = 0$, mas $[x, P] \neq 0$ e $[y, P] \neq 0$.

A expressão de C acima ainda é global, pois a integral em \mathbf{r} corre sobre A_{∞} . Para obter o marcador local, vamos quebrar esta soma nas contribuições individuais de cada cela unitária ou região finita que delimitaremos de forma abstrata pela coordenada \mathbf{R} , tal que $\int_{A_{\infty}} d^2r = \sum_{\mathbf{R}} \int_{\mathbf{R}} d^2r$. Assim temos

$$C = \frac{1}{N_{\infty}} \sum_{\mathbf{R}} \mathcal{C}(\mathbf{R}), \quad (2.19)$$

$$\mathcal{C}(\mathbf{R}) = \frac{4\pi}{A_c} \text{Im} \sum_{\alpha} \int_{\mathbf{R}} d^2r \langle \mathbf{r}, \alpha | PxPyP | \mathbf{r}, \alpha \rangle, \quad (2.20)$$

onde $\mathcal{C}(\mathbf{R})$ é o marcador local referente à cela unitária ou região \mathbf{R} , e o número de Chern é dado pela média de $\mathcal{C}(\mathbf{R})$ em todo espaço.

A expressão acima de $\mathcal{C}(\mathbf{R})$ é a expressão final que usamos em nossas implementações. É uma representação local. Onde uma importante mudança de domínio fundamental

fica escondida. Toda a demonstração feita acima é exata, não fizemos nenhuma aproximação. Porém, os projetores P foram definidos para sistemas com invariância translacional e sua definição contém integrais em \mathbf{k} . Para utilizar $\mathcal{C}(\mathbf{R})$ em sistemas finitos, é feita uma mudança de domínio *ad hoc*, trocando-se o projetor P (e o mesmo para Q) definidos acima pela nova definição

$$P = \sum_j^{\text{oc.}} |\psi_j\rangle\langle\psi_j|, \quad (2.21)$$

sendo que j indexa os autoestados do sistema finito, com fronteira δA , tal que $\psi_j(\mathbf{r}) = 0$ para $\mathbf{r} \in \delta A$. Esta mudança é fisicamente razoável, pois para \mathbf{R} próximo ao centro do cristal finito, é de se esperar que $\psi_j(\mathbf{r})$ seja indistinguível de sua contrapartida periódica $\psi_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r})$. Porém, próximo da fronteira é de se esperar desvios significativos.

Os autores (BIANCO; RESTA, 2011) mencionam de passagem os problemas desta mudança de domínio, mas não elaboram os detalhes. Aqui, em nossos resultados seguiremos esta receita sem questionamentos, mas na Seção 3.5 voltaremos a discutir esta aproximação como um problema em aberto.

2.3.1 Implementação via força-bruta: mapa (x,y) completo

Para sistemas pequenos, podemos implementar o marcador local exatamente como descrito na Eq. 2.20. Mais especificamente, utilizamos o pacote `kwant` para calcular todos os autovalores ε_j e autovetores ψ_j do Hamiltoniano H de um sistema finito, e os utilizamos para computar o projetor P . Os operadores x e y são matrizes diagonais com as coordenadas ordenadas na estrutura interna do `kwant`. Nesta representação, os elementos de matriz $\langle\mathbf{r}, \alpha|PxPyP|\mathbf{r}, \alpha\rangle$ são os termos diagonais da matriz $PxPyP$. A soma em α e a integral na região \mathbf{R} correspondem a um traço parcial neste domínio de interesse, tal que podemos escrever

$$\mathcal{C}(\mathbf{R}) = \frac{4\pi}{A_c} \text{Im tr}_{\mathbf{R}} [PxPyP], \quad (2.22)$$

sendo $\text{tr}_{\mathbf{R}} = \sum_{\alpha} \int_{\mathbf{R}} d^2r$.

2.3.2 Implementação via aproximação KPM: para apenas uma cela unitária

Estamos interessados em avaliar uma transição de fase, através do marcador de Chern local \mathcal{C} no centro de um sistema desordenada. Para isso devemos diagonalizar o hamiltoniano do sistema, para definir o operador projeção $P(\varepsilon, H)$, presente na expressão de \mathcal{C} , para assim, matricialmente encontrar o valor esperado no estado do sítio central ($\langle\mathbf{r}|C(W, M)|\mathbf{r}\rangle$), em todos os valores (W, N) do intervalo onde analisaremos esta transição. Para um número de configurações de desordem suficiente de se obter uma boa media para \mathcal{C} . Isso implica em alto custo computacional, tornando a ideia de um

método aproximativo, algo mais palatável. Devido isso, nós recorremos ao método KPM (*Kernel Polynomial Method*) para o operador projeção $P(\epsilon, H)$, que para um número de momentos suficiente, obtemos um bom valor para o marcador de Chern local com uma boa precisão a um menor custo computacional. A descrição deste método será feita a seguir.

2.3.2.1 Expansão em polinômios de Chebyshev

Há várias formas de se obter uma boa aproximação para uma função, sendo expansões truncadas um dos métodos mais usados, como é o caso do método de expansão em polinômios de Chebyshev. Este método utiliza de uma definição de produto interno

$$\langle f|g \rangle = \int_a^b w(x)f(x)g(x)dx \quad (2.23)$$

para construir uma base ortogonal de polinômios denominados polinômios de Chebyshev, que são agrupados em dois conjuntos de funções completas $T_n(x)$ e $U_n(x)$, definidas no intervalo $[a, b] = [-1, 1]$, pois há duas definições de produto interno, a primeira $\langle \rangle_1$ com $w(x) = [\pi\sqrt{(1-x^2)}]^{-1}$ e a segunda $\langle \rangle_2$ com $w(x) = \pi\sqrt{1-x^2}$. Para nosso propósito basta a primeira definição T dos polinômios de Chebyshev.

A limitação deste intervalo é devida a normalização do produto interno, este que resulta em

$$\langle T_n|T_m \rangle_1 = \frac{1 + \delta_{n,0}}{2} \delta_{n,m}. \quad (2.24)$$

Também pode se verificar que estes polinômios satisfazem as relações de recorrência

$$T_0(x) = 1, \quad T_{-1}(x) = T_1(x) = x, \quad T_{m+1} = 2xT_m(x) - T_{m-1}(x), \quad (2.25)$$

que proporcionam uma forma de se efetuar a expansão nestes polinômios, por iterações. A expansão de uma função f definida no mesmo intervalo $[-1, 1] \rightarrow \mathbb{R}$ é da forma

$$f(x) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\langle f|T_n \rangle}{\langle T_n|T_n \rangle} = \alpha_0 + 2 \sum_{n=1}^{\infty} \alpha_n T_n(x), \quad (2.26)$$

com coeficientes

$$\alpha_n = \langle f|T_n \rangle = \int_{-1}^1 \frac{f(x)T_n(x)}{\pi\sqrt{1-x^2}} dx. \quad (2.27)$$

Um exemplo de aplicação é a expansão do operador evolução temporal, que descreve a evolução de estados com relação ao tempo, como segue

$$e^{-iHt/\hbar} = J_0(\tau)I + 2 \sum_{n=1}^{\infty} (-i)^n J_n(\tau) T_n(\mathcal{H}). \quad (2.28)$$

Aqui I é o operador identidade, J_n é a função de Bessel do primeiro tipo, oriunda dos coeficientes desta expansão, e τ e \mathcal{H} são dados por

$$\tau = \frac{\|H\|}{\hbar}t, \quad \mathcal{H} = \frac{H}{\|H\|}. \quad (2.29)$$

A norma $\|\dots\|$ é tal que $\|T_n(\mathcal{H})\| \leq 1, \forall n$. Esta normalização do hamiltoniano é devida à normalização dos polinômios.

2.3.2.2 Kernel Polynomial Method

Acima, no exemplo do operador de evolução temporal a expansão envolve uma somatória em infinitos momentos n , porém, tipicamente converge rapidamente com $n \gg \tau$. Porém, se pré-fixarmos o número de momentos $n = 0, \dots, N$, é possível utilizar o conceito de *kernel* para otimizar a convergência (WEISSE et al., 2006). Este consiste em modificar a expansão ao se modificar os coeficientes $\mu_n \rightarrow g_n\mu_n$, obtendo uma nova função

$$\begin{aligned} f_{KPM}(x) &= \sum_{n=0}^{N-1} g_n \frac{\langle f | \phi_n \rangle_2}{\langle \phi_n | \phi_n \rangle} \phi_n(x) \\ &= \frac{1}{\pi\sqrt{1-x^2}} (g_0\mu_0 + 2 \sum_{n=1}^{N-1} g_n\mu_n T_n(x)). \end{aligned} \quad (2.30)$$

Esta expressão é diferente da anterior (2.26), já que há um termo $(\pi\sqrt{1-x^2})^{-1}$ em evidencia. Esta forma surge porque $\phi_n(x) = \frac{T_n(x)}{\pi\sqrt{1-x^2}}$ é um conjunto completo, com estes ortogonais no segundo produto interno $\langle \rangle_2$ como é demonstrado em (WEISSE et al., 2006). Pode-se observar que esta equação pode ser reescrita como

$$\begin{aligned} f_{KPM}(x) &= \int_{-1}^1 \pi\sqrt{1-y^2} K_N(x, y) f(y) dy \\ &= \langle K_N(x, y) | f(y) \rangle_2, \end{aligned} \quad (2.31)$$

com

$$K_N(x, y) = g_0\phi_0(x)\phi_0(y) + 2 \sum_{n=1}^{N-1} g_n\phi_n(x)\phi_n(y). \quad (2.32)$$

Tal função é denominada *kernel*, que pode ser qualquer função que garanta a convergência $\lim_{N \rightarrow \infty} |f - f_{KPM}| = 0$ e é útil se a convergência for melhor do que a expansão inicial. Para justificar seu uso, estes critérios são verificados para o *kernel* de Jackson e outros na referência (WeISSE et al., 2006). O Kernel de Jackson é o melhor em muitas aplicações, seus coeficientes g_n são

$$g_n = \frac{1}{N+1} \left[(N-n+1) \cos\left(\frac{\pi n}{N+1}\right) + \sin\left(\frac{\pi n}{N+1}\right) \cot\left(\frac{\pi}{N+1}\right) \right]. \quad (2.33)$$

