

# Об особенностях электронного спектра двумерных решеток

С. Н. Молотков

*Институт физики твердого тела РАН, 142432 Черноголовка, Московская обл., Россия*

*Академия криптографии Российской Федерации*

*Факультет вычислительной математики и кибернетики, МГУ им. М.В. Ломоносова, 119992 Москва, Россия*

Поступила в редакцию 24 июня 2009 г.

После переработки 9 июля 2009 г.

Приведены возможные типы и особенности электронного спектра в симметричных точках зоны Бриллюэна, которые могут встречаться в двумерных решетках.

PACS: 73.50.–h

Соображения симметрии играют фундаментальную роль как в классической, так и в квантовой физике. В классической физике основной группой симметрии является группа Галилея. Законы механики Ньютона инвариантны относительно группы Галилея. Однородность пространства и времени приводит к инвариантности функции Лагранжа относительно пространственных и временных трансляций и соответственно к законам сохранения импульса и энергии. Законы эйнштейновской релятивистской механики и уравнения Максвелла инвариантны относительно группы Лоренца. В квантовой теории структура пространства-времени и квантовость неразрывно связаны. Связаны в том смысле, что сам факт существования массивных и безмассовых квантованных полей вытекает из групповых свойств пространства-времени. Как известно, такая связь возникает, если рассматривать неприводимые представление группы Пуанкаре в гильбертовом пространстве состояний. Например, базисные функции одного из неприводимых представлений описывают состояния одного из безмассовых полей (фотона) с двумя возможными значениями спиральности.

По-видимому, наиболее продуктивные приложения теории групп, точнее, теории представлений групп, имеют место в теории конденсированного состояния. Симметричные соображения, начиная с теории фазовых переходов второго рода Ландау [1], привели к многим интересным физическим предсказаниям практически во всех разделах физики твердого тела. В известных работах [2] были предсказаны новые состояния сверхпроводников с экзотическими типами куперовского спаривания, а также нетривиальные топологически устойчивые структуры в жидком гелии  $^3\text{He}-\text{A}$  [3, 4]. В последние годы аппарат гомотопических групп был успешно применен для классифика-

ции особенностей, имеющих топологическую природу, в различных физических системах. Обзор последних достижений в этой области от теории твердого тела до моделей Великого объединения представлен в работе [5].

В последние годы технологически стало возможным создавать различные искусственные низкоразмерные наноструктуры. Одним из таких активно исследуемых объектов является графен – двумерные монослои графита (см. обзор [6] и имеющиеся там многочисленные ссылки). Треугольная двумерная решетка графена приводит к достаточно экзотическому коническому (дираковскому) виду электронного спектра на границе зоны Бриллюэна. В модели сильной связи для двойных слоев графита были также предсказаны полу-дираковский (квадратичный по одной компоненте квазиимпульса и линейный по другой) вид электронного спектра [7]. Вид электронного спектра в таких структурах определяется исключительно симметрией пространственной группы решетки. Для трехмерных кристаллов, как известно, существует 230 пространственных федоровских групп [8], поэтому классификация электронного спектра во всевозможных трехмерных пространственных решетках представляет хотя и выполнимую, но достаточно трудоемкую задачу. Пространственных групп двумерных решеток существует всего 17 [8], поэтому классификация электронного спектра представляет вполне обозримую и выполнимую за конечное время задачу. Классификация всех неприводимых представлений 17 пространственных групп в симметричных точках зон бриллюэна была проведена ранее в [9]. В данном сообщении мы хотим обратить внимание на то, что конический вид электронного спектра в графене не является единственным примером. Конический вид спектра в спинор-

