

# О баллистическом транспорте в топологических изоляторах со структурой бордюров

С. Н. Молотков, Т. А. Потапова<sup>+</sup>

Институт физики твердого тела РАН, 142432 Черноголовка, Россия

Факультет вычислительной математики и кибернетики, МГУ им. Ломоносова, 119991 Москва, Россия

<sup>+</sup>Национальный исследовательский университет “Высшая школа экономики”, 101000 Москва, Россия

Поступила в редакцию 26 декабря 2012 г.

После переработки 11 февраля 2013 г.

Обсуждается симметричная природа возникновения специфических поверхностных (краевых) состояний на границах низкоразмерных структур с симметрией лент (бордюров), инвариантных по отношению к обращению времени. Выявлены симметричные причины устойчивости подобных состояний к упругому рассеянию на немагнитных примесях.

DOI: 10.7868/S0370274X13060106

**Введение.** Исследование особенностей электронного спектра в низкоразмерных системах в последнее десятилетие привело к предсказанию существования, а затем и к экспериментальному обнаружению новых экзотических состояний твердого тела – топологических изоляторов, называемых также спиновыми квантовыми холловскими изоляторами [1, 2]. Данные системы примечательны тем, что являясь изоляторами в объеме, демонстрируют при низких температурах баллистический транспорт по поверхностным (краевым) состояниям [1, 2]. Особенности электронного спектра периодических трехмерных, двумерных и одномерных твердых тел диктуются симметрией кристаллической решетки и типом атомных орбиталей, формирующих решетку.

Существует несколько семейств пространственных кристаллических групп [3]:  $G_3^3$  – 230 трехмерных групп,  $G_2^3$  – 80 квазидвумерных групп слоев,  $G_2^2$  – 17 двумерных групп,  $G_1^3$  – 75 групп стержней и  $G_1^2$  – 7 групп бордюров (лент). Классификация неприводимых унитарных представлений (но не типов спектра в симметричных точках) для 230 групп Федорова–Шенфлиса приведена в [4]. На сегодняшний день, насколько нам известно, полная классификация неприводимых унитарных представлений только для групп  $G_2^2$  и  $G_1^2$  сделана в работах [5, 6] и [7] соответственно, а типов особенностей спектров для  $G_2^2$  – в работе [6]. Полная классификация для остальных групп отсутствует. Зонная теория твердого тела в случае трех-, двух- и одномерных периодических систем приводит к их разделению на металлы и изоляторы. Если заполненные и пустые состояния от-

делены энергетической щелью, то система является изолятором. Нарушение трансляционной инвариантности по одному из измерений для трехмерных кристаллов приводит к появлению специфических состояний, локализованных вблизи поверхности. Если данные состояния лежат по энергии в запрещенной зоне (вне проекций объемных зон), то они локализованы вблизи поверхности. В группах  $G_1^2$  трансляционная инвариантность по отношению к двумерным системам в группах  $G_2^2$  может быть нарушена по одному из двух направлений путем вырезания ленты. При этом возникают квазидвумерные структуры, периодические в одном направлении (по оси  $x$ , рис. 1а и б), ограниченные в поперечном направлении (ось  $y$ ) и имеющие “нулевую” толщину по вертикали (ось  $z$ ).

Уточним, что “нулевая” толщина по  $z$  не означает, что вертикальный размер должен быть атомарным. Он может быть конечным, существенно превышающим атомный. Это означает только то, что конечная толщина не должна приводить к появлению новых элементов симметрии по отношению к 7 изображенным на рис. 1а), например поворотных осей и плоскостей симметрии, протыкающих бордюры по толщине и параллельных поверхности вдоль оси  $x$ . При наличии таких элементов симметрии структура будет относиться к группам  $G_1^3$ . Ширина ленты также может быть любой по сравнению с атомными масштабами. Важно только то, что группы  $G_2^2$  имеют трансляционную инвариантность вдоль двух направлений, а группы  $G_1^2$  и  $G_1^3$  – вдоль одного направления.

В структурах бордюров могут возникать поверхностные (краевые) состояния на двух противополож-

