Письма в ЖЭТФ, том 97, вып. 6, с. 384 – 391

О баллистическом транспорте в топологических изоляторах со структурой бордюров

С. Н. Молотков, Т. А. Потапова+

Институт физики твердого тела РАН, 142432 Черноголовка, Россия

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

+*Национальный исследовательский университет "Высшая школа экономики", 101000 Москва, Россия*

Поступила в редакцию 26 декабря 2012 г.
После переработки 11 февраля 2013 г.

Обсуждается симметрийная природа возникновения специфических поверхностных (краевых) состояний на границах низкоразмерных структур с симметрией лент (бордюров), инвариантных по отношению к обращению времени. Выяснены симметрийные 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 отделены 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. 1a и b), 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. 1a), например поворотных осей и плоскостей симметрии, протыкающих бордюр 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-

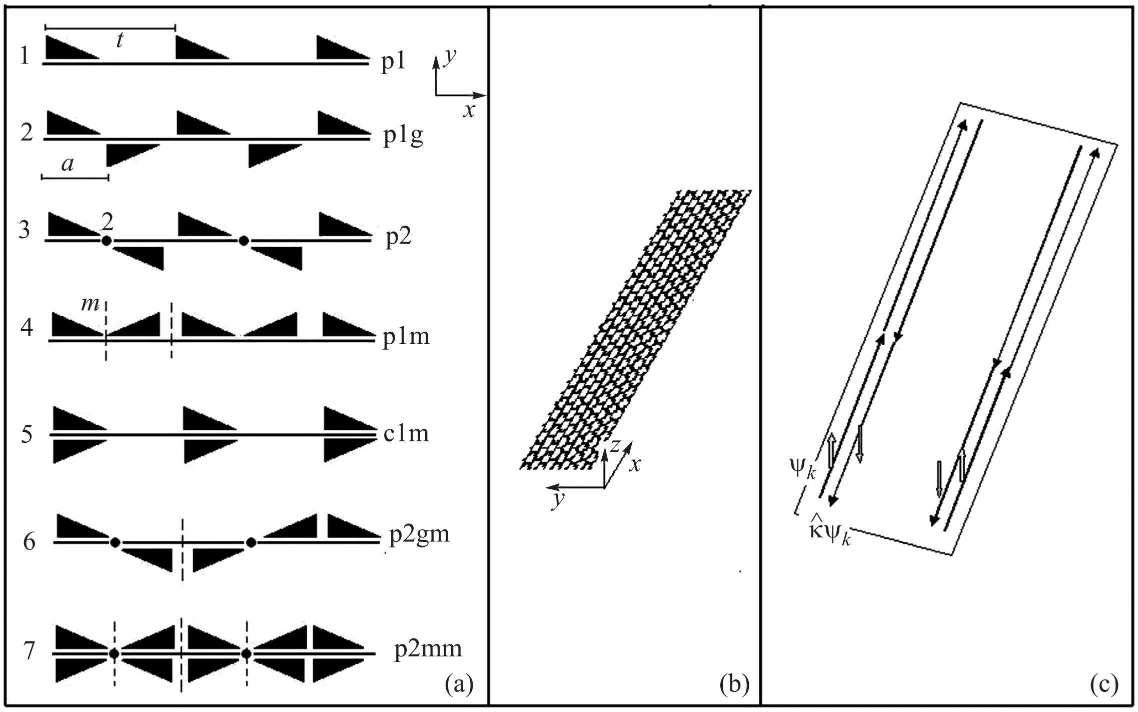

Рис. 1. (a) – Пространственные группы G_1^2 с симметрией бордюров. (b) – Пример структуры с симметрией бордюров. (c) – Краевые состояния

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. 1c).