Para o cálculo do Local Chern Maker neste trabalho, foi utilizado a expansão *KPM* com o Kernel de Jackson no operador projeção $P(\epsilon, H)$, assim como em (VARJAS et al., 2020),

resultando

$$\begin{aligned} P(\epsilon, H) &= \theta(\epsilon - H), \\ P(\epsilon, H) &= \sum_{m=0}^M g_m \mu_m(\epsilon) T_m(H), \end{aligned} \quad (2.34)$$

com

$$\mu_m(\epsilon) = \begin{cases} 1 - \frac{\arccos(\epsilon)}{\pi} & m = 0, \\ \frac{-2 \sin[m \arccos(\epsilon)]}{m\pi} & m \neq 0. \end{cases} \quad (2.35)$$

2.4 Otimizando parâmetros críticos

Para o cálculo numérico da otimização dos valores de W_c e μ na renormalização da região de transição do marcador local como proposto nos objetivos, nós minimizaremos uma função erro $Z(W_c, \mu)$, definida por

$$Z(W_c, \mu) = \int_{-\infty}^{\omega_{cut}} P(\omega) \sigma_{\mathcal{C}}(\omega) d\omega, \quad (2.36)$$

$$\bar{\mathcal{C}}_0(\omega) = \frac{1}{N_L} \sum_L \mathcal{C}_0(\omega), \quad (2.37)$$

$$\sigma_{\mathcal{C}_0}^2(\omega) = \frac{1}{N_L - 1} \sum_L [\mathcal{C}_0(\omega) - \bar{\mathcal{C}}_0(\omega)]^2, \quad (2.38)$$

com $\bar{\mathcal{C}}_0(\omega)$ e $\sigma_{\mathcal{C}_0}^2(\omega)$ sendo respectivamente o valor médio e a variância do marcador \mathcal{C}_0 para diferentes valores de L . Nota-se que tal função erro depende da escolha do alcance ω_{cut} da transição e também de uma escolha da função peso $P(\omega)$. O alcance ω_{cut} deve limitar a integral para que não chegue na região da segunda transição para o regime de localização de Anderson trivial.

Para o peso, consideramos dois casos. No primeiro usamos apenas $P(\omega) = 1$, tal que todos os pontos tem o mesmo peso. No segundo caso, usamos $P(\omega) = 1 - \bar{\mathcal{C}}_0(\omega)/\bar{\mathcal{C}}_{max}$ a fim de maximizar o peso na região de transição entre os platôs de $\bar{\mathcal{C}}_0(\omega) = 0$ e $\bar{\mathcal{C}}_0(\omega) = 1$. Aqui $\bar{\mathcal{C}}_{max}$ é o valor máximo de $\bar{\mathcal{C}}_0(\omega)$.

3 Resultados

Nesta seção serão apresentados os resultados que atestam a fase topológica do modelo BHZ, para o regime topológico devido à desordem de Anderson, verificando assim, a metodologia utilizada. Em seguida apresentamos os resultados originais desta dissertação, como o estudo da invariância de escala dos parâmetros de transição de fase W (intensidade de desordem) e M (parâmetro de massa), com seus expoentes críticos. Os resultados apresentados nesta seção foram também obtidos para outros sistemas que apresentam uma fase topológica devida a desordem de Anderson: o modelo de Haldane (CAIO et al., 2019), modelo de Kane-Mele (ORTH et al., 2016), e para isolantes topológicos cristalinos (FU, 2011). Aqui, nesta Dissertação, apresentamos resultados apenas para o modelo BHZ, enquanto que os resultados dos outros modelos serão compilados em uma futura publicação de artigo científico.

3.1 Condutância no regime TAI

Para validar a nossa metodologia, reproduzimos o cálculo da condutância presente nas referências (LI et al., 2009; GROTH et al., 2009), como pode ser observado na Fig. 11. Nestes trabalhos, os autores consideram o modelo BHZ com massa no regime trivial ($M > 0$) acrescido de desordem do tipo Anderson, e variaram o potencial químico μ e a intensidade do potencial de impurezas W , assim como nós fizemos. Para tal, empregamos a rotina `kwant.smatrix` descrita na seção 2.2, a qual computa a transmissão entre os eletrodos conectados ao sistema, que nos permite obter o valor da condutância de Landauer.

Analisando a Fig.11, nas proximidades da região trivial, onde $W \approx 0$, vemos que a condutância evolui como esperado, sendo nula na região de gap, uma vez que se trata de um isolante trivial. Gradualmente, à medida que nos afastamos de neutralidade de carga do potencial químico $\mu = 0$, seu valor aumenta de forma progressiva. Esse comportamento é atribuído ao maior número de bandas disponíveis para o transporte.

Para valores mais elevados de W , é observada a presença de uma região de condutância quantizada, destacada pela cor amarela na Fig. 11. Essa característica é típica desse sistema no regime não-trivial, uma vez que nele há estados de borda com canais de corrente unidimensionais. Essa quantização é devida à renormalização da massa efetiva do sistema, conforme discutido em (GROTH et al., 2009) e na seção 1.2.1. A massa efetiva leva o sistema para o regime topológico não-trivial, causada pela adição de desordem. A quantização da condutância pode ser observada no painel direito da Fig. 11 para os três menores potenciais químicos fixados. Além de um indicativo da presença de estados de borda, este mapa de cores para a condutância também funciona como um diagrama de

fase indireto para a fase topológica.

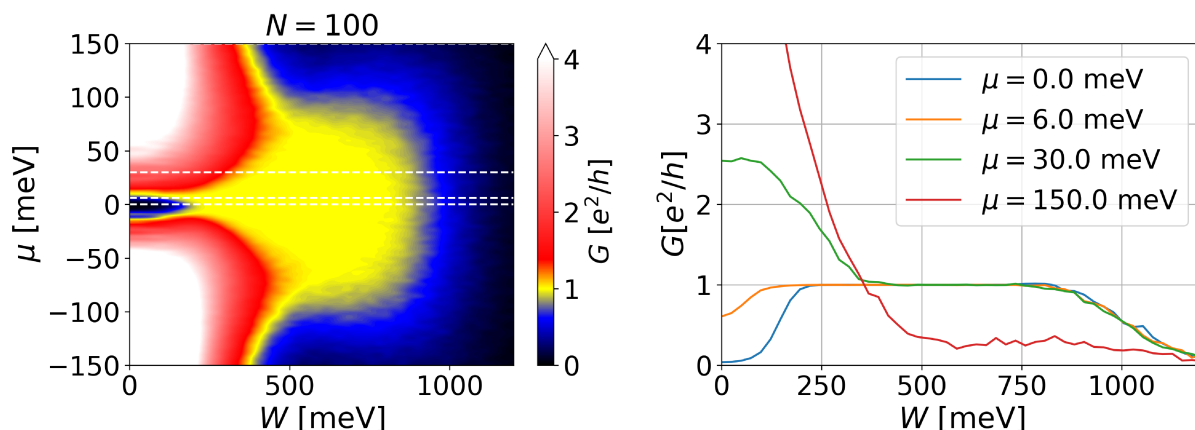


Figura 11 – Mapa da media da condutância pela intensidade de desordem W para o sistema BHZ de tamanho $L_x = L_y = 150$ nm, parâmetro de rede $a = 3$ nm e $M = 2$ meV, para 100 configurações de desordem

3.2 Estados hélicos

Podemos comprovar que a condutância se dá por estados de borda ao analisar a densidade dos estados com energia $E \approx 0$ nos sítios do sistema, conforme ilustrado na Fig. 12.

Na Figura 12(a), apresentamos a densidade de probabilidade $|\psi(\mathbf{r})|^2$, para um autoestado de baixa energia, utilizando o método de diferenças finitas para construir o sistema, disponível no pacote `kwant.continuum` (kc), conforme descrito na seção 2.2. Para tal, realizamos a diagonalização do hamiltoniano por meio da `linalg.eigh` do `numpy`, para obter estes autoestados. Nesse mapa, é possível observar que os estados estão localizados na borda do sistema. Para verificar se esses estados são polarizados por spin, geramos a Fig.12(b), e confirmamos que os sentidos de propagação destes estados são distintos para os diferentes valores spin.

Conforme descrito na seção 2.2, esse resultado foi obtido utilizando as rotinas `kwant.operator.Current` e `kwant.operator.Density`, que calculam a densidade de corrente do sistema desordenado conectado a terminais. Esses terminais foram construídos utilizando a função `make_ribbon` com as duas componentes de spin no hamiltoniano BHZ, com o objetivo de ilustrar os dois estados de borda. Na Fig.12(b) é possível ver pela escala de cores, que a densidade de spin dos estados em bordas diferentes, possuem valor de spin opostos. Além disso, as setas representam a densidade de corrente, evidenciando que essas correntes se propagam em direções opostas, apesar da presença de desordem, que provoca uma leve ondulação em sua direção de propagação. Ambas as figuras foram obtidas a partir de uma única realização de desordem.