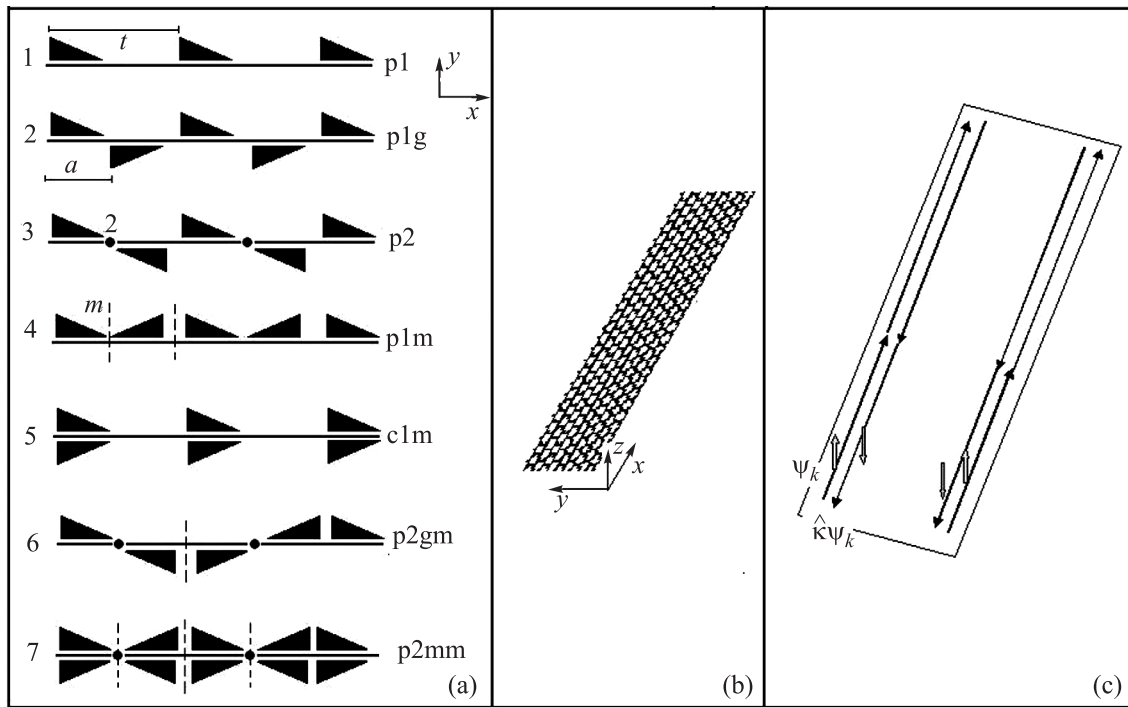


Рис. 1. (а) – Пространственные группы  $G_1^2$  с симметрией бордюров. (б) – Пример структуры с симметрией бордюров. (с) – Краевые состояния

ных границах бордюра – ленты. Если данные состояния лежат в запрещенной зоне (вне проекций объемных зон), то они локализованы на двух противоположных границах (“поверхностях”) ленты (рис. 1с).

**Крамерсовское вырождение, критерий Херринга и конические дираковские особенности спектра (поверхностных) краевых состояний.** Вид  $m$ -ой ветви электронного спектра в окрестности симметричных точек зоны Бриллюэна определяется собственными числами  $E_m(k)$  гамильтониана  $\hat{H}(k)$ . Структура гамильтониана определяется симметрией кристаллической структуры. В отсутствие внешнего магнитного поля и для немагнитной системы гамильтониан инвариантен по отношению к операции обращения времени. Дополнительные симметрии гамильтониана могут приводить к дополнительному вырождению уровней. Оператор  $\hat{K}$  обращения времени в бесспиновом случае является оператором комплексного сопряжения  $K_0$ . Если гамильтониан инвариантен по отношению к обращению времени и если  $\psi$  – решение уравнения Шредингера, отвечающее энергии  $E$ , то и  $\psi^* = \hat{K}\psi$  также является его решением с тем же значением энергии. При этом если функции  $\psi^*$  и  $\psi$  линейно-независимы, то одной энергии отвечает пара разных волновых функций. Возникает *дополнительное вы-*

*рождение*, связанное с инверсией времени: уровню с данной энергией отвечают две *разные* волновые функции. Если функции  $\psi^*$  и  $\psi$  *линейно-зависимы*, (выражаются друг через друга), то инвариантность по отношению к обращению времени *не приводит к дополнительному вырождению*.

**Критерий Херринга.** Существуют три вопроса, на которые необходимо ответить.

1. Приводит ли симметрия гамильтониана по отношению к инверсии времени к дополнительному вырождению в симметричных точках ЗБ?
2. Каков вид электронного спектра  $E(k)$  при отходе от симметричных точек ЗБ?
3. Каким образом симметрия по отношению к инверсии времени диктует устойчивость к упругому рассеянию (приводит к баллистическому транспорту)?

Ответ на первый вопрос дает критерий Херринга. Структуры бордюров периодичны в одном направлении. Поэтому зона Бриллюэна представляет собой отрезок. В зоне Бриллюэна имеются две точки с выделенной симметрией: точка  $\Gamma$  ( $k = 0$ ) – центр зоны Бриллюэна и точка  $X$  ( $k = \pm\pi/t$ ) – граница зоны. Кратность вырождения уровня энергии в некоторой точке  $k$  определяется размерностью неприводимого представления  $D(g)$  группы волнового вектора

$G_k$ . Инвариантность гамильтониана по отношению к обращению времени может приводить к дополнительному (принудительному) вырождению. Впервые этот вопрос применительно к электронному спектру в твердых телах был рассмотрен Херрингом [8] (см. также [9]).

Пусть  $\psi_k$  – набор волновых функций, относящихся к представлению  $\mathcal{D}(g)$ , а  $\hat{K}\psi_k$  – функции, полученные из  $\psi_k$  операцией обращения времени (крамерсовского сопряжения  $\hat{K}$ ), которые преобразуются по сопряженному представлению  $\mathcal{D}^*(g)$ . Напомним, что блоховской волновой функции  $\psi_k$  отвечает значение квазиимпульса  $k$ , а крамерсовской сопряженной паре  $\hat{K}\psi_k$  – значение квазиимпульса  $-k$ . Сама волновая функция есть  $\psi_k(x, y) = u_k(x, y)e^{ikx}$ , далее для краткости координатные зависимости мы явно не выписываем. При действии операции обращения времени возможны три случая (см. [8, 9]).

А. Наборы функций  $\psi_k$  и  $\hat{K}\psi_k$  линейно-зависимы (линейным образом выражаются друг через друга). В этом случае представления  $\mathcal{D}(g)$  и  $\mathcal{D}^*(g)$  эквивалентны. Иначе говоря,  $\psi_k$  и  $\hat{K}\psi_k$  фактически принадлежат одному представлению.