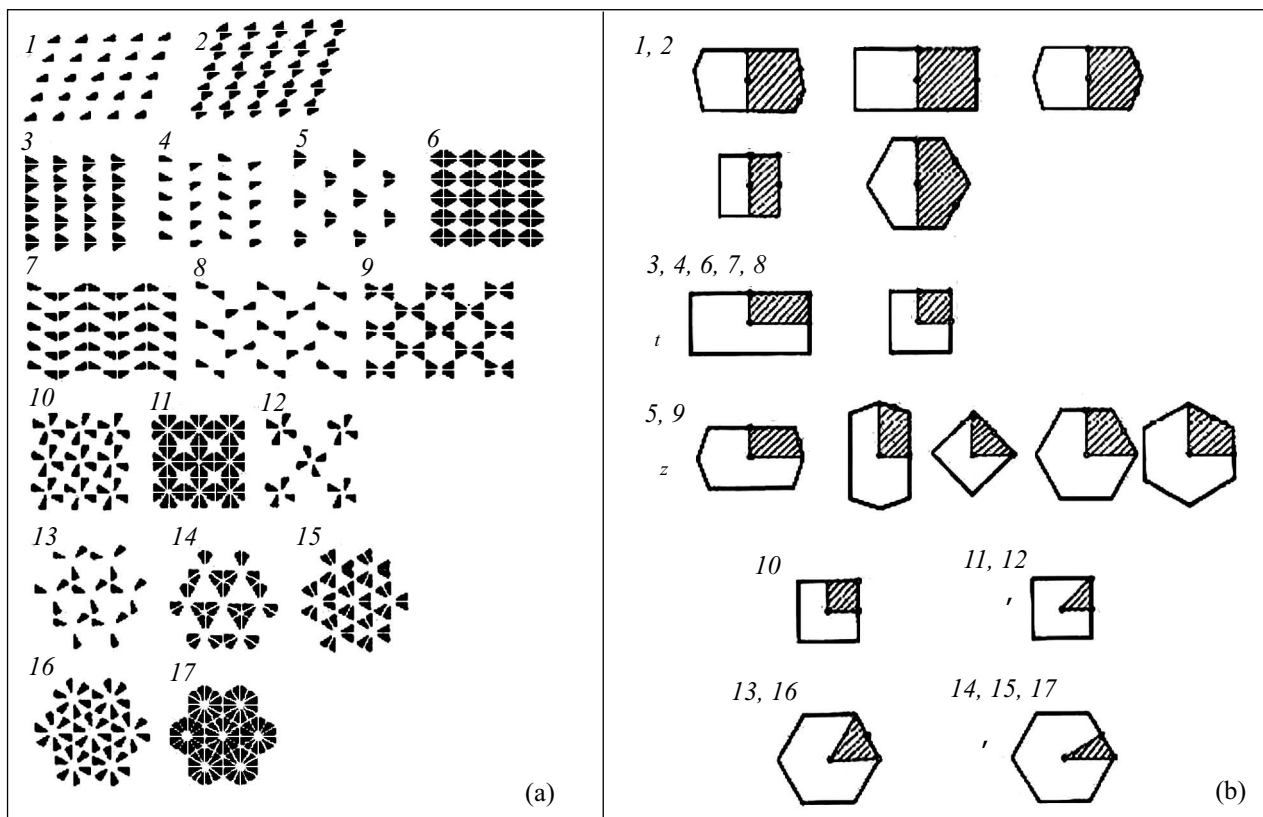


Рис.1

ном случае встречается практически во всех 17 пространственных решетках. Кроме того, существуют еще более экзотические формы электронного спектра. Ниже все типы особенностей, которые могут встретиться в природе, будут приведены в явном виде.

Все 17 пространственных двумерных решеток приведены на рис.1а. На рис.1б показаны все типы зон Бриллюэна с обозначением симметричных точек. Различный вид зон Бриллюэна для одной и той же решетки возникает из-за разного соотношения длин базисных векторов элементарных трансляций.

Для классификации электронного спектра в симметричных точках зоны Бриллюэна удобно воспользоваться методом инвариантов, изложенным в монографии [10], который кратко сводится к следующему. Электронный спектр вблизи симметричных точек определяется гамильтонианом  $\mathcal{H}(\mathbf{k})$  (где  $\mathbf{k}$  отсчитывается от симметричной точки). Степень вырождения определяется размерностью матрицы  $\mathcal{D}^{\mathbf{k}}$  соответствующего представления группы волнового вектора  $G_{\mathbf{k}}$ . Гамильтониан может быть представлен в виде [10]

$$\mathcal{H}(\mathbf{k}) = \sum_m \sum_l a_m \mathbf{X}_l^m \mathcal{K}_l^{*m}, \quad (1)$$

где  $\mathbf{X}_l^m$  – базисные матрицы, преобразующиеся по некоторому представлению, которые удобно выбрать эрмитовыми,  $\mathcal{K}_l^{*m}$  – компоненты тензора, составленные из компонент волнового вектора, преобразующиеся по сопряженному, по отношению к базисным матрицам, представлению,  $a_m$  – произвольные вещественные константы, которые являются вещественными, если базисные матрицы выбраны эрмитовыми. Причем одни и те же компоненты тензоров могут входить в произведения с разными базисными матрицами. Структура базисных матриц и компонент тензора диктуется симметрией пространственной решетки с точностью до выбора базиса. Дальнейшая задача сводится к классификации базисных матриц в соответствии с неприводимыми представлениями группы волнового вектора с учетом инвариантности по отношению к обращению времени [10], которая может приводить в ряде случаев к дополнительному и нетривиальному вырождению уровней. Для выяснения этого обстоятельства необходимо воспользоваться критерием Херринга [10, 11]. При этом возможны три случая.

Представление группы волнового вектора  $\mathcal{D}_{\mathbf{k}}^{\mu}$  само является представлением некоторого уровня энергии. Случай *a* [10].