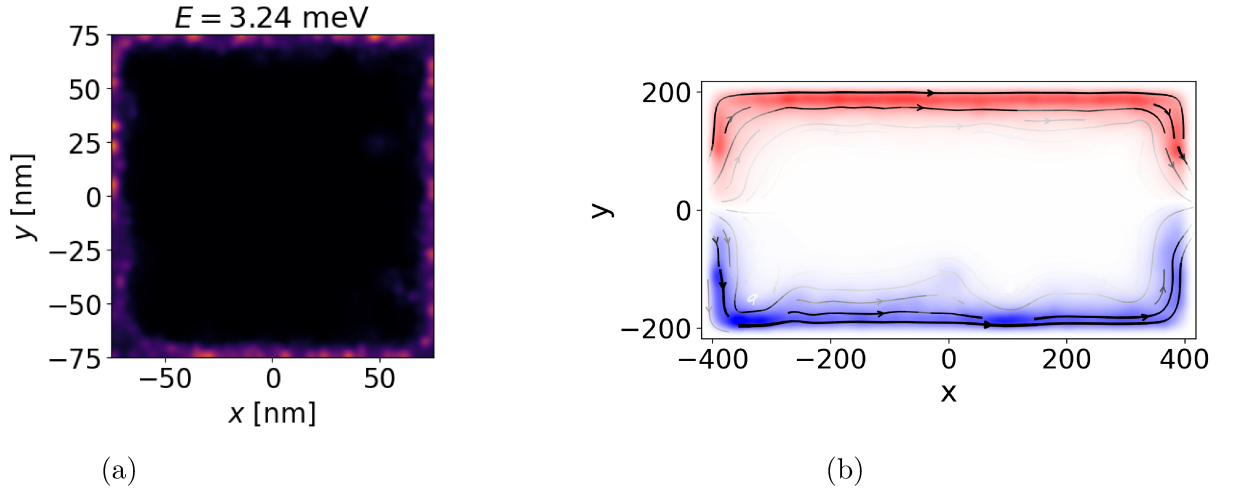


Figura 12 – (a) Mapa de $|\psi(\mathbf{r})|^2$ na representação sobre os sítios do sistema, para $L_x = L_y = 150$ nm, $M = 2$ meV e $W = 500$ meV. As cores mais claras expressão a maior intensidade de $|\psi(\mathbf{r})|^2$, enquanto a cor preta representa a não distribuição de $|\psi(\mathbf{r})|^2$ sobre o sítio. (b) Densidade de estados com cores distintas para diferentes spins e densidades de correntes representadas por seta, para uma realização de desordem do sistema BHZ de tamanho $L_x = 800$ nm e $L_y = 400$ nm, parâmetro de rede $a = 3$ nm e $M = 2$ meV.

3.3 Marcador de Chern local

O principal objetivo deste trabalho é usar um invariante topológico local para descrever a transição de fase dos isolantes topológicos de Anderson. O invariante selecionado para este propósito é o marcador de Chern local, conforme ilustrado na figura 13. Esse invariante é obtido através de uma representação no espaço \mathbb{R}^2 do número Chern, e é definido para cada sítio do sistema como expresso na equação (2.20). A soma deste marcador local sobre todos os sítios resulta no número Chern no caso do sistema *bulk*. No entanto, para sistemas finitos esta soma resulta no traço do comutador de uma matriz finita, que é igual a zero em todos os casos. Portanto, na figura em questão, vemos que há uma região com valores negativos que garante que a soma total desse invariante seja zero.

Como destacado na seção 2.3, existem várias formas de expressar o número de Chern em sua definição espacial para um sistema finito. Isso ocorre devido à propriedade do projetor $P = PP$ e a ciclicidade do traço. Dessa forma, surgem definições alternativas, como $\text{Tr}\{PxPy\}$, $\text{Tr}\{PxPyP\}$ e outras, com a possibilidade de ter o operador Q ao invés de P (CHEN, 2023). A definição dada pela equação (2.20) possui a melhor distribuição do marcador de Chern sobre os sítios, conforme ilustrado na figura 13. Essa distribuição demonstra de maneira antecipada (para sistemas pequenos) como todas estas definições deverão se comportar próximos do limite termodinâmico, com sua região central apresentando valores próximos ao do número de Chern, enquanto os sítios das bordas exibem valores negativos.

Portanto, por meio dessa definição do marcador de Chern local, obtemos uma maneira de caracterizar a fase topológica de sistemas desordenados, que consiste em observar o valor do marcador na região central do sistema. No entanto, como podemos observar nesta figura 13(b), para uma realização de desordem, há pontos aleatórios estatisticamente robustos, em que este invariante flutua para valores negativos. Obtendo assim, que é necessária a media de varias realizações de desordem para eliminar estas flutuações e obter um bom invariante para estes sistemas.

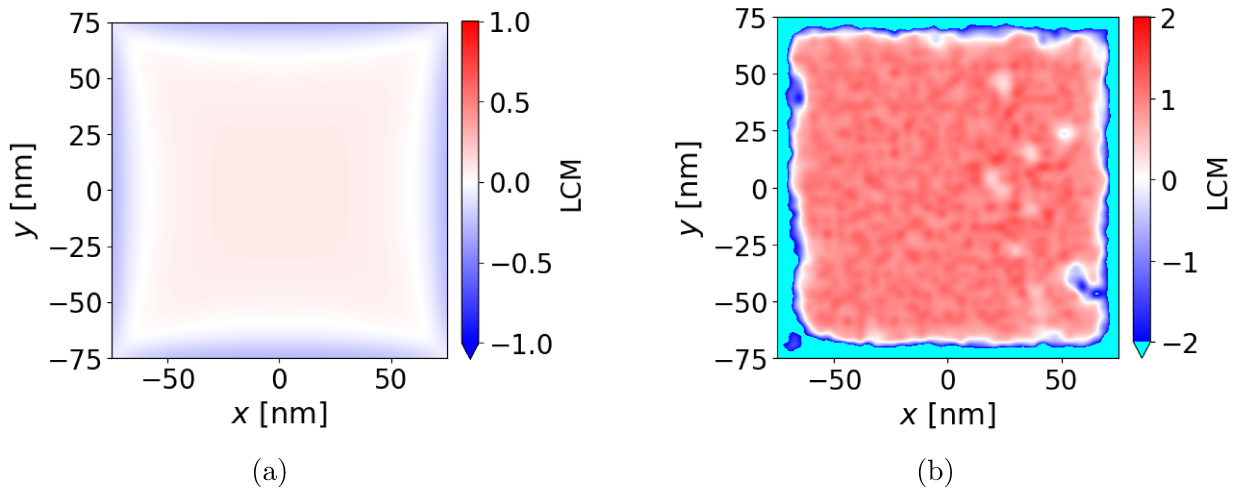


Figura 13 – Mapa de cores do Local Chern number para o BHZ com $L_x = L_y = 150$ nm, parâmetro de rede $a = 3$ nm e $M = 2$ meV com intensidade de desordem $W = 0$ em (a), $W = 500$ meV em (b)

3.3.1 Renormalização do marcador de Chern local

Podemos alcançar o principal objetivo deste trabalho, que é descrever as transições de fase de isolantes topológicos de Anderson. Uma vez que o valor médio do marcador de Chern local no centro dos sistemas se mostra um bom parâmetro de ordem, podemos expressá-lo como função da intensidade de desordem W e encontrar classes de universalidades para renormalização destas curvas como ilustrado na figura 14. Para obter este resultado, construímos o sistema utilizando os recursos da biblioteca `kwant`, conforme discutido na seção 2.2, para que a partir do seu hamiltoniano pudéssemos de fato construir o operador marcador de Chern local, dado pela equação (2.20). É necessário encontrar os autoestados deste hamiltoniano para definir o operador P e calcular o marcador de Chern local, apenas no centro do sistema, para diferentes realizações de desordem e intensidade de desordem. Assim, um método aproximativo como o *KPM*, discutido na seção 2.3.2 apresenta ser mais vantajoso, por ter uma boa precisão, para uma quantidade de momentos apropriados, e ter um custo computacional melhor. Assim nós fizemos, construímos o operador marcador de Chern local pela expansão *KPM* do operador projetor e geramos as curvas de transição de fase, ilustradas na figura 14 (a), nestas fixamos a massa do sistema em $M = 2$ meV e variamos a intensidade de desordem $W = (0, 1200)$ meV para 5

tamanhos diferentes em 400 configurações de desordem, e calculamos a média para estas 400 configurações, que estão representadas pelas curvas de cores com maior intensidade nesta figura, enquanto a suas barras de desvio padrão as contornam com uma intensidade de cores mais fracas. Com estas curvas pode-se observar a variação contínua do marcador de Chern até atingir o platô de $C \approx 1$, mostrando uma transição para uma fase não-trivial, que posteriormente é vencido pela localização em uma queda aproximadamente única para todos os tamanhos considerados. Esta queda, devida a localização de Anderson, ocorre quando W é maior que a largura de banda do sistema. Também é notório que o desvio padrão das realizações aumenta com a intensidade da desordem W , como é de se esperar, pois as variações pontuais do marcador são maiores.

Para enfim obter a renormalização das curvas e encontrar o expoente crítico μ , nós selecionamos o trecho de interesse, que é a região onde há transição e não há a queda devido a localização e minimizamos a função erro $Z(W_c, \mu)$ definida na seção 2.4, que minimiza a sobreposição destas curvas ao se tomar $W \rightarrow W \cdot \ell^{1/\mu}$. Essa minimização pode ser vista no painel (b), que ilustra o mapa deste erro como função dos parâmetros W_c e μ . Nós utilizamos a função erro de peso $P(\omega) = 1$, que teve a melhor sobreposição de curvas, ilustradas no painel (c), cujos valores encontrados foram $\mu = 1.93 \approx 2$ e $W_c = 29.2$ meV. Estes valores são os que também melhor sobrepõe as variâncias destas curvas, conforme expresso no painel (d).