В. Наборы функций  $\psi_k$  и  $\hat{K}\psi_k$  линейно-независимы, а представления  $\mathcal{D}(g)$  и  $\mathcal{D}^*(g)$  неэквивалентны и имеют комплексно-сопряженные характеры ( $\chi(g) \neq \chi^*(g)$ ).

С. Наборы функций  $\psi_k$  и  $\hat{K}\psi_k$  линейно-независимы, а представления  $\mathcal{D}(g)$  и  $\mathcal{D}^*(g)$  эквивалентны и имеют вещественные характеры ( $\chi(g) = \chi^*(g)$ ).

В последних двух случаях инвариантность по отношению к обращению времени приводит к объединению различных представлений и, соответственно, к принудительному вырождению уровней. Одному уровню энергии отвечают две разные волновые функции,  $\psi_k$  и  $\hat{K}\psi_k$ , которые принудительно объединяются в одно представление удвоенной размерности. В случае А волновые функции  $\psi_k$  и  $\hat{K}\psi_k$  принадлежат одному представлению и инверсия времени не приводит к дополнительному вырождению. Необходимо уметь различать три упомянутых случая. Указанный критерий Херринга [8] позволяет их различать, если известны характеры представлений группы волнового вектора. Критерий гласит

$$\Sigma = \frac{1}{N_G} \sum_{G'_k} \chi_k(g^2) \delta_{k, -gk} = \begin{cases} K^2 & \text{в случае А,} \\ 0 & \text{в случае В,} \\ -K^2 & \text{в случае С,} \end{cases} \quad (1)$$

где  $K^2 = 1$  для обычных представлений и  $K^2 = -1$  для спинорных представлений,  $G_k$  – группа волново-

го вектора,  $G'_k$  – группа волнового вектора, не содержащая примитивных трансляций.

Поскольку операция инверсии времени переводит  $k$  в  $-k$ , в каждом из случаев А–С в зависимости от пространственной симметрии решетки возможны следующие варианты: 1) векторы  $k$  и  $-k$  эквивалентны; 2) векторы входят в одну звезду группы волнового вектора; 3) векторы  $k$  и  $-k$  входят в разные звезды, но пространственная группа содержит элементы симметрии  $g$ , переводящие  $k$  в  $-k$ ,  $-k = gk$ . Ниже мы увидим, что в нашей ситуации реализуются только случаи А<sub>1</sub>, В<sub>1</sub> и С<sub>1</sub>.

Для ответа на второй вопрос о виде электронного спектра в окрестности симметричных точек зоны Бриллюэна удобно воспользоваться методом инвариантов, изложенным в монографии [9]. Этот метод кратко сводится к следующему. Электронный спектр вблизи симметричных точек определяется гамильтонианом  $\hat{\mathcal{H}}(k)$  (где  $k$  отсчитывается от симметричной точки). Степень вырождения определяется размерностью матрицы  $\mathcal{D}^k$  соответствующего представления группы волнового вектора  $G_k$ . Указанный гамильтониан может быть представлен в виде [9]

$$\hat{\mathcal{H}}(k) = \sum_m \sum_l \lambda_m X_l^m K_l^{*m}, \quad (2)$$

где  $X_l^m$  – базисные матрицы, преобразующиеся по некоторому представлению, которые удобно выбрать эрмитовыми,  $K_l^{*m}$  – составленные из компонент волнового вектора компоненты тензора, преобразующиеся по сопряженному по отношению к базисным матрицам представлению,  $\lambda_m$  – материальные константы, которые являются вещественными, если базисные матрицы выбраны эрмитовыми. При этом 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. Ниже нас будут интересовать первые не исчезающие члены разложения по  $k$  (для них кристаллическая симметрия и инверсия времени не диктуют равенства нулю констант  $\lambda_m$ ). Симметрия гамильтониана по отношению к обращению времени,  $\hat{K}\hat{\mathcal{H}}(k)\hat{K}^{-1} = \hat{\mathcal{H}}$ , приводит к дополнительным соотношениям на базисные матрицы. Опуская технические детали (подробности см. в [9]), воспользуемся формулами (1), (2) для получения инвариантов.

Решетка 1 (p1). Элементы симметрии –  $\{e\}$  и  $\{e|t\}$  (единичный элемент и трансляции на период  $t$ ).

Решетка 2 (p1g). Элементы симметрии –  $\{e\}$  и  $\{e|\sigma_{t/2}\}$  (единичный элемент и плоскость скольжения, т.е. отражение и сдвиг на полпериода  $a = t/2$ ).

Решетка 3 (p2). Элементы симметрии –  $\{e\}$ ,  $\{C_2\}$ ,  $\{e|t\}$  (единичный элемент, ось второго порядка и трансляции на период  $t$ ).

Решетка 4 (p1m). Элементы симметрии –  $\{e\}$ ,  $\{\sigma_v\}$  и  $\{e|t\}$  (единичный элемент, плоскость симметрии, перпендикулярная оси, и трансляции на период  $t$ ).

Решетка 5 (c1m). Элементы симметрии –  $\{e\}$ ,  $\{\sigma_v\}$  и  $\{e|t\}$  (единичный элемент, плоскость отражения, параллельная оси, и трансляции на период  $t$ ).

Решетка 6 (p2gm). Элементы симметрии –  $\{e\}$ ,  $\{\sigma_v\}$ ,  $\{e|\sigma_{t/2}\}$  и  $\{e|t\}$  (единичный элемент, плоскость отражения, перпендикулярная оси, плоскость скользящего отражения со сдвигом на полпериода  $a = t/2$ , параллельная оси, и трансляции на период  $t$ ).