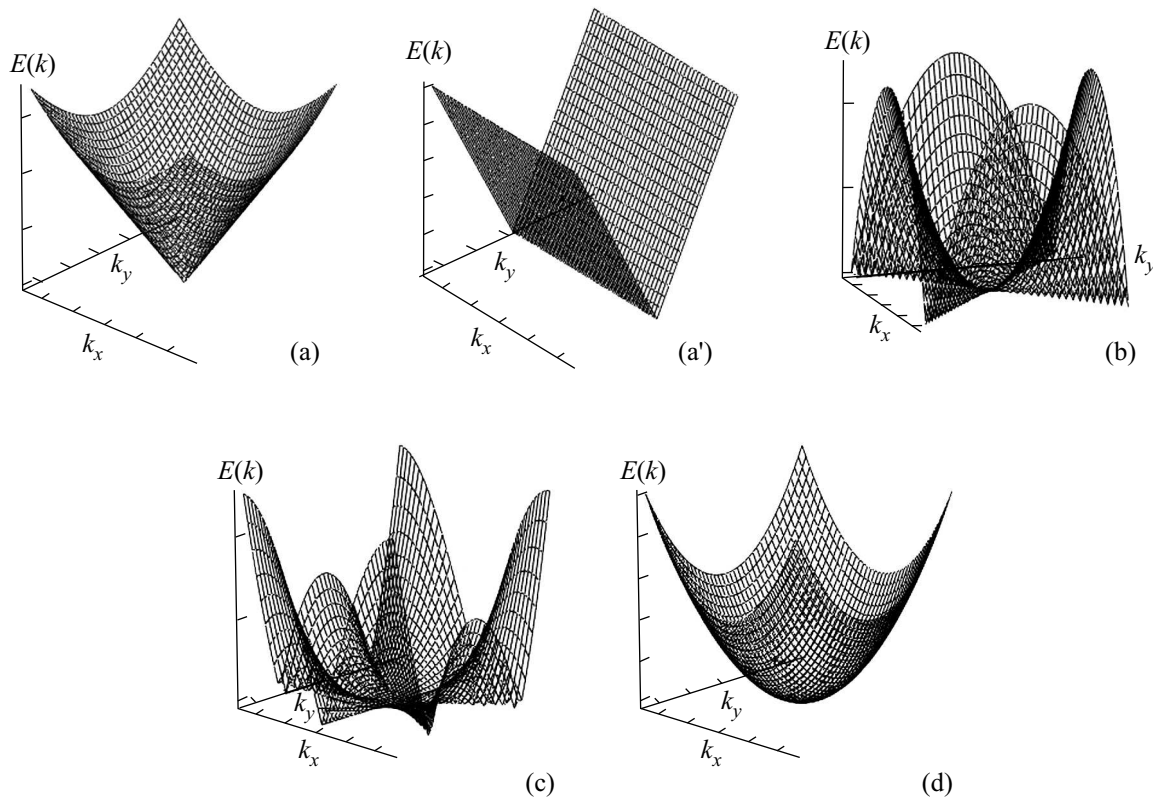


Рис.2. Допустимые виды электронного спектра. Показана только положительная часть ветви спектра  $E(\mathbf{k}) > 0$ . (a) Конический  $E(\mathbf{k}) = \sqrt{k_x^2 + k_y^2}$ . (a') Вырожденный конус (желоб)  $E(\mathbf{k}) = \sqrt{k_y^2}$ . (b) Гиперболический  $E(\mathbf{k}) = |k_x^2 - k_y^2|$ . (c) Кубический  $E(\mathbf{k}) = |k_x^3 - 3k_x k_y^2|$ . (d) Параболический  $E(\mathbf{k}) = k_x^2 + k_y^2$

Представлением  $\mathcal{D}_{\mathbf{k}}$  есть комбинация двух неэквивалентных представлений  $\mathcal{D}_{\mathbf{k}}^{\mu}$  и сопряженного  $\mathcal{D}_{\mathbf{k}}^{*\mu}$ . Случай *b* [10].

Представление  $\mathcal{D}_{\mathbf{k}}$  есть комбинация двух эквивалентных представлений  $\mathcal{D}_{\mathbf{k}}^{\mu}$  и сопряженного  $\mathcal{D}_{\mathbf{k}}^{*\mu}$ . Случай *c* [10].

В случаях *b* и *c* волновые функции  $\varphi$  и  $T\varphi$  ( $T$  – операция обращения времени) линейно независимы, поэтому обращение времени приводит к дополнительному вырождению. Волновые функции  $\varphi$  и  $T\varphi$  могут относиться к разным лучам звезд  $\{\mathbf{k}\}$  и  $\{-\mathbf{k}\}$ . При этом в каждом из трех случаев Херринга (*a, b, c*) возможны три варианта.

Случай 1. Точки эквивалентны  $\mathbf{k}$  и  $-\mathbf{k}$  (такой случай всегда имеет место в точке  $\Gamma$  в центре зоны Бриллюэна).

Случай 2. Точки  $\mathbf{k}$  и  $-\mathbf{k}$  не эквивалентны, но пространственная группа симметрии содержит элемент, переводящий  $\mathbf{k}$  в  $-\mathbf{k}$ .

Случай 3. Точки  $\mathbf{k}$  и  $-\mathbf{k}$  входят в разные звезды.

Представления объединяются в случаях *b* и *c* в случаях 1 и 2. Случай 3 не приводит к объединению представлений и к дополнительному принудительному вырождению.

Ряд нетривиальных особенностей спектра возникает в спинорном случае. Спинорные представления пространственных групп методом, описанным в [10], могут быть сведены к проективным представлениям соответствующей точечной группы. Причем приведение фактор-системы к стандартному виду позволяет воспользоваться имеющимися матрицами представлений в [10]. Далее будем отмечать только нетривиальные особенности электронного спектра.

**Решетка 1 (p1).** В этой решетке имеется один элемент симметрии  $\{\varepsilon | \mathbf{R}\}$ . В спинорном случае конический вид спектра имеет место во всех симметричных точках зоны Бриллюэна (рис.2):

$$\mathcal{H}(\mathbf{k}) = \sum_{i,j=x,y,z} a_i \sigma_i k_j, \quad (2)$$

$a_i$  – произвольные константы,  $\sigma_i$  – матрицы Паули. Отметим, что везде ниже данные матрицы являются просто базисными матрицами и не имеют прямого

отношения к спину. Например, в качестве базисных можно было выбрать любой другой полный набор линейно независимых матриц.

**Решетка 2 ( $p2$ ).** Элементы симметрии –  $\{\varepsilon|\mathbf{R}\}$ ,  $\{C_2|\mathbf{R}\}$ . В спинорном случае конический вид спектра также имеет место во всех симметричных точках зоны Бриллюэна

$$\mathcal{H}(\mathbf{k}) = \sum_{i,j=x,y} a_i \sigma_i k_j, \quad (3)$$

$a_i$  – произвольные константы.

**Решетка 3 ( $p1m1$ ).** Элементы симметрии –  $\{\varepsilon|\mathbf{R}\}$ ,  $\{\sigma_x|\mathbf{R}\}$  ( $\sigma_x$  – плоскость симметрии вдоль оси  $x$ ). В спинорном случае спектр имеет вид желоба либо вдоль оси  $k_x$ , либо вдоль оси  $k_y$ . Во всех остальных симметричных точках зоны Бриллюэна возможен спектр вида

$$\mathcal{H}(\mathbf{k}) = (a_x \sigma_x + a_y \sigma_y) k_y, \quad \mathcal{H}(\mathbf{k}) = a_z \sigma_z k_x. \quad (4)$$