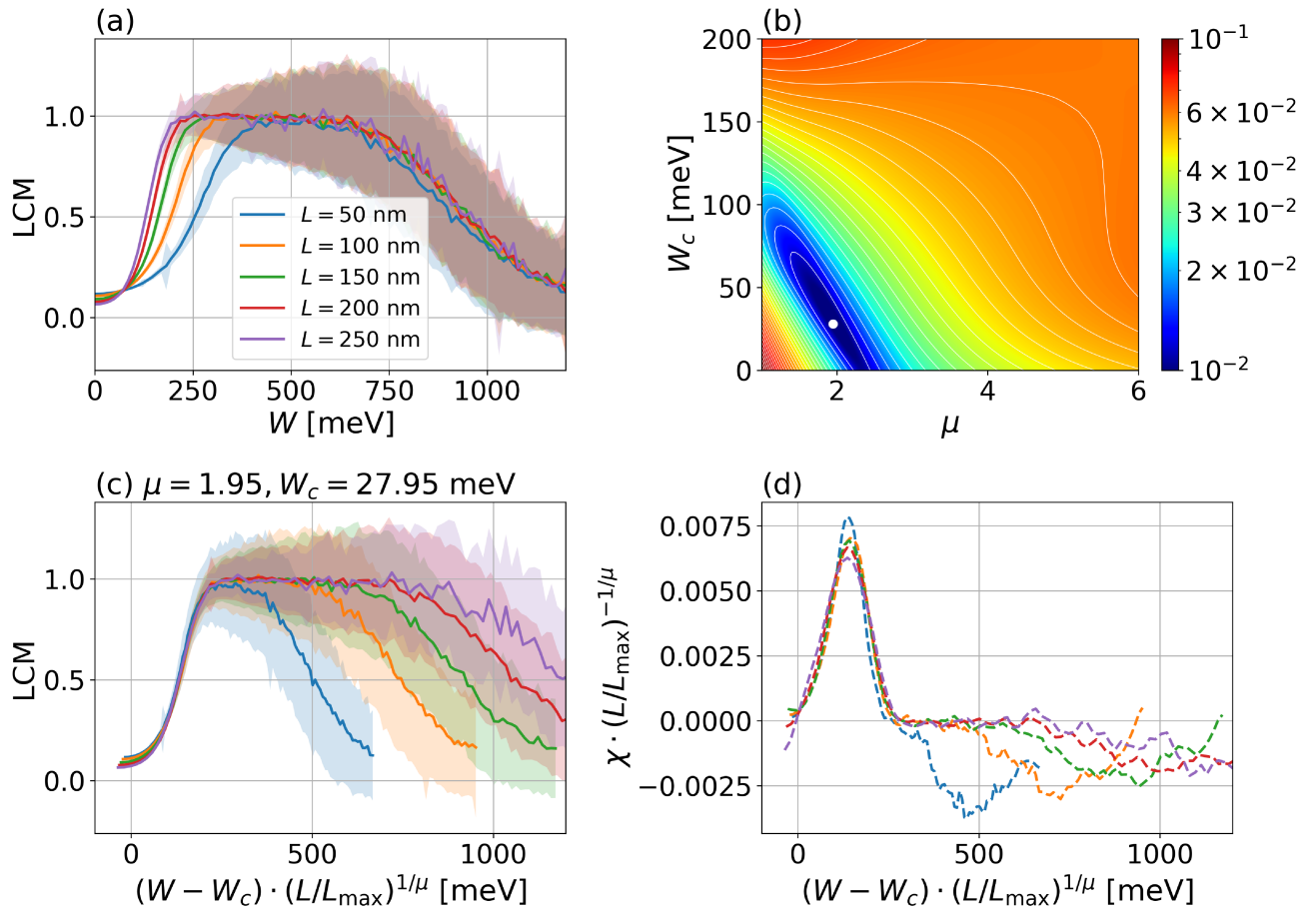


Figura 14 – (a) Local Chern marker como função da intensidade da desordem W , para $L_x = L_y = L$. (b) Função erro $Z(W_c, \mu)$ usada para encontrar os melhores parâmetros de **scaling**. Aqui usamos a função peso $P(\omega) = 1$. (c) Melhor renormalização das curvas em (a) para uma sobreposição universal na região do TAI após a renormalização $W \rightarrow (W - W_c) \cdot (L/L_{\max})^{1/\mu}$. (d) Renormalização da susceptibilidade $\xi = dC/dW$ enfatizando o pico da região TAI.

3.3.2 Valor esperado para o expoente crítico

Observou-se no modelo de Haldane (CAIO et al., 2019) que o marcador local de Chern para sistemas limpos ($W = 0$) possui invariância de escala perante a renormalização $M \rightarrow (M - M_c)L^{1/\nu}$, com expoente crítico $\nu \approx 1$. Na seção seguinte veremos que esta renormalização também procede para o modelo BHZ com o mesmo expoente crítico. Tendo em vista esta renormalização da massa, podemos interpretar o expoente crítico da transição induzida por W da seguinte forma:

Considere que o marcador local de Chern é uma função da massa M , potencial de impurezas W , e dimensão do sistema L , i.e. $C \equiv C(M, W, L)$. De acordo com a primeira aproximação de Born, o efeito de W é causar uma renormalização da massa na forma $\bar{M} = M - \alpha W^2$, sendo que aqui α absorve as constantes omitidas da Eq. 1.10. Consequentemente, agora temos $C \equiv C(\bar{M}, L)$. Por sua vez, a renormalização da massa

mencionada acima nos diz que $C \equiv C(\bar{M}L^{1/\nu})$ é uma função universal de apenas um parâmetro

$$\bar{M}L^{1/\nu} = ML^{1/\nu} - \alpha W^2 L^{1/\nu} = ML^{1/\nu} - \alpha(WL^{1/2\nu})^2. \quad (3.1)$$

Portanto, é razoável esperar que a renormalização de W seja $W \rightarrow WL^{1/\mu}$ com $\mu \approx 2\nu \approx 2$.

Resultado semelhantes foram obtidos para os modelos de Haldane, Kane-Mele, e TCI. De fato, sempre que a primeira aproximação de Born for suficiente, podemos esperar que o expoente crítico da transição TAI seja $\mu \approx 2\nu$, sendo ν o expoente crítico obtido na transição topológica do sistema limpo como função do parâmetro que controla o gap do modelo. Por outro lado, caso a primeira aproximação de Born não seja suficiente, é de se esperar desvios destes valores.

3.4 Diagrama de fases

Já obtemos um diagrama de fase indireto para as transições de fase topológica e topológica de Anderson, ao gerar o gráfico da condutância do modelo BHZ desordenado, com expresso na Fig.11. No entanto, é possível obter um diagrama que investigue diretamente a fase topológica, como foi feito na Figura 15. Nesse diagrama, calculamos o marcador de Chern local médio no centro do sistema, variando a massa M em um intervalo $(-10, 10)$ meV e a intensidade de desordem W em um intervalo $(0, 1200)$ meV. Para obter este resultado, construímos o sistema utilizando a rotina `make_finite_sys`, discutida na seção 2.2, e calculamos o marcador de Chern local por meio do método KPM, abordado na seção 2.3.2.

Na figura 15, os sistemas foram confinados em tamanho, com $L_x = L_y = 50$ nm em (a) e $L_x = L_y = 100$ nm em (b). Nessa figura, é possível observar não somente a transição de fase devido à presença de desordem, mas também a transição de fase de isolantes topológicos devido a própria massa no regime $M < 0$. Nota-se que o ponto de transição M_c se aproxima de $M = 0$ ao se aumentar o tamanho do sistema. Adicionalmente, tanto para $M < 0$ quanto para $M > 0$, é notável que a transição para $C = 1$ também ocorre com o aumento de W . Isto é devido a uma contribuição negativa $\tilde{M} < 0$ da *self-energy* em \bar{M} , que conduz para uma topologia não-trivial $C \approx 1$.

As figuras 15(c) e (d) correspondem a uma renormalização dos respectivos mapas (a) e (b), nos dois domínios da intensidade de desordem $W \rightarrow W \cdot \ell^{1/\mu}$ e da massa $M \rightarrow M \cdot \ell^{1/\nu}$, com $\mu \approx 2$, $\nu \approx 1$ e $\ell = L/L_{max}$. Nessas figuras, observamos uma equivalência das regiões de transição de fase para L diferentes. Isto confirma a universalidade das renormalizações de M e W .

(JANSSEN et al., 2013)