Решетка 7 (p2mm). Элементы симметрии –  $\{e\}$ ,  $\{C_2\}$ ,  $\{\sigma_v\}$ ,  $\{\sigma'_v\}$  и  $\{e|t\}$  (единичный элемент, ось второго порядка, две плоскости отражения и трансляции на период  $t$ ).

Всевозможные нетривиальные инварианты (кроме конического дираковского закона дисперсии, во всех группах возможен также тривиальный квадратичный закон дисперсии) приведены в таблице. В первой ее колонке указан номер группы, во второй – симметричные точки в зоне Бриллюэна (ЗБ) с соответствующими группами волнового вектора (спинорные представления снабжены штрихами), в третьей отражен случай по Херрингу, в четвертой – представления группы направлений, содержащихся в прямом произведении  $\mathcal{D}_\mu^k \times \mathcal{D}_\mu^{*k}$ , в пятой – инварианты.

**Пример вычисления инвариантов для простейшей группы p1.** В группе p1 имеется только единичный элемент симметрии,  $g = e$ . Для спинорной (двойной) группы добавляется еще один элемент,  $Q$  (поворот на  $2\pi$ ). Для определения случая по Херрингу требуются характеры от квадратов элементов симметрии. С учетом того что  $e^2 = e$  и  $(eQ)^2 = e$ , в (1) достаточно провести суммирование только по элементам обычной (не двойной) группы. Поскольку  $\chi(e) = 1$  и в точках  $\Gamma$  и  $X$   $k$  и  $-k$  эквивалентны, в (1)  $\Sigma = 1$  и имеет место случай  $c_1$  по Херрингу: происходит объединение двух эквивалентных одномерных представлений. Остается выяснить число четных и нечетных базисных матриц относительно инверсии времени в (2). Поскольку объединяются два представления,  $\mathcal{D}_\mu$  и  $\mathcal{D}_\mu^*$ , базисные матрицы в (2) преобразуются по представлению  $\hat{D} \times \hat{D}$ , где  $\hat{D} = \begin{pmatrix} \mathcal{D}_\mu & 0 \\ 0 & \mathcal{D}_\mu^* \end{pmatrix}$ , которое, вообще говоря, является приводимым. Разложение представления  $\hat{D} \times \hat{D}$  на неприводимые представления груп-

пы волнового вектора дает число базисных матриц  $N_D = \frac{1}{n_\mu} \sum_{g \in G'_k} |\chi_D(g)|^2 \chi_{D_\mu}(g) = 4$ . Поскольку в группе волнового вектора один элемент ( $g = e$ ), и  $\chi_D(g) = 2$ ,  $\chi_{D_\mu}(g) = 1$ , число элементов в группе волнового вектора  $n_\mu = 1$ . В качестве четырех базисных матриц (напомним, что в данном случае это просто базисные матрицы, не имеющие отношения к спину) удобно выбрать матрицы  $I, \sigma_x, \sigma_y, \sigma_z$ . Одни из них являются четными, а другие – нечетными при инверсии времени. Гамильтониан в базисе функций представлений  $\mathcal{D}$  и  $\mathcal{D}^*$  принимает вид  $\hat{\mathcal{H}}(k) = \begin{pmatrix} \mathcal{H}_{11}(k) & \mathcal{H}_{12}(k) \\ \mathcal{H}_{21}(k) & \mathcal{H}_{22}(k) \end{pmatrix}$ , где  $\mathcal{H}_{ij}(k)$  зависят от компонент тензоров, составленных из степеней волнового вектора  $k$ . Инверсия времени накладывает дополнительные условия на матричные элементы базисных матриц. Четные и нечетные по времени матрицы могут входить в гамильтониан (2) только, соответственно, с четными и нечетными компонентами тензоров из  $k$ . Пусть  $f = 1$  для четных и  $f = -1$  для нечетных компонент  $K$ . Тогда инверсия времени диктует условия (детали см. в [9])  $\mathcal{H}_{22}(k) = \mathcal{H}_{11}^*(fk)$  и  $\mathcal{H}_{12}(k) = K^2 \mathcal{H}_{21}^*(fk)$ . В спинорном случае  $K^2 = -1$ . Отсюда следует, что матрицы  $\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z$  являются нечетными относительно инверсии времени и могут входить в гамильтониан (2) с нечетными степенями  $k$  ( $f = -1$ ), начиная с первой степени, причем каждая со своей материальной константой  $\lambda_{x,y,z}$ . Матрица  $I$  является четной по времени и входит в (2) с четными степенями  $k$  ( $f = 1$ ),  $Ik^2$ .

Как следует из таблицы, рассматриваемый гамильтониан в симметричных точках имеет вид

$$\hat{\mathcal{H}}(k) = \sum_m \lambda_m \sigma_m k, \quad m = 1, 2, 3, \quad (3)$$

где число независимых материальных констант  $\lambda_m$  зависит от симметрии решетки, а  $\sigma_m$  – матрицы Паули. Конический дираковский вид спектра ( $E(k) \propto \pm |k|$ ; рис. 2) в симметричных точках без учета спин-орбитального взаимодействия возникает в группах, имеющих плоскость скользящего отражения (группы 2 и 6). При этом в данном случае каждая ветвь спектра двукратно вырождена по спину.

При учете спин-орбитального взаимодействия (для спинорных представлений) конический вид спектра (принудительное вырождение) в симметричных точках возникает в результате комбинации элементов симметрии пространственной решетки и инвариантности по отношению к обращению времени (крамерсовского сопряжения).