**Решетка 4 ( $p1g1$ ).** Элементы симметрии аналогичны решетке 3, но имеется еще плоскость скольжения вдоль оси  $x$  –  $\{\sigma_x|\tau_x + \mathbf{R}\}$  ( $\tau_x = (a_x/2, 0)$ ,  $a_x$  – базисный вектор вдоль  $x$ ). Для определения спинорных представлений в точках  $X$  и  $S$  найдем фактор-систему (см. [10]). Имеем

$$\begin{aligned} \alpha &= \omega(\varepsilon, \sigma_x) / \omega(\sigma_x, \varepsilon) = 1, \\ \omega(\varepsilon, \sigma_x) &= \exp[i(\mathbf{k} - \varepsilon^{-1}\mathbf{k})\tau_x] = 1, \\ \omega(\sigma_x, \varepsilon) &= \exp[i(\mathbf{k} - \sigma_x^{-1}\mathbf{k})0] = 1, \end{aligned}$$

то есть фактор-система принадлежит классу  $K_0$  и проективное представление эквивалентно векторному. Вид спектра в точках  $\Gamma$  и  $Y$  аналогичен группе 3, а в точках  $X$  и  $S$  и вдоль направления  $D$  в спинорном случае спектр имеет вид

$$\mathcal{H}(\mathbf{k}) = (a_x \sigma_x + a_y \sigma_y + a_z \sigma_z) k_x, \quad (5)$$

$a_{x,y,z}$  – произвольные константы.

**Решетка 5 ( $c1m1$ ).** Элементы симметрии –  $\{\varepsilon|\mathbf{R}\}$ ,  $\{\sigma_x|\mathbf{R}\}$ . В точках  $\Gamma$ ,  $X$ ,  $Y$  спектр в спинорном случае аналогичен случаю решетки 3. В точке  $S$  спектр имеет вид

$$\begin{aligned} \mathcal{H}(\mathbf{k}) &= (a_x \sigma_x + a_y \sigma_y + a_z \sigma_z) k_x + \\ &+ (a'_x \sigma_x + a'_y \sigma_y + a'_z \sigma_z) k_y, \end{aligned} \quad (6)$$

$a_{x,y,z}, a'_{x,y,z}$  – произвольные константы.

**Решетка 6 ( $p2m1$ ).** Элементы симметрии –  $\{\varepsilon|\mathbf{R}\}$ ,  $\{C_2|\mathbf{R}\}$ ,  $\{\sigma_x|\mathbf{R}\}$ . В спинорном случае во всех симметричных точках  $\Gamma$ ,  $X$ ,  $Y$ ,  $S$  спектр имеет вид

$$\mathcal{H}(\mathbf{k}) = a_1 \sigma_x k_y, \quad \mathcal{H}(\mathbf{k}) = a_2 \sigma_y k_x, \quad (7)$$

$a_{1,2}$  – произвольные константы.

**Решетка 7 ( $p2mg$ ).** Элементы симметрии –  $\{\varepsilon|\mathbf{R}\}$ ,  $\{C_2|\mathbf{R}\}$ ,  $\{\sigma_x|\tau_x + \mathbf{R}\}$ ,  $\{\sigma_y|\tau_y + \mathbf{R}\}$ . Плоскость скольжения вдоль оси  $x$  ( $\tau_x = (a_x/2, 0)$ ,  $a_x$  – базисный вектор вдоль  $x$ ). Спектр в точках  $\Gamma$ ,  $Y$  аналогичен решетке 6. Для построения представлений в точках  $X$ ,  $S$  без учета спина необходимо знать фактор-систему. Имеем

$$\omega(C_2, \sigma_x) = \exp[i(\mathbf{k} - C_2^{-1}\mathbf{k})\tau_x] = -1,$$

$$\omega(\sigma_x, C_2) = \exp[i(\mathbf{k} - \sigma_x^{-1}\mathbf{k})0] = 1, \quad \alpha = -1.$$

Фактор-система принадлежит классу  $K_1$ , поэтому представление группы волнового вектора  $\mathcal{D}_{\mathbf{k}}(g)$  ( $g = \{\mathbf{r}|\mathbf{R} + \tau\}$ ) может быть найдено из  $\mathcal{D}_{\mathbf{k}}(g) = \exp[i\mathbf{k}(\mathbf{R} + \tau)]u(\mathbf{r})D(\mathbf{r})$  ( $D(\mathbf{r})$  – представление, отвечающее стандартной фактор-системе [10]). Если  $A$  и  $B$  – матрицы, отвечающие образующим элементам группы направлений  $C_{2v}$  ( $a = C_2$ ,  $b = \sigma_x$ ), то, согласно [10],  $D(\mathbf{r}) = A^m B^n$  для стандартной фактор-системы. В группе  $C_{2v}$  имеется одно двумерное проективное представление, относящееся к классу  $K_1$ . Факторы  $u(\mathbf{r})$ , которые приводят фактор-систему к стандартному виду, согласно [10], имеют вид

$$u(C_2) = \omega(C_2, C_2)^{1/2} = 1, \quad u(\sigma_x) = \omega(\sigma_x, \sigma_x)^{1/2} = 1$$

для образующих элементов. Для других элементов имеем

$$u(\sigma_y) = u(C_2 \sigma_x) = u(C_2)u(\sigma_x) / \omega(C_2, \sigma_x) = -1.$$

Для спинорных представлений фактор  $u(\mathbf{r})$  должен быть заменен на  $u(\mathbf{r})u'(\mathbf{r})$  ( $u'(C_2) = 1$ ,  $u'(\sigma_x) = i$ ,  $u'(\sigma_y) = u'(C_2 \sigma_x) = -1$ ). Как в безспиновом, так и в спинорном случаях реализуется случай  $b_1$ .