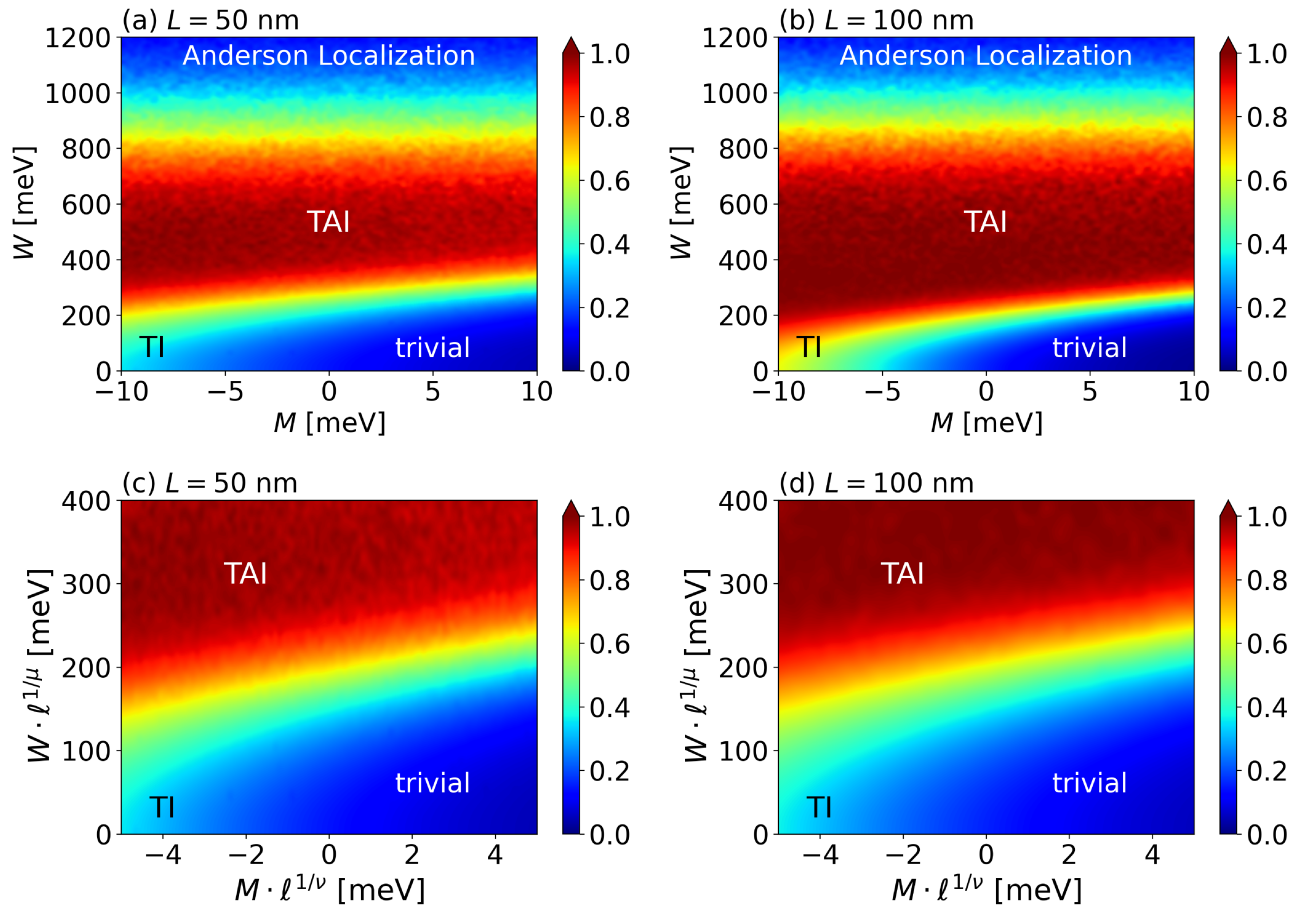


Figura 15 – Diagrama de fase calculado usando o marcador de Chern local C como função da massa M do BHZ e a intensidade da desordem W para (a) $L_x = L_y = 50$ nm e (b) 100 nm. Devido a efeitos de tamanho finito, em $W = 0$ a transição de um isolante topológico para um isolante trivial ocorre em $M < 0$ finito, mas com incremento em L o ponto de transição se aproxima para $M \rightarrow 0_-$. Para W finito, a massa efetiva induzida pela desordem $M < 0$ conduz para a fase TAI com $C \approx 1$, enquanto que para W grandes, o sistema atinge um fase de localização trivial de Anderson. (c-d) Renormalização dos painéis anteriores, enfatizando as transições trivial/topológica para TAI. Aqui $\ell = L/L_{max}$, $\nu \approx 1$ para a renormalização da massa, e $\mu \approx 2$ para a renormalização do W . Após esta renormalização, os dados em (c) e (d) definem uma função universal para a transição de fase.

3.5 Marcador local de Chern: problemas na mudança de domínio

Na demonstração do marcador local de Chern, vimos que uma mudança de domínio é introduzida ao trocar o projetor P definido originalmente para sistemas com invariância translacional por uma versão definida para sistemas finitos. Ou seja, a seguinte mudança foi feita de forma *ad hoc*,

$$P = \sum_n^{\text{oc.}} \sum_{\mathbf{k}} |\psi_{n,\mathbf{k}}\rangle \langle \psi_{n,\mathbf{k}}| \rightarrow \sum_j |\psi_j\rangle \langle \psi_j|. \quad (3.2)$$

Esta simples mudança, apesar de parecer ter justificativa física, traz consequências intrigantes. Primeiro, lembremos que em um sistema periódico, o número de Chern é $C = 0$ no regime trivial e $C = 1$ no regime topológico. Por sua vez, C pode ser escrito em termos do marcador local como $C = \frac{1}{N_\infty} \sum_{\mathbf{R}} \mathcal{C}(\mathbf{R})$, sendo $\mathcal{C}(\mathbf{R})$ o marcador local

$$\mathcal{C}(\mathbf{R}) = \frac{4\pi}{A_c} \text{Im} \sum_{\alpha} \int_{\mathbf{R}} d^2r \langle \mathbf{r}, \alpha | PxPyP | \mathbf{r}, \alpha \rangle. \quad (3.3)$$

Como visto nas figuras apresentada, nessa dissertação, tipicamente se obtém $\mathcal{C}(\mathbf{R}) \approx 1$ na região central, e $\mathcal{C}(\mathbf{R}) < 0$ nas bordas, tal que a soma sobre \mathbf{R} sempre induz $C \equiv 0$. De fato, a expressão (3.3) de $\mathcal{C}(\mathbf{R})$ pode ser reescrita na forma do traço parcial de um comutador usando que $\text{Im} Z = (Z - Z^*)/2i$. Assim,

$$\mathcal{C}(\mathbf{R}) = -\frac{2\pi i}{A_c} \sum_{\alpha} \int_{\mathbf{R}} d^2r \langle \mathbf{r}, \alpha | PxPyP - PyPxP | \mathbf{r}, \alpha \rangle, \quad (3.4)$$

$$= -\frac{2\pi i}{A_c} \sum_{\alpha} \int_{\mathbf{R}} d^2r \langle \mathbf{r}, \alpha | [PxP, PyP] | \mathbf{r}, \alpha \rangle, \quad (3.5)$$

$$= -\frac{2\pi i}{A_c} \text{tr}_{\mathbf{R}} [PxP, PyP], \quad (3.6)$$

onde usamos $P^2 = P$ e definimos $\text{tr}_{\mathbf{R}} = \sum_{\alpha} \int_{\mathbf{R}} d^2r$. Por sua vez a expressão de C se torna o traço completo do comutador, mas $\text{Tr}[A, B] \equiv 0$. Consequentemente, isto implica que $C \equiv 0$ sempre, mesmo para um sistema topológico.

Este aparente paradoxo é uma consequência da mudança de domínios de um sistema sem fronteira com $-\infty < (x, y) < \infty$ para um sistema finito e discreto com fronteiras nas quais a função de onda vai a zero. Note que a Eq. (3.6) é exata para sistemas periódicos com P na sua forma original em termos de $|\psi_{n,\mathbf{k}}\rangle$. Neste caso $\mathcal{C}(\mathbf{R}) = C$ é constante, independente de \mathbf{R} e recupera o valor correto de $C = 0$ (trivial) ou 1 (topológico). Porém, neste caso as matrizes PxP e PyP são infinitas e contínuas, enquanto que na formulação aproximada por P na forma de $|\psi_j\rangle$, as matrizes são finitas e discretas. De fato, o traço tem propriedades distintas nestes dois regimes.

Ainda não temos uma solução concreta para este aparente paradoxo, mas sabemos que algo semelhante ocorre para representações matriciais da relação de comutação canônica $[x, p] = i\hbar$ (SANTHANAM; TEKUMALLA, 1976).

4 Conclusões

Nesta dissertação de mestrado, investigamos a invariância de escala nas transições de fase topológicas em modelos para invariantes topológicos de Anderson (TAI). Para tanto, utilizamos o pacote python Kwant para implementar o Hamiltoniano BHZ com a adição do potencial de impurezas aleatórias de Anderson, e calculamos diversas propriedades que caracterizam suas propriedades topológicas. Primeiro, partindo de um sistema no regime trivial, reproduzimos os resultados das referências (LI et al., 2009; GROTH et al., 2009), verificando a transição de fase na condutância, que para valores suficientemente altos da intensidade do potencial de impurezas W apresenta platôs quantizados na fase TAI, indicando a existência de canais de transporte unidimensionais nas bordas. Em seguida, calculamos o marcador de Chern local \mathcal{C} via aproximação do *Kernel Polynomial Method* para sistemas grandes a fim de investigar propriedades de invariância de escala em \mathcal{C} para diferentes tamanhos $L \times L$ do cristal. Identificamos que estes sistemas obedecem a invariância de escala na forma $\mathcal{C} \equiv \mathcal{C}([W - W_c] \cdot L^{1/\mu})$, tal que curvas de transição \mathcal{C} versus W colapsam em uma curva universal cpm um expoente crítico $\mu \approx 2$.

O cálculo da densidade de estados local na borda de uma nanofita mostra que para W finito na fase TAI, o sistema apresenta estados de borda topológicos, mas com características de localização de Anderson superpostas. Calculamos as funções de onda neste regime para ilustrar os estados de borda do sistema. Para complementar a caracterização do sistema, utilizamos o marcador local \mathcal{C} para obter o diagrama de fases como função da massa M e da intensidade das impurezas W . Para $W = 0$ reproduzimos a transição de fase topológica usual como função da massa M . A partir do regime trivial e aumentando W , vemos que \mathcal{C} se aproxima de 1, indicando a fase TAI. Por fim, para qualquer M e valores altos de W identificamos o surgimento da localização de Anderson trivial.

Resultados preliminares, omitidos nesta dissertação, mostram ainda comportamentos semelhantes para outros modelos de isolantes topológicos: modelos de Haldane, Kane-Mele, isolantes topológicos cristalinos, e até mesmo *higher-order topological insulators*.

Os resultados apresentados nesta dissertação, apontam para uma **pergunta em aberto** para investigar. Como podemos utilizar o expoente crítico μ para caracterizar classes de universalidade em transições topológicas (CHEN, 2016)? Na referência (CAIO et al., 2019) observou-se o expoente crítico $\nu \approx 1$ na transição como função da do potencial de subrede $M \rightarrow (M - M_c)L^{1/\nu}$ do modelo de Haldane. Já em (VARJAS et al., 2020), obteve-se expoente crítico $\nu \approx 1$ na transição do material $\text{Pb}_{1-x}\text{Sn}_x\text{Te}$ como função da concentração $x \rightarrow (x - x_c)L^{1/\nu}$. Aqui, obtivemos $\mu \approx 2$ na transformação $W \rightarrow (W - W_c) \cdot L^{1/\mu}$ para todos os casos estudados.