Во всех группах, кроме p2gm и p2mm, конический спектр возникает из-за принудительного вырожде-

Решетка	Точка ЗБ	Случай по Херрингу	Представл.	Нечетн.
p1	$\Gamma', X' (p1)$	$c_1$	$A$	$\sigma_x k, \sigma_y k, \sigma_z k$
p1g	$X (p1g)$	$b_1$	$A^+$	$\sigma_z k$
	$\Gamma' (p1g)$	$b_1$	$A^+$	$\sigma_z k$
	$X' (p1g)$	$c_1$	$A^+$	$\sigma_x k, \sigma_y k, \sigma_z k$
p2	$\Gamma', X' (p2)$	$b_1$	$A_2$	$\sigma_x k, \sigma_y k$
p1m	$\Gamma', X' (p1m)$	$b_1$	$A^-$	$\sigma_x k, \sigma_y k$
c1m	$\Gamma', X' (c1m)$	$b_1$	$A^+$	$\sigma_z k$
p2gm	$X (p2gm)$	$a_1$	$B^+$	$\sigma_y k$
	$\Gamma' (p1gm)$	$a_1$	$A^+$	$\sigma_y k$
	$X' (p1gm)$	$b_1$	$A^+$	$\sigma_x k, \sigma_y k$
p2mm	$\Gamma', X' (p2mm)$	$a_1$	$B^-$	$\sigma_y k$

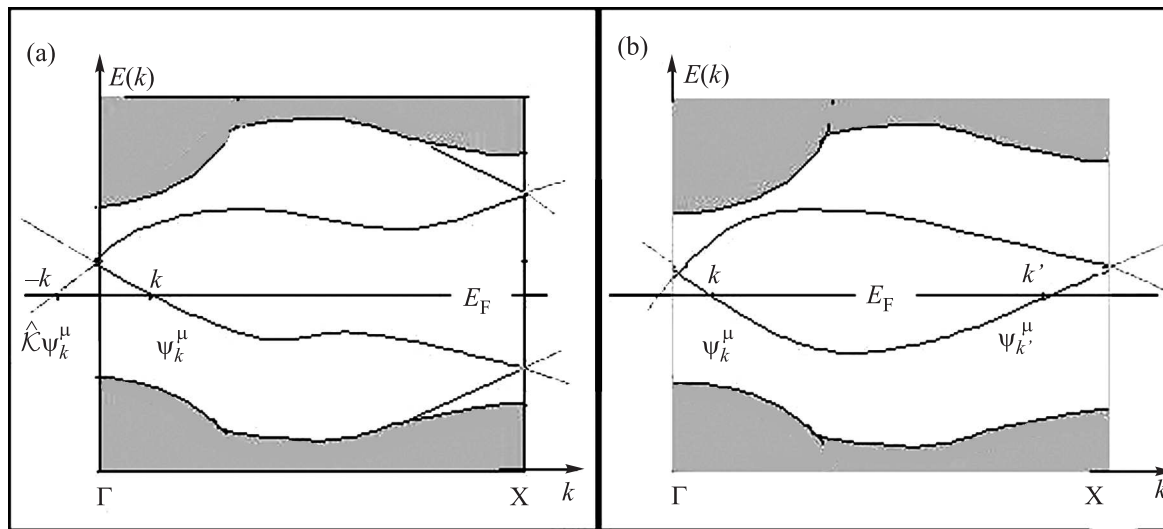


Рис. 2. Схематическое представление спектра краевых состояний. (а) – Состояния устойчивые к рассеянию. (б) – Состояния подверженные упругому рассеянию

ния, когда функции  $\psi_k$  и  $\hat{K}\psi_k$  линейно-независимы и принадлежат разным представлениям (случаи В и С). Для групп p2gm и p2mm реализуется случай А по Херрингу: функции  $\psi_k$  и  $\hat{K}\psi_k$  принадлежат одному представлению. Однако это представление само по себе уже является двумерным: спектр вырожден в симметричной точке и имеет дираковский вид в ее окрестности. Сами функции  $\psi_k$  и  $\hat{K}\psi_k$  являются базисными (и, соответственно, ортогональными) функциями двумерного спинорного представления. Это приводит к некоторой специфике при упругом рассеянии на примесях (см. ниже).

**Баллистический транспорт по краевым состояниям.** Поверхностные (краевые) состояния с дираковским спектром локализованы вблизи границы ленты и не вырождены по проекциям момента. При этом электроны в состояниях  $\psi_k (E_+(k))$  и  $\hat{K}\psi_k (E_-(k))$  с разными проекциями и момента движутся вдоль каждой границы в разные сторо-

ны, поскольку  $v_+ = dE_+(k)/dk = -v_- = dE_-(k)/dk$  (рис. 1с). При приложении электрического поля функция распределения становится асимметричной по импульсу. Особенностью данных систем при  $T \rightarrow 0$  является баллистический транспорт по поверхностным (краевым) состояниям. Каждая ветвь поверхностных состояний дает вклад, равный  $e^2/h$ .