Для точек на линии  $D$  перпендикулярной плоскости скольжения фактор-система относится к классу  $K_0$ . Фактор-системы  $\omega(\varepsilon, \sigma_x) = \exp[i(\mathbf{k} - \varepsilon^{-1}\mathbf{k})\tau_x] = 1$ ,  $\omega(\sigma_x, \varepsilon) = \exp[i(\mathbf{k} - \sigma_x^{-1}\mathbf{k})0] = 1$ , поэтому проективные представления могут быть получены из векторных умножением соответствующих характеров на  $\exp(i\mathbf{k}\tau_x) = \exp(i\pi/2) = i$ . Поскольку  $\mathbf{k}$  и  $-\mathbf{k}$  не эквивалентны, но в пространственной группе имеется элемент, переводящий их друг в друга, то реализуется случай  $b_2$ .

Спектр как в спинорном, так и безспиновом случаях вдоль линии  $D$  имеет вид

$$\mathcal{H}(\mathbf{k}) = (a_1 \sigma_x + a_2 \sigma_y) k_x, \quad (8)$$

$a_{1,2}$  – произвольные константы.

**Решетка 8 ( $p2gg$ ).** Элементы симметрии –  $\{\varepsilon|\mathbf{R}\}$ ,  $\{C_2|\mathbf{R}\}$  и две плоскости скольжения  $\{\sigma_x|\tau + \mathbf{R}\}$ ,  $\{\sigma_y|\tau + \mathbf{R}\}$  скольжения диагонали оси  $\tau = (a_x/2, a_y/2)$ ,  $a_{x,y}$  – базисные векторы вдоль  $x, y$ .

Электронный спектр в точках  $\Gamma, X, Y, D, C$  аналогичен группе 7. Для безспинового случая в точке  $S$  фактор-система для образующих элементов  $C_2$  и  $\sigma_x$  равна  $\omega(C_2, \sigma_x) = \exp[i(\mathbf{k} - C_2^{-1}\mathbf{k})\tau_x] = 1$ ,  $\omega(\sigma_x, C_2) = \exp[i(\mathbf{k} - \sigma_x^{-1}\mathbf{k})0] = 1$ , поэтому принадлежит классу  $K_0$ , и характеры группы волнового вектора получаются из характеров группы направлений  $C_2$  посредством умножения характеров элементов  $\sigma_x, \sigma_y$  на  $i$ . Так как точки  $\mathbf{k}$  и  $-\mathbf{k}$  эквиваленты, то реализуется случай  $b_1$ . Аналогично, в спиновом случае можно найти, что фактор-система принадлежит классу  $K_1$  [10], и реализуется случай  $c_1$ .

**Решетка 9 ( $c2mm$ ).** Элементы симметрии –  $\{\varepsilon|\mathbf{R}\}$ ,  $\{C_2|\mathbf{R}\}$  и две плоскости  $\{\sigma_x|\mathbf{R}\}$ ,  $\{\sigma_y|\mathbf{R}\}$ . Вид спектра в симметричных точках аналогичен группам 2 и 6.

**Решетка 10 ( $p4$ ).** Элементы симметрии –  $\{\varepsilon|\mathbf{R}\}$ ,  $\{C_4|\mathbf{R}\}$ . В безспиновом случае спектр в точках  $\Gamma$  и  $M$  имеет вид

$$\mathcal{H}(\mathbf{k}) = (a_1\sigma_x + a_2\sigma_y)(k_x^2 - k_y^2) + (a_3\sigma_x + a_4\sigma_y)(2k_x k_y), \quad (9)$$

соответственно, в спиновом случае спектр имеет вид

$$\mathcal{H}(\mathbf{k}) = (a_1\sigma_x k_x + a_2\sigma_y k_y) + (a_1\sigma_x k_y - a_2\sigma_y k_x), \quad (10)$$

$a_{1-4}$  – произвольные константы. В точке  $X$  в спиновом случае спектр имеет вид

$$\mathcal{H}(\mathbf{k}) = (a_1\sigma_x + a_2\sigma_y)k_x + (a_3\sigma_x + a_4\sigma_y)k_y. \quad (11)$$

**Решетка 11 ( $p4mm$ ).** Элементы симметрии –  $\{\varepsilon|\mathbf{R}\}$ ,  $\{C_4|\mathbf{R}\}$ ,  $\{C_4^3|\mathbf{R}\}$ ,  $\{C_2|\mathbf{R}\}$ ,  $\{\sigma_x|\mathbf{R}\}$ ,  $\{\sigma_y|\mathbf{R}\}$ ,  $\{\sigma_{xy}|\mathbf{R}\}$  ( $\sigma_{xy}$  – диагональная плоскость симметрии, перпендикулярная поверхности). В безспиновом случае в точках  $\Gamma$  и  $M$  спектр имеет вид

$$\mathcal{H}(\mathbf{k}) = a_1\sigma_x(k_x^2 - k_y^2), \quad \mathcal{H}(\mathbf{k}) = a_2\sigma_y 2k_x k_y. \quad (12)$$

Соответственно, в спиновом случае, имеем

$$\mathcal{H}(\mathbf{k}) = -\sigma_x k_y + \sigma_y k_x. \quad (13)$$

В точке  $X$  в спиновом случае соответственно, имеем

$$\mathcal{H}(\mathbf{k}) = a_1\sigma_x k_y, \quad \mathcal{H}(\mathbf{k}) = a_2\sigma_y k_x. \quad (14)$$

**Решетка 12 ( $p4gm$ ).** Данная решетка – единственная в двумерном случае, где возникает принудительное четырехкратное вырождение в вершине зоны Бриллюэна. Элементы симметрии –  $\{\varepsilon|\mathbf{R}\}$ ,  $\{C_4|\mathbf{R}\}$ ,  $\{C_4^3|\mathbf{R}\}$ ,  $\{C_2|\mathbf{R}\}$ ,  $\{\sigma_x|\mathbf{R} + \tau\}$ ,  $\{\sigma_y|\mathbf{R} + \tau\}$ ,  $\{\sigma_{xy}|\mathbf{R} + \tau\}$ ,  $\{\sigma_{yx}|\mathbf{R} + \tau\}$  ( $\tau = (a_x/2, a_y/2)$ ). Имеются четыре элемента с нетривиальными трансляциями. Вид спектра в точке  $\Gamma$  аналогичен группе 11, в точке  $X$  аналогичен спектру 8 решетки в центре зоны Бриллюэна. В точке  $Y$  спектр аналогичен спектру в точке  $Y$  аналогичен спектру в точке  $D$  в 7 группе.