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 $\hat{\mathcal{H}}(k)$. 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 $\hat{\mathcal{K}}$ обращения времени в бесспиновом случае является оператором комплексного сопряжения K_0. Если гамильтониан инвариантен по отношению к обращению времени и если ψ – решение уравнения Шредингера, отвечающее энергии E, то и $\psi^* = \hat{\mathcal{K}}\psi$ также является его решением с тем же значением энергии. При этом если функции ψ^* и ψ *линейно-независимы*, то одной энергии отвечает пара разных волновых функций. Возникает *дополнительное вырождение*, связанное с инверсией времени: уровню с данной энергией отвечают две *разные* волновые функции. Если функции ψ^* и ψ *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 Γ $(k = 0)$ – центр зоны Бриллюэна и точка X $(k = \pm\pi/t)$ – граница зоны. Кратность вырождения уровня энергии в некоторой точке k определяется размерностью неприводимого представления $\mathcal{D}(g)$ 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 ψ_k – набор волновых функций, относящихся к представлению $\mathcal{D}(g)$, а $\hat{\mathcal{K}}\psi_k$ – функции, полученные из ψ_k операцией обращения времени (крамерсовского сопряжения $\hat{\mathcal{K}}$), которые преобразуются по сопряженному представлению $\mathcal{D}^*(g)$. Напомним, что блоховской волновой функции ψ_k отвечает значение квазиимпульса k, а крамерсовской сопряженной паре $\hat{\mathcal{K}}\psi_k$ – 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]).

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

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

C. Наборы функций ψ_k и $\hat{\mathcal{K}}\psi_k$ 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, ψ_k и $\hat{\mathcal{K}}\psi_k$, которые принудительно объединяются в одно представление удвоенной размерности. В случае A волновые функции ψ_k и $\hat{\mathcal{K}}\psi_k$ 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

$$\Sigma=\frac{1}{N_{\mathrm{G}}}\sum_{\mathrm{G}'_k}\chi_k(g^2)\delta_{k,-gk}=\begin{cases} K^2 & \text{в случае A,}\\ 0 & \text{в случае B,}\\ -K^2 & \text{в случае C,}\end{cases}\tag{1}$$

где $K^2=1$ для обычных представлений и $K^2=-1$ для спинорных представлений, G_k – группа волнового вектора, G'_k – группа волнового вектора, не содержащая примитивных трансляций.

Поскольку операция инверсии времени переводит k в $-k$, в каждом из случаев A–C 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 A_1, B_1 и C_1.

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 $\mathcal{H}(k)$ (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]

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

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, λ_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 неисчезающие члены разложения по k (для них кристаллическая симметрия и инверсия времени *не диктуют равенства нулю констант* λ_m). Симметрия гамильтониана по отношению к обращению времени, $\hat{\mathcal{K}}\hat{\mathcal{H}}(k)\hat{\mathcal{K}}^{-1}=\hat{\mathcal{H}}$, 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 $\mathcal{D}^k_\mu \times \mathcal{D}^{*k}_\mu$, 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 2π). 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 Γ 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 $\hat{\mathcal{D}} \times \hat{\mathcal{D}}$, где $\hat{\mathcal{D}} = \begin{pmatrix} \mathcal{D}_\mu & 0 \\ 0 & \mathcal{D}^*_\mu \end{pmatrix}$, которое, вообще говоря, является приводимым. Разложение представления $\hat{\mathcal{D}} \times \hat{\mathcal{D}}$ на неприводимые представления группы 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

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

где число независимых материальных констант λ_m зависит от симметрии решетки, а σ_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	Γ', X' (p1)	c_1	A	$\sigma_x k$, $\sigma_y k$, $\sigma_z k$
p1g	X (p1g)	b_1	A^+	$\sigma_z k$
	Γ' (p1g)	b_1	A^+	$\sigma_z k$
	X' (p1g)	c_1	A^+	$\sigma_x k$, $\sigma_y k$, $\sigma_z k$
p2	Γ', X' (p2)	b_1	A_2	$\sigma_x k$, $\sigma_y k$
p1m	Γ', X' (p1m)	b_1	A^-	$\sigma_x k$, $\sigma_y x$
c1m	Γ', X' (c1m)	b_1	A^+	$\sigma_z k$
p2gm	X (p2gm)	a_1	B^+	$\sigma_y k$
	Γ' (p1gm)	a_1	A^+	$\sigma_y k$
	X' (p1gm)	b_1	A^+	$\sigma_x k$, $\sigma_y k$
p2mm	Γ', X' (p2mm)	a_1	B^-	$\sigma_y k$