Напомним, что  $\hat{K}\psi_k$  имеет квазиимпульс  $-k$ . Поэтому когда уровень Ферми находится в запрещенной зоне (вне проекций объемных зон; рис. 2а), единственный канал упругого рассеяния состоит в рассеянии с одной ветви конуса из состояния  $\psi_k$  на другую ветвь конуса в состоянии  $\hat{K}\psi_k$  (рис. 2а) или наоборот в зависимости от приложенного электрического поля. Для баллистического транспорта при  $T \rightarrow 0$  по поверхностным (краевым) состояниям необходимо тождественное равенство нулю матричного элемента упругого рассеяния на *любом* потенциале  $V$  для состояний с разным значением квазиимпульса, но с

одной и той же энергией ( $E_\nu(k') = E_\mu(k)$ ), т.е. состояний  $\psi_k^\mu$  и  $\psi_{k'}^\nu$ ,  $\mathcal{D}_\mu(g)$  и  $\mathcal{D}_\nu(g)$  ( $\langle \psi_{k'}^\nu | V | \psi_k^\mu \rangle$ ). Пусть потенциал преобразуется по некоторому представлению группы симметрии  $\mathcal{D}_V(g)$ . Тогда матричный элемент (5) преобразуется по произведению представлений  $\mathcal{D}_\nu^*(g) \times \mathcal{D}_V(g) \times \mathcal{D}_\mu(g)$ . Матричный элемент отличен от нуля только в том случае, когда произведение представлений содержит в своем разложении неприводимые представления единичное представление. Инверсия времени и тот факт, что рассеяние происходит между состояниями, связанными операцией инверсии времени, приводит к дополнительным ограничениям и тождественному равенству нулю матричного элемента рассеяния независимо от вида потенциала  $V$ . Матричный элемент равен нулю даже в том случае, когда разложение представлений  $\mathcal{D}_\nu^*(g) \times \mathcal{D}_V(g) \times \mathcal{D}_\mu(g)$  содержит единичное представление. Для потенциалов,  $V$  инвариантных относительно инверсии времени, имеем  $(\hat{\mathcal{K}}V\hat{\mathcal{K}}^{-1})^+ = \hat{\mathcal{K}}V^+\hat{\mathcal{K}}^{-1}$ ,

$$\begin{aligned} \langle \psi_{k'}^\nu | V \psi_k^\mu \rangle &= \langle \hat{\mathcal{K}}\psi_{k'}^\nu | \hat{\mathcal{K}}V\psi_k^\mu \rangle^* = \\ &= \langle \hat{\mathcal{K}}\psi_{k'}^\nu | \hat{\mathcal{K}}V\hat{\mathcal{K}}^{-1}\hat{\mathcal{K}}\psi_k^\mu \rangle^* = \langle \hat{\mathcal{K}}\psi_k^\mu | \hat{\mathcal{K}}V^+\hat{\mathcal{K}}^{-1}\hat{\mathcal{K}}\psi_{k'}^\nu \rangle, \end{aligned} \quad (4)$$

$$\langle \psi_{k'}^\nu | V \psi_k^\mu \rangle = \langle \psi_k^\mu | V^+ \psi_{k'}^\nu \rangle^*,$$

где в бесспиновом случае

$$\hat{\mathcal{K}}\psi = K_0\psi = \psi^*, \quad \hat{\mathcal{K}}^2\psi = K_0^2\psi = \psi, \quad (5)$$

а в спиновом случае

$$\begin{aligned} \hat{\mathcal{K}}\psi &= \sigma_y K_0 \psi = \sigma_y \psi^*, \\ \hat{\mathcal{K}}^2\psi &= \sigma_y K_0 \sigma_y K_0 \psi^* = \sigma_y \sigma_y^* \psi = -\psi. \end{aligned} \quad (6)$$

Пусть имеет место ситуация, изображенная на рис. 2а, когда поверхностные состояния пересекают уровень Ферми между точками  $\Gamma$  и  $X$  только один раз. Тогда рассеяние возможно между состояниями  $k$  и  $-k$ . Специфика краевых состояний состоит в том, что рассеяние может происходить только между состояниями с импульсами  $k$  и  $-k$ , связанными операцией обращения времени,  $\psi_{k'}^\nu = \hat{\mathcal{K}}\psi_k^\mu$ , которая накладывает фундаментальные ограничения на матричные элементы рассеяния. С учетом (4)–(6) и того, что  $\psi_{k'}^\nu = \hat{\mathcal{K}}\psi_k^\mu$ , матричный элемент рассеяния становится равным

$$\begin{aligned} \langle \psi_{k'}^\nu | V \psi_k^\mu \rangle &= \langle \hat{\mathcal{K}}\psi_k^\mu | \hat{\mathcal{K}}V^+\hat{\mathcal{K}}^{-1}\hat{\mathcal{K}}\psi_k^\nu \rangle = \\ &= \langle \hat{\mathcal{K}}\psi_k^\mu | \hat{\mathcal{K}}V^+\hat{\mathcal{K}}^{-1}\hat{\mathcal{K}}^2\psi_k^\mu \rangle = \langle \psi_k^\nu | V \hat{\mathcal{K}}^2\psi_k^\mu \rangle = \\ &= -\langle \psi_k^\nu | V \psi_k^\mu \rangle. \end{aligned} \quad (7)$$

Здесь было учтено, что для спиновых представлений  $\hat{\mathcal{K}}\psi_k^\nu = \hat{\mathcal{K}}^2\psi_k^\mu = -\psi_k^\mu$ . Отсюда следует, что мат-

ричный элемент для спиновых представлений тождественно равен нулю:

$$\langle \psi_k^\mu | V \hat{\mathcal{K}}\psi_k^\mu \rangle \equiv 0. \quad (8)$$

Для бесспинового случая имеем  $\hat{\mathcal{K}}\psi_k^\nu = \hat{\mathcal{K}}^2\psi_k^\mu = \psi_k^\mu$ . Поэтому вместо (8) получим

$$\langle \psi_k^\nu | V \psi_k^\mu \rangle = \langle \psi_k^\nu | V \hat{\mathcal{K}}^2\psi_k^\mu \rangle = \langle \psi_k^\nu | V \psi_k^\mu \rangle, \quad (9)$$

что не означает тождественного равенства нулю матричного элемента и устойчивости к рассеянию.