Нетривиальное четырехкратное вырождение возникает в вершине зоны Бриллюэна точке  $M$  как в спиновом, так и безспиновом случаях. В безспиновом случае фактор-система для порождающих элементов имеет вид

$$\omega(C_4, \sigma_x) = \exp[i(\mathbf{k} - C_4^{-1}\mathbf{k})\tau] = \exp(2ik_y\tau_y) = -1,$$

$$\omega(\sigma_x, C_4) = \exp[i(\mathbf{k} - \sigma_x^{-1}\mathbf{k})0] = 1.$$

Фактор-система относится к классу  $K_1$ , поэтому необходимо пользоваться проективными представлениями. В точечной группе  $C_{4v}$  имеется два двумерных проективных представления с комплексно-сопряженными характерами. Приведение фактор-системы к стандартному виду дается следующими факторами:

$$u(C_4) = \omega(C_4, C_4)^{1/2}\varepsilon, \quad u(\sigma_x) = \omega(\sigma_x, \sigma_x)^{1/2},$$

$$n = 4, \quad C_4^n = \varepsilon, \quad m = 2, \quad \sigma_x^2 = \varepsilon.$$

Находим факторы для образующих элементов группы:

$$u(C_4) = -1, \quad u(\sigma_x) = i, \quad u(C_2) = u(C_4^2) = -1,$$

$$u(\sigma_{xy}) = u(C_4\sigma_x) = u(C_4)u(\sigma_x)/\omega(C_4, \sigma_x) = i.$$

Матрицы представлений для группы волнового вектора, с учетом факторов  $u(\mathbf{r})$  и таблиц [10], имеют вид

$$\mathcal{D}_{\mathbf{k}}(C_4) = -1 \begin{pmatrix} \varepsilon_8^3 & 0 \\ 0 & \varepsilon_8 \end{pmatrix}, \quad \mathcal{D}_{\mathbf{k}}(\sigma_x) = ie^{\mathbf{k}\tau}\sigma_x,$$

$$\mathcal{D}_{\mathbf{k}}(C_2) = -1 \begin{pmatrix} \varepsilon_8^6 & 0 \\ 0 & \varepsilon_8^2 \end{pmatrix},$$

$$\mathcal{D}_{\mathbf{k}}(\sigma_{xy}) = ie^{\mathbf{k}\tau} \begin{pmatrix} 0 & \varepsilon_8^3 \\ \varepsilon_8 & 0 \end{pmatrix},$$

для представления  $P_1^{(1)}$  [10], и для представления  $P_2^{(1)}$ :

$$\mathcal{D}_{\mathbf{k}}(C_4) = -1 \begin{pmatrix} \varepsilon_8^{-1} & 0 \\ 0 & \varepsilon_8^{-3} \end{pmatrix}, \quad \mathcal{D}_{\mathbf{k}}(\sigma_x) = ie^{\mathbf{k}\tau}\sigma_x,$$

$$\mathcal{D}_{\mathbf{k}}(C_2) = -1 \begin{pmatrix} \varepsilon_8^{-2} & 0 \\ 0 & \varepsilon_8^{-6} \end{pmatrix},$$

$$\mathcal{D}_{\mathbf{k}}(\sigma_{xy}) = ie^{k\tau} \begin{pmatrix} 0 & \varepsilon_8^{-1} \\ \varepsilon_8^{-3} & 0 \end{pmatrix},$$

где  $\varepsilon_8 = e^{i\pi/4}$ . Определим, к какому случаю по Херрингу относятся представления в точке  $M$ . Согласно [10], для всех элементов группы волнового вектора

$$\begin{aligned} \Sigma &= \sum_{g\mathbf{k}=-\mathbf{k}} \chi(g^2) = \text{Tr}(\mathcal{D}_{\mathbf{k}}(\varepsilon)^2 + 2\mathcal{D}_{\mathbf{k}}(C_4)^2 + \\ &+ \mathcal{D}_{\mathbf{k}}(C_2)^2 + 2\mathcal{D}_{\mathbf{k}}(\sigma_x)^2 + 2\mathcal{D}_{\mathbf{k}}(\sigma_{xy})^2) = \\ &= 2 + 2 \cdot 0 - 2 + 2 \cdot (-2) + 2 \cdot 2 = 0, \end{aligned}$$

то есть реализуется случай  $b_1$  объединения представлений с комплексно-сопряженными характеристиками.