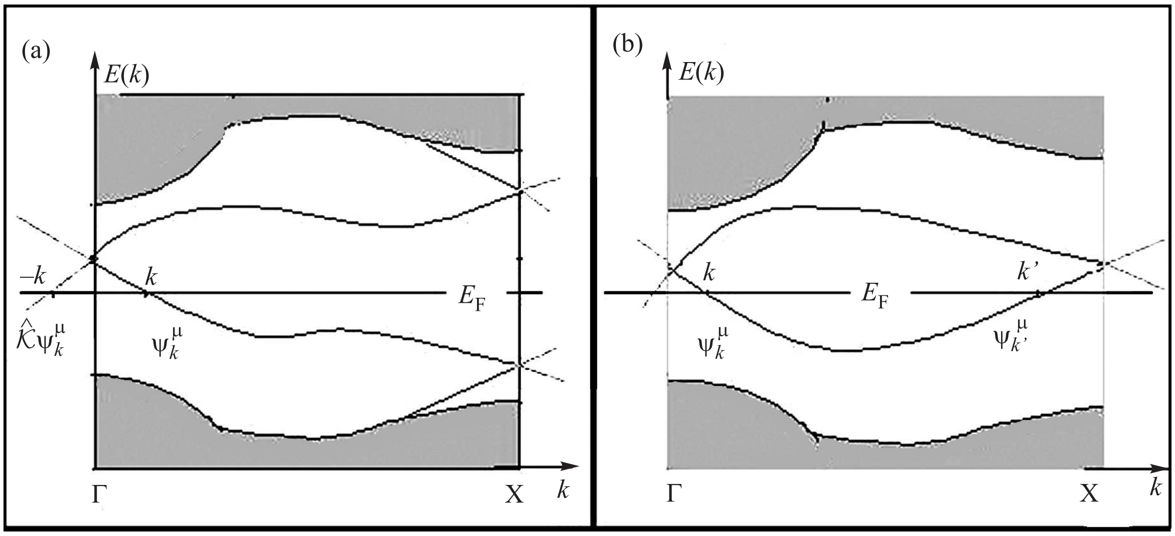

Рис. 2. Схематическое представление спектра краевых состояний. (a) – Состояния устойчивые к рассеянию. (b) – Состояния подверженные упругому рассеянию

ния, когда функции ψ_k и $\hat{\mathcal{K}}\psi_k$ линейно-независимы и принадлежат разным представлениям (случаи B и C). Для групп p2gm и p2mm реализуется случай A по Херрингу: функции ψ_k и $\hat{\mathcal{K}}\psi_k$ 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 ψ_k и $\hat{\mathcal{K}}\psi_k$ 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 ψ_k $(E_+(k))$ и $\hat{\mathcal{K}}\psi_k\,(E_-(k))$ с разными проекциям и момента движутся вдоль каждой границы в разные стороны, поскольку $v_+ = dE_+(k)/dk = -v_- = dE_-(k)/dk$ (рис. 1c). При приложении электрического поля функция распределения становится асимметричной по импульсу. Особенностью данных систем при $T \to 0$ является баллистический транспорт по поверхностным (краевым) состояниям. Каждая ветвь поверхностных состояний дает вклад, равный e^2/h.

Напомним, что $\hat{\mathcal{K}}\psi_k$ имеет квазиимпульс $-k$. Поэтому когда уровень Ферми находится в запрещенной зоне (вне проекций объемных зон; рис. 2a), единственный канал упругого рассеяния состоит в рассеянии с одной ветви конуса из состояния ψ_k на другую ветвь конуса в состояние $\hat{\mathcal{K}}\psi_k$ (рис. 2a) или наоборот в зависимости от приложенного электрического поля. Для баллистического транспорта при $T \to 0$ 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 ψ_k^μ 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 на 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 $(\hat{\mathcal{K}}V\hat{\mathcal{K}}^{-1})^+ = \hat{\mathcal{K}}V^+\hat{\mathcal{K}}^{-1}$,