Имеется одна тонкость, на которую до сих пор не обращалось внимания при анализе рассеяния в краевых состояниях. Конический спектр – принудительное вырождение за счет кристаллической симметрии и инверсии времени – возникает при объединении одномерных представлений в случаях В и С по Херрингу. В этих случаях рассеяние происходит между состояниями  $\psi_k^\mu$  и  $\psi_{-k}^\mu$ , принадлежащими разным одномерным представлениям, объединяющимся в одно за счет инверсии времени. Поэтому устойчивость к рассеянию диктуется инверсией времени.

Однако в случае А по Херрингу инверсия времени не приводит к объединению представлений и рассеяние происходит между состояниями  $\psi_k^\mu$  и  $\psi_{-k}^\mu$ , принадлежащими одному и тому же двумерному представлению, а не двум разным одномерным. Подчеркнем, что в этом случае вырождение спектра связано только с элементами кристаллической симметрии. Иначе говоря, даже в отсутствие симметрии к инверсии времени в данном случае все равно возникнет конический спектр, вырожденный в симметричных точках. Но даже тогда матричный элемент будет равен нулю.

В случае А по Херрингу (группы 6 и 7) волновые функции  $\psi_k^\mu$  и  $\psi_{-k}^\mu$  являются ортогональными базисными функциями одного двумерного спиринового представления и могут быть представлены в виде  $\psi_k^\mu = u_k^\mu(x, y) \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$  и  $\psi_{-k}^\mu = u_{-k}^\mu(x, y) \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$  [9].

Еще раз подчеркнем, что двумерность представления и вид базисных функций никак не связаны с симметрией к инверсии времени. По своим трансформационным свойствам в кристаллических группах 6 и 7 пара функций  $\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$  и  $\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$  совпадает со свойствами базисных функций для спина  $1/2 \mid \uparrow \rangle$  и  $\mid \downarrow \rangle$ . Очевидно, что матричный элемент потенциала  $\hat{V} = V \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$  скалярной (немагнитной) смеси между этими функциями тождественно равен

нулю. Подчеркнем еще раз, что для равенства нулю матричного элемента не требуется инверсии времени. Разумеется, инверсия времени переводит одну базисную функцию в другую,  $\sigma_y \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \rightarrow \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$ , но равенство нулю матричного элемента фактически связано с двумерностью спинорного представления, диктуемого только кристаллической симметрией.

Баллистический транспорт возможен только в том случае, когда вне проекций объемных зон энергии поверхностных состояний имеют однократное пересечение в первой зоне Бриллюэна с уровнем Ферми между точками  $\Gamma$  и  $X$  (рис. 2а). В этом случае допустим единственный канал упругого рассеяния между состояниями с  $k$  и  $-k$ . Однако матричный элемент рассеяния тождественно равен нулю. Если имеются два пересечения уровня Ферми (рис. 2б), то открывается новый канал рассеяния между состояниями  $\psi_k^\mu$  и  $\psi_{-k}^\mu$ . При этом аргументы, основанные на ограничениях, диктуемых инверсией времени, не работают и матричный элемент рассеяния на примеси не равен нулю. Поведение уровней вдали от симметричных точек зависит от конкретных значений интегралов перекрытия, если используется гамильтониан в методе сильной связи. Поэтому ответ на вопрос о том, какая из ситуаций реализуется (рис. 2а или 2б), требует проведения зонных расчетов по всей зоне Бриллюэна для конкретной структуры.

**Заключение.** Итак, вид электронного спектра определяется исключительно симметрией пространственной группы решетки и симметрией по отношению к обращению времени. В группах  $G_2^2$  возможны только следующие особенности спектра (кроме тривиального  $k^2$ ) [6]:

- конический  $E^2(k_x, k_y) = k_x^2 + k_y^2$ ,
- вырожденный конус (желоб)  $E^2(k_x, k_y) = k_y^2$ ,
- гиперболический  $E^2(k_x, k_y) = (k_x^2 - k_y^2)^2$ ,
- кубический  $E^2(k_x, k_y) = (k_x^3 - 3k_x k_y^2)^2$ ,
- параболический  $E^2(k_x, k_y) = (k_x^2 + k_y^2)^2$ .

(10)

Желоб (вырожденный конус  $E(k_x, k_y) = \pm \sqrt{k_y^2}$ ) представляет собой плоские зоны вдоль определенных направлений. Они возникают только в группах семейства  $G_2^2$  [6]. Данный вид особенности спектра диктуется исключительно элементами симметрии пространственной группы и инверсией времени, т.е. без привлечения дополнительных, вводимых “руками” симметрий гамильтониана типа симметрии между валентной зоной и зоной проводимо-

сти (электронно-дырочная симметрия). Как видно из (11), кроме линейного закона дисперсии, возможны зависимости с другими степенями по  $k$  – кубические и биквадратичные.