В спиновом случае фактор-система относится к классу  $K_1$ . Переход к стандартному представлению проективного представления осуществляется при помощи факторов, используя [10], находим  $u'(C_4^k) = e^{i\pi k/2}$ ,  $u'(\sigma_x) = e^{i\pi/2}$ ,  $u'(C_4^k \sigma_x) = u'(C_4^k)u'(\sigma_x) = e^{i\pi/2} = e^{i\pi(k+1)/2}$ . В безспиновом случае вид электронного спектра в точке  $M$  имеет вид<sup>1)</sup>

$$\begin{aligned} \mathcal{H}(\mathbf{k}) &= (a_1 \widehat{\rho_x I} + a_2 \widehat{\rho_y I})(k_x^2 - k_y^2), \\ \mathcal{H}(\mathbf{k}) &= \widehat{\rho_z \sigma_x} k_y - \widehat{I \sigma_y} k_x. \end{aligned} \quad (15)$$

Соответственно, в спиновом случае

$$\begin{aligned} \mathcal{H}(\mathbf{k}) &= (a_1 \widehat{\rho_x \sigma_y} + a_2 \widehat{\rho_y \sigma_x}) k_x k_y, \\ \mathcal{H}(\mathbf{k}) &= a_1 (\widehat{\rho_z \sigma_x} k_y - \widehat{I \sigma_y} k_x) + \\ &+ a_2 (\widehat{\rho_x \sigma_x} k_y - \widehat{\rho_y \sigma_x} k_x) + a_3 (\widehat{\rho_x \sigma_z} k_y - \widehat{\rho_y \sigma_z} k_x). \end{aligned} \quad (16)$$

**Решетка 13 (p3).** Элементы симметрии –  $\{\varepsilon|\mathbf{R}\}$ ,  $\{C_3|\mathbf{R}\}$ . В безспиновом случае в точке  $\Gamma$  спектр имеет вид

$$\begin{aligned} \mathcal{H}(\mathbf{k}) &= a_1(\sigma_x(k_x^2 - k_y^2) - \sigma_y(k_x^2 - k_y^2)) + \\ &+ a_2(\sigma_x 2k_x k_y + \sigma_y(k_x^2 - k_y^2)). \end{aligned} \quad (17)$$

В спиновом случае в точке  $\Gamma$  для спектра находим

$$\begin{aligned} \mathcal{H}(\mathbf{k}) &= (a_1 \sigma_x + a_2 \sigma_y + a_3 \sigma_z)(k_x^3 - 3k_x k_y^2) + \\ &+ (a'_1 \sigma_x + a'_2 \sigma_y + a'_3 \sigma_z)(k_y^3 - 3k_y k_x^2), \end{aligned} \quad (18)$$

$$\mathcal{H}(\mathbf{k}) = a_1(\sigma_x k_y - \sigma_y k_x) + a'_1(\sigma_x k_x + \sigma_y k_y). \quad (19)$$

В точке  $M$  в спиновом случае возможен такой же спектр, как в решетке 1.

**Решетка 14 (p3m1).** Элементы симметрии –  $\{\varepsilon|\mathbf{R}\}$ ,  $\{C_3|\mathbf{R}\}$ ,  $\{C_3^2|\mathbf{R}\}$ ,  $\{\sigma_y|\mathbf{R}\}$ ,  $\{\sigma_1|\mathbf{R}\}$ ,  $\{\sigma_2|\mathbf{R}\}$ . В безспиновом случае в точке  $\Gamma$  спектр аналогичен группе 13. В спиновом случае спектр в точке  $\Gamma$  имеет вид

$$\mathcal{H}(\mathbf{k}) = \sigma_z(k_x^3 - 3k_x k_y^2), \quad \mathcal{H}(\mathbf{k}) = \sigma_x k_y - \sigma_y k_x. \quad (20)$$

В точке  $M$  спектр аналогичен спектру в решетке 3 в точке  $\Gamma$ . В точке  $K$  спектр имеет параболический вид.

**Решетка 15 (p3m1).** Такую решетку имеет графен. Элементы симметрии –  $\{\varepsilon|\mathbf{R}\}$ ,  $\{C_3|\mathbf{R}\}$ ,  $\{C_3^2|\mathbf{R}\}$ ,  $\{\sigma_x|\mathbf{R}\}$ ,  $\{\sigma_1|\mathbf{R}\}$ ,  $\{\sigma_2|\mathbf{R}\}$ . В точках  $\Gamma$  и  $M$  спектр аналогичен спектру решетки 14 в соответствующих точках зоны Бриллюэна. В точке  $K$  спектр в безспиновом случае имеет конический вид:

$$\mathcal{H}(\mathbf{k}) = \sigma_x k_x + \sigma_y k_y. \quad (21)$$

В спиновом случае спектр в точке  $K$  также имеет конический вид

$$\mathcal{H}(\mathbf{k}) = \sigma_x k_y - \sigma_y k_x. \quad (22)$$

**Решетка 16 (p6).** Элементы симметрии –  $\{\varepsilon|\mathbf{R}\}$ ,  $\{C_6|\mathbf{R}\}$ ,  $\{C_6^5|\mathbf{R}\}$ ,  $\{C_3|\mathbf{R}\}$ ,  $\{C_3^2|\mathbf{R}\}$ ,  $\{C_2|\mathbf{R}\}$ . В безспиновом случае в точке  $\Gamma$  возможен следующий вид спектра:

$$\mathcal{H}(\mathbf{k}) = \sigma_x(k_x^2 - k_y^2) - \sigma_y 2k_x k_y, \quad (23)$$

то есть бесщелевой параболический спектр двукратно-вырожденный в точке  $\Gamma$ . В точке  $M$  спектр невырожденный квадратичный. В  $K$  точке возможен спектр вида

$$\begin{aligned} \mathcal{H}(\mathbf{k}) &= a_1(\sigma_x(k_x^2 - k_y^2) - \sigma_y 2k_x k_y) + \\ &+ a_2(\sigma_x 2k_x k_y + \sigma_y(k_x^2 - k_y^2)). \end{aligned} \quad (24)$$

В спиновом случае в точке  $\Gamma$  возможен спектр

$$\begin{aligned} \mathcal{H}(\mathbf{k}) &= (a_1 \sigma_x + a_2 \sigma_y)(k_x^3 - 3k_x k_y^2) + \\ &+ (a'_1 \sigma_x + a'_2 \sigma_y)(k_y^3 - 3k_y k_x^2), \end{aligned} \quad (25)$$

и конический

$$\mathcal{H}(\mathbf{k}) = a_1(\sigma_x k_y - \sigma_y k_x) + a'_1(\sigma_x k_x + \sigma_y k_y). \quad (26)$$

В спиновом случае в точке  $M$  спектр аналогичен спектру решетки 2.