Apêndices

APÊNDICE A – Renormalização da massa devido à desordem: self-energy

Neste apêndice iremos demonstrar as expressões das renormalizações da massa M e do potencial químico μ ,

$$\bar{M} = M + \text{Re} \Sigma_z \approx M - \frac{W^2 a^2}{48\pi\hbar^2} \frac{B}{B^2 - D^2} \ln \left| \frac{B^2 - D^2}{E_F^2 - M^2} \left(\frac{\pi\hbar}{a} \right)^4 \right|, \quad (\text{A.1})$$

$$\bar{\mu} = E_F - \text{Re} \Sigma_0 \approx E_F - \frac{W^2 a^2}{48\pi\hbar^2} \frac{D}{B^2 - D^2} \ln \left| \frac{B^2 - D^2}{E_F^2 - M^2} \left(\frac{\pi\hbar}{a} \right)^4 \right|. \quad (\text{A.2})$$

referentes ao hamiltoniano BHZ,

$$H_{\text{BHZ}} = \begin{pmatrix} H_\uparrow & 0 \\ 0 & H_\downarrow \end{pmatrix} \quad (\text{A.3})$$

$$H_\uparrow = A(k_x \sigma_x - k_y \sigma_y) + (M + Bk^2) \sigma_z + (Dk^2 + C) \sigma_0. \quad (\text{A.4})$$

Esta renormalização é devido a inclusão de desordem do tipo Anderson no sistema, que pode ser expressada através da *self-energy*

$$\Sigma^R = \frac{1}{12} U_0^2 (a/2\pi)^2 \int_{\text{BZ}} G^R(\mathbf{k}) d^2k, \quad (\text{A.5})$$

$$G^R(\mathbf{k}) = \left[E_F - H_s(\mathbf{k}) - \Sigma^R + i0^+ \right]^{-1}. \quad (\text{A.6})$$

Esta é uma expressão auto-consistente, pois tem Σ^R depende dele mesmo. Para contornar este problema, usaremos a primeira aproximação de Born, que consiste em “truncar” o integrando em $[E_f + i0^+ - H_s(\mathbf{k})]^{-1}$, sendo este matricialmente expresso por

$$[E_f + i0^+ - H_s(\mathbf{k})]^{-1} = \frac{1}{F} \begin{pmatrix} -[m + k^2(B - D) + E_f] & -Ake^{-i\phi} \\ -Ake^{i\phi} & m + k^2(B + D) - E_f \end{pmatrix}, \quad (\text{A.7})$$

com $F = k^2 \alpha^2 + (m + k^2(B + D) - E_f)(m + k^2(B - D) + E_f)$. Aqui, expressamos o momento em coordenadas polares $\mathbf{k} = (k \cos \phi, k \sin \phi)$. A parte angular da integral na Eq. A.5 anula os termos fora da diagonal, e resulta em

$$\int_{\text{BZ}} G^R(\mathbf{k}) d^2k = \pi \int_0^{h/a} \frac{(\bar{E}_F - Dk^2) \sigma_0 + (\bar{m} + Bk^2) \sigma_z}{k^4 (D^2 - B^2) - k^2 (A^2 + 2D\bar{E}_F + 2B\bar{m}) + \bar{m}^2 - \bar{E}_F^2} k dk \quad (\text{A.8})$$

Apesar de parecer complicada, a integral em k acima possui solução exata. Esta pode ser expressa na forma

$$\int_0^X dx \frac{ax + b}{cx^2 + dx + e} = \frac{a}{2c} \log \left(\frac{cX^2 + dX + e}{e} \right) + \frac{(2bc - ad)}{c\sqrt{4ce - d^2}} \times \left[\arctan \left(\frac{2cX + d}{\sqrt{4ce - d^2}} \right) - \arctan \left(\frac{d}{\sqrt{4ce - d^2}} \right) \right]. \quad (\text{A.9})$$

Considerando-se apenas o termo dominante no limite $X \rightarrow \infty$, e o termo imaginário de ordem dominante, temos

$$\int_0^X dx \frac{ax + b}{cx^2 + dx + e} \approx \frac{a}{2c} \log \left(\frac{cX^2}{e} \right) - \frac{\pi}{2} \frac{(2bc - ad)}{c\sqrt{4ce - d^2}}. \quad (\text{A.10})$$

Substituindo a integral aproximada na equação da *self-energy* no limite da primeira aproximação de Born, obtemos

$$\text{Re}\Sigma_z = -\frac{1}{12} U_0^2 a^2 / 4\pi \frac{B}{B^2 - D^2} \log \left(\frac{B^2 - D^2}{E_F^2 - m^2} (\hbar/a)^2 \right) \quad (\text{A.11})$$

$$\text{Re}\Sigma_0 = -\frac{1}{12} U_0^2 a^2 / 4\pi \frac{D}{B^2 - D^2} \log \left(\frac{B^2 - D^2}{E_F^2 - m^2} (\hbar/a)^2 \right) \quad (\text{A.12})$$

$$\text{Im}\Sigma_z = \frac{1}{12} U_0^2 a^2 / 8 \frac{m(A^2 + 2mB + 2E_F D) + 2B(B^2 - D^2)}{(A^2 + mB + E_F D)(B^2 - D^2)} \quad (\text{A.13})$$

$$\text{Im}\Sigma_0 = \frac{1}{12} U_0^2 a^2 / 8 \frac{E_F(A^2 + 2mB + 2E_F D) + 2D(B^2 - D^2)}{(A^2 + mB + E_F D)(B^2 - D^2)}. \quad (\text{A.14})$$

As partes reais da *self-energy* são negativas e resultam nas correções da massa e potencial químico mencionadas acima. As partes imaginárias são positivas, como esperado para as funções retardadas, e induzem um alargamento da função espectral.

APÊNDICE B – Elemento de matriz do operador posição

Na dedução do marcador local de Chern feita na Seção 2.3, seguindo (BIANCO; RESTA, 2011), utilizamos a identidade

$$\langle \psi_{n',\mathbf{k}'} | \mathbf{r} | \psi_{n,\mathbf{k}} \rangle = i\delta_{\mathbf{k}',\mathbf{k}} \langle u_{n',\mathbf{k}'} | \nabla_{\mathbf{k}} u_{n,\mathbf{k}} \rangle \text{ para } n' \neq n. \quad (\text{B.1})$$

A demonstração desta identidade encontra-se no livro (BLOUNT, 1962), mas para melhor acessibilidade, reproduzimos ela aqui.

Seja $\psi_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ a função de onda de um cristal periódico na forma do teorema de Bloch

$$\psi_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \frac{e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}}{\sqrt{N_c}} u_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r}), \quad (\text{B.2})$$

onde de normalização N_c corresponde ao número de células unitárias do sistema, tal que as normalizações de $\psi_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ e da parte periódica $u_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ são

$$\int_0 |u_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r})|^2 d^3r = 1, \quad (\text{B.3})$$

$$\int_{\infty} |\psi_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r})|^2 d^3r = 1, \quad (\text{B.4})$$

onde o índice 0 indica que a integral é feita sobre uma célula unitária e o índice ∞ indica que a integral é feita sobre todo o cristal.

Considerando

$$\nabla_{\mathbf{k}} \psi_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = i\mathbf{r} \frac{e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}}{\sqrt{N_c}} u_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r}) + \frac{e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}}{\sqrt{N_c}} \nabla_{\mathbf{k}} u_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r}), \quad (\text{B.5})$$

e fazendo o produto escalar temos

$$\begin{aligned} -i\nabla_{\mathbf{k}} \langle \psi_{n',\mathbf{k}'} | \psi_{n,\mathbf{k}} \rangle &= \frac{1}{N_c} \int_{\infty} e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\cdot\mathbf{r}} u_{n',\mathbf{k}'}(\mathbf{r}) \mathbf{r} u_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r}) d^3r \\ &\quad - i \frac{1}{N_c} \int_{\infty} e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\cdot\mathbf{r}} u_{n',\mathbf{k}'}(\mathbf{r}) \nabla_{\mathbf{k}} u_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r}) d^3r. \end{aligned} \quad (\text{B.6})$$

O primeiro termo do lado direito da equação acima é simplesmente $\langle \psi_{n',\mathbf{k}'} | \mathbf{r} | \psi_{n,\mathbf{k}} \rangle$. Para simplificar o segundo termo, note que ele pode ser escrito como $N_c^{-1} \int_{\infty} e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\cdot\mathbf{r}} f(\mathbf{r}) d^3r$, onde $f(\mathbf{r})$ é uma função periódica. Assim, podemos quebrar a integral em um somatório para todas as N_c células unitárias,

$$\int_{\infty} \frac{e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\cdot\mathbf{r}}}{N_c} f(\mathbf{r}) d^3r = \sum_{\mathbf{R}} \int_{\mathbf{R}} \frac{e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\cdot\mathbf{r}}}{N_c} f(\mathbf{r}) d^3r = \left[\sum_{\mathbf{R}} \frac{e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\cdot\mathbf{R}}}{N_c} \right] \int_0 e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\cdot\mathbf{r}} f(\mathbf{r}) d^3r, \quad (\text{B.7})$$

onde o índice \mathbf{R} na integral indica que esta é feita na célula unitária deslocada em \mathbf{R} da origem. Na última expressão fizemos a mudança de variáveis $\mathbf{r} \rightarrow \mathbf{r} + \mathbf{R}$, tal que a integral sempre se dá na célula central (índice 0). Consequentemente, a somatória entre colchetes pode ser trabalhada separadamente, obtendo-se

$$\sum_{\mathbf{R}} \frac{e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\cdot\mathbf{R}}}{N_c} = \delta_{\mathbf{k}',\mathbf{k}}. \quad (\text{B.8})$$

Com isso, o último termo da Eq. B.6 se simplifica

$$-i \frac{1}{N_c} \int_{\infty} e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\cdot\mathbf{r}} u_{n',\mathbf{k}'}(\mathbf{r}) \nabla_{\mathbf{k}} u_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r}) d^3 r = -i \delta_{\mathbf{k}',\mathbf{k}} \int_0 u_{n',\mathbf{k}'}(\mathbf{r}) \nabla_{\mathbf{k}} u_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r}) d^3 r, \quad (\text{B.9})$$

$$= -i \delta_{\mathbf{k}',\mathbf{k}} \langle u_{n',\mathbf{k}'} | \nabla_{\mathbf{k}} | u_{n,\mathbf{k}} \rangle. \quad (\text{B.10})$$