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

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

где в бесспиновом случае

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

а в спинорном случае

$$\hat{\mathcal{K}}\psi = \sigma_y K_0\psi = \sigma_y\psi^*, \\ \hat{\mathcal{K}}^2\psi = \sigma_y K_0 \sigma_y K_0 \psi^* = \sigma_y\sigma_y^*\psi = -\psi. \qquad (6)$$

Пусть имеет место ситуация, изображенная на рис. 2а, когда поверхностные состояния пересекают уровень Ферми между точками Γ 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

$$\langle \psi_k^\nu|V\psi_k^\mu\rangle = \langle \hat{\mathcal{K}}\psi_k^\mu|\hat{\mathcal{K}}V^+\hat{\mathcal{K}}^{-1}\hat{\mathcal{K}}\psi_k^\nu\rangle = \\ = \langle \hat{\mathcal{K}}\psi_k^\mu|\hat{\mathcal{K}}V^+\hat{\mathcal{K}}^{-1}\hat{\mathcal{K}}^2\psi_k^\mu\rangle = \langle \psi_k^\nu|V\hat{\mathcal{K}}^2\psi_k^\mu\rangle = \\ = -\langle \psi_k^\nu|V\psi_k^\mu\rangle. \qquad (7)$$

Здесь было учтено, что для спинорных представлений $\hat{\mathcal{K}}\psi_k^\nu = \hat{\mathcal{K}}^2\psi_k^\mu = -\psi_k^\mu$. Отсюда следует, что матричный элемент для спинорных представлений тождественно равен нулю:

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

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

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

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 B и C по Херрингу. В этих случаях рассеяние происходит между состояниями ψ_k^μ и ψ_{-k}^μ, принадлежащими разным одномерным представлениям, объединяющимся в одно за счет инверсии времени. Поэтому устойчивость к рассеянию диктуется инверсией времени.

Однако в случае A по Херрингу инверсия времени не приводит к объединению представлений и рассеяние происходит между состояниями ψ_k^μ и ψ_{-k}^μ, 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 A по Херрингу (группы 6 и 7) волновые функции ψ_k^μ и ψ_{-k}^μ являются ортогональными базисными функциями одного двумерного спинорного 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 $|\uparrow\rangle$ и $|\downarrow\rangle$. Очевидно, что матричный элемент потенциала $\hat{V} = V\begin{pmatrix}1 & 0\\0 & 1\end{pmatrix}$ скалярной (немагнитной) примеси 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, $\sigma_y \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \to \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$, 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 Γ и X (рис. 2a) . 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. 2b), то открывается новый канал рассеяния между состояниями ψ_k^μ и $\psi_{k'}^\mu$. При этом аргументы, основанные на ограничениях, диктуемых инверсей 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. 2a или 2 b), 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]:

$$
\begin{array}{ll}
\text{– конический} & E^2(k_x,k_y)=k_x^2+k_y^2,\\
\text{– вырожденный конус} & \\
\text{(желоб)} & E^2(k_x,k_y)=k_y^2,\\
\text{– гиперболический} & E^2(k_x,k_y)=(k_x^2-k_y^2)^2,\\
\text{– кубический} & E^2(k_x,k_y)=(k_x^3-3k_xk_y^2)^2,\\
\text{– параболический} & E^2(k_x,k_y)=(k_x^2+k_y^2)^2.
\end{array}
\tag{10}
$$

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 проводимости (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_2^3. Материальная константа λ, 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* λ. Если наложить "руками" дополнительные симметрийные 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 симметрей 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 симметрией 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 Γ, M и Γ, K). В связи с этим заметим, что данный вид спектра уже был приведен ранее в работе [6] (см. также формулу (11) выше) при общем симметрийном анализе (группы 10 (p4) и группа 16 (p6); см. формулы (10), (23), (24) в [6]). Получены также и другие особенности спектра в бесспиновом и спинорном 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. T. T. 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. T. T. 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).