<sup>1)</sup> Для базисных матриц  $4 \times 4$  используем матрицы и обозначения из [10].

В точке  $K$  как в безспиновом, так и спиновом случаях возможен спектр вида (24) и (26).

*Решетка 17 (р6mn).* Элементы симметрии –  $\{\varepsilon|\mathbf{R}\}$ ,  $\{C_6|\mathbf{R}\}$ ,  $\{C_6^5|\mathbf{R}\}$ ,  $\{C_3|\mathbf{R}\}$ ,  $\{C_3^2|\mathbf{R}\}$ ,  $\{C_2|\mathbf{R}\}$ ,  $\{\sigma_x|\mathbf{R}\}$ ,  $\{\sigma_y|\mathbf{R}\}$ ,  $\{\sigma'|\mathbf{R}\}$ ,  $\{\sigma_1|\mathbf{R}\}$ ,  $\{\sigma_2|\mathbf{R}\}$ ,  $\{\sigma_3|\mathbf{R}\}$ . В точке  $\Gamma$  в безспиновом случае возможен бесщелевой параболический спектр

$$\mathcal{H}(\mathbf{k}) = \sigma_x(k_x^2 - k_y^2) - \sigma_y 2k_x k_y. \quad (27)$$

В точке  $K$  в беспиновом случае возможен спектр, аналогичный точке  $\Gamma$  и конический.

В спиновом случае в точке  $\Gamma$  возможен конический вид спектра (22), а также

$$\mathcal{H}(\mathbf{k}) = \sigma_y(k_x^3 - 3k_x k_y^2), \quad \mathcal{H}(\mathbf{k}) = \sigma_x(k_y^3 - 3k_y k_x^2). \quad (28)$$

В точке  $M$  в спиновом случае возможен вид спектра

$$\mathcal{H}(\mathbf{k}) = \sigma_y k_x, \quad \mathcal{H}(\mathbf{k}) = \sigma_x k_y. \quad (29)$$

И, наконец, в точке  $K$  в безспиновом случае возможен спектр

$$\mathcal{H}(\mathbf{k}) = \sigma_x(k_x^2 - k_y^2) - \sigma_x 2k_x k_y, \quad \mathcal{H}(\mathbf{k}) = \sigma_x k_x + \sigma_y k_y, \quad (30)$$

и в спиновом случае

$$\mathcal{H}(\mathbf{k}) = \sigma_x 2k_x k_y + \sigma_y(k_x^2 - k_y^2), \quad \mathcal{H}(\mathbf{k}) = \sigma_x k_y - \sigma_y k_x. \quad (31)$$

Таким образом, в двумерных периодических решетках возможны следующие типы электронного спектра<sup>2)</sup>.

Конический

$$E(\mathbf{k}) = \pm \sqrt{a_1^2 k_x^2 + a_2^2 k_y^2},$$

параметры  $a_{1,2}$ , в зависимости от типа решетки, могут быть одинаковыми, разными, или один из них может обращаться в нуль.

Параболический или гиперболический

$$E(\mathbf{k}) = \pm \sqrt{a_1^2(k_x^2 - k_y^2)^2 + a_2^2(2k_x k_y)^2},$$

параметры  $a_{1,2}$ , в зависимости от типа решетки, могут быть одинаковыми, разными, или один из них может обращаться в нуль.

Спектр, который можно назвать кубическим,

$$E(\mathbf{k}) = \pm \sqrt{a_1^2(k_x^3 - 3k_x k_y^2)^2 + a_2^2(k_y^3 - 3k_y k_x^2)^2},$$

параметры  $a_{1,2}$ , в зависимости от типа решетки могут быть одинаковыми, разными или один из них может обращаться в нуль.

Четырехкратно вырожденный конический и гиперболический спектры

$$E(\mathbf{k}) = \pm \pm \sqrt{(k_x^2 - k_y^2)^2}, \quad E(\mathbf{k}) = \pm \pm \sqrt{(a_1^2 k_x^2 + a_2^2 k_y^2)^2},$$

параметры  $a_{1,2}$  в зависимости от типа решетки, могут быть одинаковыми, разными, или один из них может обращаться в нуль.

На рис.2 приведены типичные виды спектра.

1. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Статистическая физика*, т. 5, часть 1, М.: Наука, 1978.
2. Г. Е. Воловик, Л. П. Горьков, *ЖЭТФ* **88**, 1412 (1985).
3. В. П. Минеев, *УФН* **139**, 303 (1983).
4. Г. Е. Воловик, *УФН* **143**, 73 (1984).
5. Г. Е. Воловик, *Quantum Analogies: From Phase Transitions to Black Holes and Cosmology*, Springer Lecture Notes in Physics, **718**, Eds. W. G. Unruh, R. Schützhold, 2007, p. 31.
6. A. H. Castro Neto, F. Guinea, N. M. R. Peres et al., *Rev. Mod. Phys.* **81**, 109 (2009).
7. S. Banerjee, R. R. P. Singh, V. Pardo, and W. E. Pickett, arXiv: cond-mat/0906.1564.
8. Б. К. Вайнштейн, *Кристаллография*, М.: Наука, Москва, 1979.
9. S. V. Meshkov and S. N. Molotkov, *Surface Science* **240**, 263 (1990).
10. Г. Л. Бир, Г. Е. Пикус, *Симметрия и деформационные эффекты в полупроводниках*, М.: Наука, 1972.
11. С. Herring, *Phys. Rev.* **52**, 361 (1937).

<sup>2)</sup>Тривиальный случай квадратичного невырожденного спектра также возможен.