Retornando para a Eq. B.6, temos

$$-i \nabla_{\mathbf{k}} \langle \psi_{n',\mathbf{k}'} | \psi_{n\mathbf{k}} \rangle = \langle \psi_{n',\mathbf{k}'} | \mathbf{r} | \psi_{n\mathbf{k}} \rangle - i \delta_{\mathbf{k}',\mathbf{k}} \langle u_{n',\mathbf{k}'} | \nabla_{\mathbf{k}} | u_{n,\mathbf{k}} \rangle. \quad (\text{B.11})$$

Por fim, notamos que do lado esquerdo $\langle \psi_{n',\mathbf{k}'} | \psi_{n\mathbf{k}} \rangle = \delta_{\mathbf{k}',\mathbf{k}} \delta_{n',n}$ (a demonstração segue da Eq. B.7). Portanto, para $n' \neq n$ obtemos a identidade

$$\langle \psi_{n',\mathbf{k}'} | \mathbf{r} | \psi_{n\mathbf{k}} \rangle = i \delta_{\mathbf{k}',\mathbf{k}} \langle u_{n',\mathbf{k}'} | \nabla_{\mathbf{k}} | u_{n,\mathbf{k}} \rangle \text{ para } n' \neq n. \quad (\text{B.12})$$

Referências

- ACHARYYA, M. NONEQUILIBRIUM PHASE TRANSITIONS IN MODEL FERROMAGNETS: A REVIEW. *International Journal of Modern Physics C*, World Scientific Pub Co Pte Lt, v. 16, n. 11, p. 1631–1670, nov. 2005. Disponível em: <<https://doi.org/10.1142/s0129183105008266>>.
- ANDERSON, P. W. Absence of diffusion in certain random lattices. *Physical Review*, American Physical Society (APS), v. 109, n. 5, p. 1492–1505, mar. 1958. Disponível em: <<https://doi.org/10.1103/physrev.109.1492>>.
- BASTARD, G. *Wave Mechanics Applied to Semiconductor Heterostructures*. Paris: Les Editions de Physique, 1988.
- BENDIAS, K. et al. High Mobility HgTe Microstructures for Quantum Spin Hall Studies. *Nano Letters*, American Chemical Society (ACS), v. 18, n. 8, p. 4831–4836, jul. 2018. Disponível em: <<https://doi.org/10.1021/acs.nanolett.8b01405>>.
- BERNEVIG, B. A.; HUGHES, T. L.; ZHANG, S.-C. Quantum spin Hall effect and topological phase transition in HgTe quantum wells. *Science*, American Association for the Advancement of Science (AAAS), v. 314, n. 5806, p. 1757–1761, dez. 2006. Disponível em: <<https://doi.org/10.1126/science.1133734>>.
- BERNEVIG, B. A.; ZHANG, S.-C. Quantum spin Hall effect. *Physical Review Letters*, American Physical Society (APS), v. 96, n. 10, mar. 2006. Disponível em: <<https://doi.org/10.1103/physrevlett.96.106802>>.
- BIANCO, R.; RESTA, R. Mapping topological order in coordinate space. *Physical Review B*, APS, v. 84, n. 24, p. 241106, 2011.
- BLOUNT, E. Formalisms of Band Theory. In: *Solid State Physics*. Elsevier, 1962. p. 305–373. Disponível em: <[https://doi.org/10.1016/s0081-1947\(08\)60459-2](https://doi.org/10.1016/s0081-1947(08)60459-2)>.
- BREUNIG, O.; ANDO, Y. Opportunities in topological insulator devices. *Nature Reviews Physics*, Springer Science and Business Media LLC, v. 4, n. 3, p. 184–193, dez. 2021. Disponível em: <<https://doi.org/10.1038/s42254-021-00402-6>>.
- BRUUS, H.; FLENSBERG, K. *Many-body quantum field theory in condensed matter physics: an introduction*. United Kingdom: Oxford University Press, 2003.
- CAIO, M. D. et al. Topological marker currents in Chern insulators. *Nature Physics*, Nature Publishing Group, v. 15, n. 3, p. 257–261, 2019.
- CANDIDO, D. R. *Relaxação de spin via D'yakonov-Perel' em poços quânticos com acoplamento spin-órbita intersub-banda*. Tese (Doutorado) — USP, 2013. Disponível em: <<https://doi.org/10.11606/d.76.2013.tde-25092013-161711>>.
- CHEN, W. Scaling theory of topological phase transitions. *Journal of Physics: Condensed Matter*, IOP Publishing, v. 28, n. 5, p. 055601, jan. 2016. Disponível em: <<https://doi.org/10.1088/0953-8984/28/5/055601>>.

CHEN, W. Universal topological marker. *Physical Review B*, American Physical Society (APS), v. 107, n. 4, jan. 2023. Disponível em: <<https://doi.org/10.1103/physrevb.107.045111>>.

DATTA, S. *Electronic Transport in Mesoscopic Systems*. [S.l.]: Cambridge University Press, 1995. (Cambridge Studies in Semiconductor Physics and Microelectronic Engineering).

DATTA, S. *Electronic Transport in Mesoscopic Systems*. [S.l.]: Cambridge University Press, 1997. v. 3.

DIRAC, P. A. M. The quantum theory of the electron. *Proceedings of the Royal Society of London. Series A, Containing Papers of a Mathematical and Physical Character*, The Royal Society London, v. 117, n. 778, p. 610–624, 1928.

FAN, Y.; WANG, K. L. Spintronics Based on Topological Insulators. *SPIN*, World Scientific Pub Co Pte Lt, v. 06, n. 02, p. 1640001, jun. 2016. Disponível em: <<https://doi.org/10.1142/s2010324716400014>>.

FU, L. Topological crystalline insulators. *Physical Review Letters*, American Physical Society (APS), v. 106, n. 10, mar. 2011. Disponível em: <<https://doi.org/10.1103/physrevlett.106.106802>>.

FU, L.; KANE, C. L. Time reversal polarization and a adiabatic spin pump. *Physical Review B*, American Physical Society (APS), v. 74, n. 19, nov. 2006. Disponível em: <<https://doi.org/10.1103/physrevb.74.195312>>.

FU, L.; KANE, C. L. Topological insulators with inversion symmetry. *Physical Review B*, American Physical Society (APS), v. 76, n. 4, jul. 2007. Disponível em: <<https://doi.org/10.1103/physrevb.76.045302>>.

FU, L.; KANE, C. L. Topological insulators with inversion symmetry. *Physical Review B*, American Physical Society (APS), v. 76, n. 4, jul. 2007. Disponível em: <<https://doi.org/10.1103/physrevb.76.045302>>.

FÜNFHAUS, A.; KOPP, T.; LETTL, E. Winding vectors of topological defects: multiband chern numbers. *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical*, IOP Publishing, v. 55, n. 40, p. 405202, set. 2022. Disponível em: <<https://doi.org/10.1088/1751-8121/ac8ef7>>.

GROTH, C. W. et al. Theory of the topological Anderson insulator. *Physical Review Letters*, American Physical Society (APS), v. 103, n. 19, nov. 2009. Disponível em: <<https://doi.org/10.1103/physrevlett.103.196805>>.

GROTH, C. W. et al. Kwant: a software package for quantum transport. *New Journal of Physics*, IOP Publishing, v. 16, n. 6, p. 063065, jun 2014.

GUAN, C.; GUAN, X. A brief introduction to Anderson localization. *Lecture Notes, MIT Department of Physics*, 2019.

HALDANE, F. D. M. Model for a quantum Hall effect without landau levels: Condensed-matter realization of the "parity anomaly". *Physical Review Letters*, American Physical Society (APS), v. 61, n. 18, p. 2015–2018, out. 1988. Disponível em: <<https://doi.org/10.1103/physrevlett.61.2015>>.

HASTINGS, M. B.; LORING, T. A. Almost commuting matrices, localized wannier functions, and the quantum Hall effect. *Journal of Mathematical Physics*, AIP Publishing, v. 51, n. 1, p. 015214, jan. 2010. Disponível em: <<https://doi.org/10.1063/1.3274817>>.

HASTINGS, M. B.; LORING, T. A. Topological insulators and c^* -algebras: Theory and numerical practice. *Annals of Physics*, Elsevier BV, v. 326, n. 7, p. 1699–1759, jul. 2011. Disponível em: <<https://doi.org/10.1016/j.aop.2010.12.013>>.

HATSUGAI, Y. Chern number and edge states in the integer quantum hall effect. *Physical Review Letters*, American Physical Society (APS), v. 71, n. 22, p. 3697–3700, nov. 1993. Disponível em: <<https://doi.org/10.1103/physrevlett.71.3697>>.

HE, M.; SUN, H.; HE, Q. L. Topological insulator: Spintronics and quantum computations. *Frontiers of Physics*, Springer Science and Business Media LLC, v. 14, n. 4, maio 2019. Disponível em: <<https://doi.org/10.1007/s11467-019-0893-4>>.

JANSSEN, T. J. B. M. et al. Quantum resistance metrology using graphene. *Reports on Progress in Physics*, IOP Publishing, v. 76, n. 10, p. 104501, out. 2013. Disponível em: <<https://doi.org/10.1088/0034-4885/76/10/104501>>.

JIANG, H. et al. Numerical study of the topological anderson insulator in hgte/cdte quantum wells. *Phys. Rev. B*, American Physical Society, v. 80, p. 165316, Oct 2009. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.80.165316>>.

KANE, C. L.; MELE, E. J. Topological order and the quantum spin Hall effect. *Physical Review Letters*, American Physical Society (APS), v. 95, n. 14, set. 2005. Disponível em: <<https://doi.org/10.1103/physrevlett.95.146802>>.