В семействе кристаллических групп  $G_1^2$ , кроме тривиального  $k^2$ , допустим только нетривиальный конический вид спектра,  $E(k) = \pm \lambda \sqrt{k^2}$ . Это связано с тем, что пространственные кристаллические группы  $G_1^2$  являются более “бедными” в смысле элементов симметрии, чем двумерные группы  $G_2^2$  и  $G_3^3$ . Материальная константа  $\lambda$ , определяющая раствор конуса может быть любой, в том числе и нулем (плоские зоны). Однако только кристаллическая симметрия и инверсия времени *не диктуют равенства нулю константы*  $\lambda$ . Если наложить “руками” дополнительные симметричные ограничения на гамильтониан типа электрон-дырочной симметрии, как это сделано, например, в работах [10, 11], то при вырезании ленты из плоскости графена вдоль разных кристаллографических направлений можно получить для ряда направлений плоские зоны. Важно отметить, что плоские зоны при этом диктуются дополнительной электрон-дырочной симметрией модельного гамильтониана, а не кристаллической симметрией и инверсией времени. Плоские зоны на границах встречаются и в других системах. Например, для границы висмута Bi(100) они известны еще с 1987 г. [12] (в работах [12] приведены также другие типы особенностей, перечисленные выше, для систем типа Bi(111), As(111), SnTe(100)). Однако, как сказано выше, они связаны с дополнительной симметрией между электронами и дырками. Отказ от этой дополнительной электрон-дырочной симметрии гамильтониана, которой в реальном графене нет, приводит к  $\lambda \neq 0$ . В любом случае плоские зоны – это тот же одномерный конус с материальной константой  $\lambda = 0$ , равенство нулю которой может быть получено навязыванием дополнительных симметрий по отношению к кристаллографическим. Таким образом, плоские зоны являются частным случаем одномерного конуса без дисперсии ( $\lambda = 0$ ) и целиком укладываются в приведенную классификацию спектров в системах лент, которая оказывается исчерпывающей. Полная классификация особенностей спектра в системах типа слоев (группа  $G_2^3$ ), например упаковке из конечного числа слоев графена, насколько нам известно, до сих пор не проведена. Имеются только частные результаты [13].

Отметим, что влияние кристаллических симметрий на особенности поверхностных состояний рассмотрено в работе [14]. В рамках модельного гамильтониана сильной связи с электрон-дырочной симмет-

рий в бесспиновом случае (см. формулу (3) и рис. 2 в [14]) для решеток с осями симметрии  $C4$  и  $C6$  получен спектр вида  $E(k_x, k_y) = \pm|k_x^2 + k_y^2|$  (касающиеся параболы в точках  $\Gamma$ ,  $M$  и  $\Gamma$ ,  $K$ ). В связи с этим заметим, что данный вид спектра уже был приведен ранее в работе [6] (см. также формулу (11) выше) при общем симметричном анализе (группы  $10$  ( $p4$ ) и группа  $16$  ( $p6$ ); см. формулы (10), (23), (24) в [6]). Получены также и другие особенности спектра в бесспиновом и спиновом случаях, которые отсутствуют в [14].

В работе [15] приведен анализ топологических особенностей (так называемая  $\mathcal{Z}_2$ -классификация) в 17 поверхностных решетках групп  $G_2^2$  (см. табл. 1 в [15]). Для вычисления  $\mathcal{Z}_2$ -инвариантов требуется явный вид блоховских функций по всей зоне Бриллюэна. Как минимум необходимо перечислить все типы особенностей электронного спектра в симметричных точках, диктуемые структурой неприводимых представлений кристаллической группы. Однако типы особенностей в работе [15], в отличие от [6], отсутствуют. Для вычисления использовались модельные гамильтонианы в приближении сильной связи с учетом интегралов перекрытия ближайших и следующих соседей в решетке. Поскольку даже перечисление всех особенностей отсутствует, возникают сильные сомнения в полноте приведенной  $\mathcal{Z}_2$ -классификации.

1. M. Z. Hasan and C. L. Kane, Rev. Mod. Phys. **82**, 3045 (2010).
2. X.-L. Qi and Sh.-Ch. Zhang, Rev. Mod. Phys. **83**, 1057 (2011).
3. Кристаллография (под ред. Б. К. Вайнштейна), М.: Наука, 1979, т. 1. (1979).
4. О. В. Ковалев, *Неприводимые и индуцированные представления и копредставления федоровских групп*, М.: Наука, 1986, с. 367.
5. S. V. Meshkov and S. N. Molotkov, Surface Science **240**, 263 (1990).
6. С. Н. Молотков, Письма в ЖЭТФ **90**, 382 (2009).
7. С. Н. Молотков, Письма в ЖЭТФ **94**, 306 (2011).
8. C. Herring, Phys. Rev. **52**, 361 (1937).
9. Г. Л. Бир, Г. Е. Пикус, *Симметрия и деформационные эффекты в полупроводниках*, М.: Наука, 1972.
10. Sh. Ryu and Y. Hatsugai, Phys. Rev. Lett. **89**, 077002 (2002).
11. Т. Т. Heikkilä, N. V. Kopnin, and G. E. Volovik, Письма в ЖЭТФ **94**, 252 (2011).
12. С. Н. Молотков, В. В. Татарский, Поверхность **5**, 46 (1987); **9**, 65 (1987); **11**, 14 (1987); **5**, 17 (1988).
13. Т. Т. Heikkilä and G. E. Volovik, Письма в ЖЭТФ **92**, 751 (2010).
14. L. Fu, Phys. Rev. Lett. **106**, 106802 (2011).
15. R.-J. Slager, A. Mesaros, V. Juriycic, and J. Zaanen, Nature Phys. **9**, 98 (2013).