KANE, C. L.; MELE, E. J. Topological order and the quantum spin Hall effect. *Physical Review Letters*, American Physical Society (APS), v. 95, n. 14, set. 2005. Disponível em: <<https://doi.org/10.1103/physrevlett.95.146802>>.

KANE, C. L.; MELE, E. J. Z₂ topological order and the quantum spin Hall effect. *Physical Review Letters*, American Physical Society (APS), v. 95, n. 14, set. 2005. Disponível em: <<https://doi.org/10.1103/physrevlett.95.146802>>.

KAUFMANN, R. M.; LI, D.; WEHEFRITZ-KAUFMANN, B. Notes on topological insulators. *Reviews in Mathematical Physics*, World Scientific Pub Co Pte Lt, v. 28, n. 10, p. 1630003, nov. 2016. Disponível em: <<https://doi.org/10.1142/s0129055x1630003x>>.

KIM, T.-Y.; CHO, S.-B. Predicting residential energy consumption using CNN-LSTM neural networks. *Energy*, Elsevier BV, v. 182, p. 72–81, set. 2019. Disponível em: <<https://doi.org/10.1016/j.energy.2019.05.230>>.

KITAEV, A. Anyons in an exactly solved model and beyond. *Annals of Physics*, Elsevier BV, v. 321, n. 1, p. 2–111, jan. 2006. Disponível em: <<https://doi.org/10.1016/j.aop.2005.10.005>>.

KITTEL, C. Physical theory of ferromagnetic domains. *Reviews of Modern Physics*, American Physical Society (APS), v. 21, n. 4, p. 541–583, out. 1949. Disponível em: <<https://doi.org/10.1103/revmodphys.21.541>>.

- KLEIN, M. J. On a degeneracy theorem of Kramers. *American Journal of Physics*, American Association of Physics Teachers (AAPT), v. 20, n. 2, p. 65–71, fev. 1952. Disponível em: <<https://doi.org/10.1119/1.1933118>>.
- KLITZING, K. v.; DORDA, G.; PEPPER, M. New method for high-accuracy determination of the fine-structure constant based on quantized Hall resistance. *Physical Review Letters*, American Physical Society (APS), v. 45, n. 6, p. 494–497, ago. 1980. Disponível em: <<https://doi.org/10.1103/physrevlett.45.494>>.
- KONIG, M. et al. Quantum spin Hall insulator state in HgTe quantum wells. *Science*, American Association for the Advancement of Science (AAAS), v. 318, n. 5851, p. 766–770, nov. 2007. Disponível em: <<https://doi.org/10.1126/science.1148047>>.
- LAUGHLIN, R. B. Quantized Hall conductivity in two dimensions. *Physical Review B*, American Physical Society (APS), v. 23, n. 10, p. 5632–5633, maio 1981. Disponível em: <<https://doi.org/10.1103/physrevb.23.5632>>.
- LI, J. et al. Topological Anderson insulator. *Physical Review Letters*, American Physical Society (APS), v. 102, n. 13, abr. 2009. Disponível em: <<https://doi.org/10.1103/physrevlett.102.136806>>.
- LIN, X. et al. Two-dimensional spintronics for low-power electronics. *Nature Electronics*, Springer Science and Business Media LLC, v. 2, n. 7, p. 274–283, jul. 2019. Disponível em: <<https://doi.org/10.1038/s41928-019-0273-7>>.
- LORING, T. A.; HASTINGS, M. B. Disordered topological insulators via c^* -algebras. *EPL (Europhysics Letters)*, IOP Publishing, v. 92, n. 6, p. 67004, dez. 2010. Disponível em: <<https://doi.org/10.1209/0295-5075/92/67004>>.
- LÜBECK, S. UNIVERSAL SCALING BEHAVIOR OF NON-EQUILIBRIUM PHASE TRANSITIONS. *International Journal of Modern Physics B*, World Scientific Pub Co Pte Lt, v. 18, n. 31n32, p. 3977–4118, dez. 2004. Disponível em: <<https://doi.org/10.1142/s0217979204027748>>.
- LUNCZER, L. et al. Approaching Quantization in Macroscopic Quantum Spin Hall Devices through Gate Training. *Physical Review Letters*, American Physical Society (APS), v. 123, n. 4, jul. 2019. Disponível em: <<https://doi.org/10.1103/physrevlett.123.047701>>.
- MAZUMDER, K.; SHIRAGE, P. M. A brief review of Bi_2Se_3 based topological insulator: From fundamentals to applications. *Journal of Alloys and Compounds*, Elsevier BV, v. 888, p. 161492, dez. 2021. Disponível em: <<https://doi.org/10.1016/j.jallcom.2021.161492>>.
- MOTT, N. F. Metal-insulator transition. *Rev. Mod. Phys.*, American Physical Society, v. 40, p. 677–683, Oct 1968. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/RevModPhys.40.677>>.
- ORTH, C. P. et al. The topological Anderson insulator phase in the Kane-Mele model. *Scientific Reports*, Springer Science and Business Media LLC, v. 6, n. 1, abr. 2016. Disponível em: <<https://doi.org/10.1038/srep24007>>.
- QI, X.-L.; ZHANG, S.-C. Topological insulators and superconductors. *Reviews of Modern Physics*, American Physical Society (APS), v. 83, n. 4, p. 1057–1110, out. 2011. Disponível em: <<https://doi.org/10.1103/revmodphys.83.1057>>.

- RYDER, L. H. The optical Berry phase and the Gauss-Bonnet theorem. *European Journal of Physics*, IOP Publishing, v. 12, n. 1, p. 15–18, jan. 1991. Disponível em: <<https://doi.org/10.1088/0143-0807/12/1/003>>.
- SAKURAI, J. J. *Modern quantum mechanics; rev. ed.* Reading, MA: Addison-Wesley, 1994.
- SANTHANAM, T. S.; TEKUMALLA, A. R. Quantum mechanics in finite dimensions. *Foundations of Physics*, Springer Science and Business Media LLC, v. 6, n. 5, p. 583–587, out. 1976. Disponível em: <<https://doi.org/10.1007/bf00715110>>.
- SCHINDLER, F. et al. Higher-order topological insulators. *Science Advances*, American Association for the Advancement of Science (AAAS), v. 4, n. 6, jun. 2018. Disponível em: <<https://doi.org/10.1126/sciadv.aat0346>>.
- STANLEY, H. E. *Phase transitions and critical phenomena*. [S.l.]: Clarendon Press, Oxford, 1971. v. 7.
- SYED, R. *Quantum Hall effect to Topological Insulators*. Tese (Doutorado), 12 2014.
- SYKES, J.; BARNETT, R. Local topological markers in odd dimensions. *Physical Review B*, American Physical Society (APS), v. 103, n. 15, abr. 2021. Disponível em: <<https://doi.org/10.1103/physrevb.103.155134>>.
- TEO, J. C. Y.; FU, L.; KANE, C. L. Surface states and topological invariants in three-dimensional topological insulators: Application to. *Physical Review B*, American Physical Society (APS), v. 78, n. 4, jul. 2008. Disponível em: <<https://doi.org/10.1103/physrevb.78.045426>>.
- THOULESS, D. J. et al. Quantized Hall conductance in a two-dimensional periodic potential. *Physical Review Letters*, American Physical Society (APS), v. 49, n. 6, p. 405–408, ago. 1982. Disponível em: <<https://doi.org/10.1103/physrevlett.49.405>>.
- TONIOLO, D. On the Bott index of unitary matrices on a finite torus. *Letters in Mathematical Physics*, Springer Science and Business Media LLC, v. 112, n. 6, dez. 2022. Disponível em: <<https://doi.org/10.1007/s11005-022-01602-6>>.
- VARJAS, D. et al. Computation of topological phase diagram of disordered $\text{Pb}_{1-x}\text{Sn}_x\text{Te}$ using the kernel polynomial method. *Physical Review Research*, American Physical Society (APS), v. 2, n. 1, fev. 2020. Disponível em: <<https://doi.org/10.1103/physrevresearch.2.013229>>.
- WANG, Z.; QI, X.-L.; ZHANG, S.-C. Equivalent topological invariants of topological insulators. *New Journal of Physics*, IOP Publishing, v. 12, n. 6, p. 065007, jun. 2010. Disponível em: <<https://doi.org/10.1088/1367-2630/12/6/065007>>.
- WEISSE, A. et al. The kernel polynomial method. *Rev. Mod. Phys.*, American Physical Society, v. 78, p. 275–306, Mar 2006. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/RevModPhys.78.275>>.
- WeiSSE, A. et al. The kernel polynomial method. *Reviews of Modern Physics*, American Physical Society (APS), v. 78, n. 1, p. 275–306, mar. 2006. Disponível em: <<https://doi.org/10.1103/revmodphys.78.275>>.

- WINKLER, R. *Spin-orbit coupling effects in two-dimensional electron and hole systems*. Berlin: Springer, 2003. (Springer tracts in modern physics). Disponível em: <<https://cds.cern.ch/record/684956>>.
- WU, J.; LIU, J.; LIU, X.-J. Topological Spin Texture in a Quantum Anomalous Hall Insulator. *Physical Review Letters*, American Physical Society (APS), v. 113, n. 13, set. 2014. Disponível em: <<https://doi.org/10.1103/physrevlett.113.136403>>.
- YANG, D.-B. et al. The geometric and topological interpretation of berry phase on a torus. *arXiv preprint arXiv:1904.07671*, 2019.
- ZANON, J. *Estados de borda em junções de isolantes topológicos 2D e ferromagnetos: textura de spin e espectro*. Tese (Doutorado) — USP, 2021. Disponível em: <<https://doi.org/10.11606/d.76.2021.tde-30112021-112417>>.
- ZHANG, H.-J. et al. Electronic structures and surface states of the topological insulator. *Physical Review B*, American Physical Society (APS), v. 80, n. 8, ago. 2009. Disponível em: <<https://doi.org/10.1103/physrevb.80.085307>>.