Письма в ЖЭТФ, том 98, вып. 5, с. 336 – 341

О новом типе безмассовых дираковских фермионов в кристаллических топологических изоляторах[1)]

С. Н. Молотков, Т. А. Потапова[+]

Институт физики твердого тела РАН, 142432 Черноголовка,Россия

Академия криптографии, 121552 Москва, Россия

Факультет вычислительной математики и кибернетики, МГУ им. Ломоносова, 119234 Москва, Россия

[+]*Факультет информационных технологий и вычислительной техники, Национальный исследовательский университет “Высшая школа экономики”, 101000 Москва, Россия*

Поступила в редакцию 14 мая 2013 г.

После переработки 24 июля 2013 г.

Предсказан новый тип безмассовых дираковских фермионов в *кристаллических* 3D топологических изоляторах (ситуация 3D→2D). Спектр имеет четырехкратное вырождение в вершине 2D-зоны Бриллюэна (точка M) и двукратное – в окрестности точки M. В 3D топологических изоляторах кристаллическая симметрия совместно с инвариантностью к инверсии времени допускает четырехкратно вырожденные дираковские конусы, которые отсутствуют в классификации топологических особенностей в работе (R.-J.Slager, A.Mesaros, V.Juriycic, J.Zaanen, Nature Phys. **9**, 98 (2013)). Гамильтониан последней не содержит в себе дираковских особенностей с более чем двукратным вырождением. Поэтому ее топологическая классификация является неполной. Продольное магнитное поле в безспиновом случае сохраняет безмассовый закон дисперсии фермионов и не снимает четырехкратного вырождения. В спинорном случае магнитное поле снимает четырехкратное вырождение, оставляя только двукратное, и приводит к появлению щели в спектре фермионов.

DOI: 10.7868/S0370274X13170116

Введение. Методы алгебраической топологии оказываются плодотворными во многих задачах, от квантовой теории поля до физики конденсированного состояния. Хотя в своей основе математические методы являются общими, в зависимости от постановки задачи они могут варьироваться. Кратко упомянем часто используемые подходы. Например, при классификации и выяснении устойчивости структурных дефектов задача сводится к исследованию классов эквивалентности гомотопических отображений некоторого стандартного многообразия, связанного с обходом дефекта, в пространство параметра порядка. Классификация сводится к перечислению гомотопических групп, связанных с такими отображениями [1].

В ряде работ используется топологическая классификация в импульсном пространстве [2], основанная на вычислении группы кручения (изоморфной группе целых чисел $\mathcal{Z}$) при обходе вокруг особой точки спектра.

[1)]См. дополнительные материалы к данной статье на сайте нашего журнала www.jetpletters.as.ru том 98, вып. 5.

В кристаллических изоляторах постановка задачи несколько отличается от упомянутых выше и сводится в основном к следующим вопросам.

1. Какие нетривиальные особенности электронного спектра, диктуемые пространственными симметриями и инвариантностью к инверсии времени, возможны на поверхности в этих системах в симметричных точках **k** зоны Бриллюэна (ЗБ)? При этом они не должны подпадать под систематику объемного спектра (должны лежат вне проекций объемных зон, см. ниже).

2. Являются ли эти особенности устойчивыми при непрерывных деформациях гамильтониана системы, при которых сохраняется инвариантность гамильтониана по отношению к пространственным элементам симметрии, инверсии времени и которые не захлопывают щель в проекциях объемных зон. Это приводит к так называемой $\mathcal{Z}_2$-классификации, отличной от упомянутой $\mathcal{Z}$-классификации кручений в импульсном пространстве.

До сих пор для *кристаллических* 3D→2D, 2D→1D *и чисто* 2D-*систем* обсуждались особенности спектра с двукратным вырождением в симметричных точках ЗБ (конические, $\varepsilon \sim \pm|\mathbf{k}|$, квадратичные, $\varepsilon \sim \pm|\mathbf{k}|^2$, кубические, $\varepsilon \sim \pm|\mathbf{k}|^3$). Конические особенности спектра обнаружены экспериментально в чисто 2D-системах (графен), а также в 3D→2D (двойные соединения BiSb и гетерограницы между полупроводниками A^4B^6 и A^2B^6 с инверсией зон) и 2D→1D кристаллических системах (см. ссылки в [3, 4]).

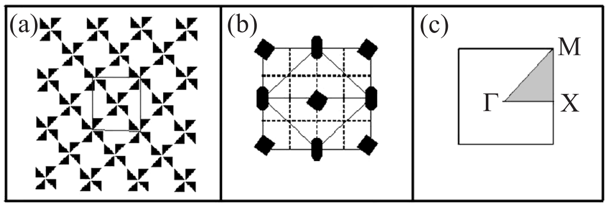
Возникает вопрос о существовании конических особенностей в кристаллических системах с большей степенью вырождения. Вопрос о возможности появления и экспериментальном обнаружении таких особенностей (если таковые возможны) в кристаллических 3D→2D- и чисто 2D-системах является интересной и актуальной задачей.

Поверхностные (краевые) состояния с коническим законом дисперсии и с более чем двукратным вырождением в 2D→1D-системах отсутствуют [5, 6], поскольку группы бордюров из-за "бедности" элементов симметрии не допускают более чем двукратное вырождение [6].

Идеальной была бы ситуация, при которой можно было бы указать конкретные вещества или соединения, где возможна бóльшая степень вырождения. Однако на сегодняшний день это невозможно. *Тем не менее можно предъявить кристаллическую структуру, которую должно иметь соединение, чтобы в нем возникал конический безмассовый спектр с четырехкратным вырождением.*

Именно эта задача решена в данной работе. Более того, оказывается, что в 3D→2D-системах четырехкратное вырождение конического спектра является максимально допустимым.

Четырехкратно вырожденные безмассовые дираковские фермионы. Ниже будет приведен пример кристаллической структуры, в которой в углах ЗБ (точка M, см. рисунок) возникают фермионы



(a) – Пример двумерной решетки с нетривиальными трансляциями [7]. (b) – Элементы симметрии решетки (штриховыми линиями обозначены плоскости скольжения). (c) – Неприводимая часть зоны Бриллюэна

с четырехкратно вырожденным спектром при $|\mathbf{k}| = 0$ (здесь квазиимпульс $\mathbf{k}$ отсчитывается от симметричной точки M) и с двукратно вырожденным спектром при $|\mathbf{k}| \neq 0$. Данный тип фермионов может возникать как в 3D→2D-, так и в 2D-случаях.

Элементы симметрии решетки. Пример кристаллической решетки приведен на рисунке. Данная решетка имеет несиморфную пространственную группу симметрии: она содержит нетривиальные трансляции на полпериода. Плоскости симметрии существуют только в комбинации с нетривиальными трансляциями на полпериода. Элементы симметрии следующие: $\{e|\mathbf{R}\}$, $\{C_4|\mathbf{R}\}$, $\{C_4^3|\mathbf{R}\}$, $\{C_2|\mathbf{R}\}$, $\{\sigma_x|\mathbf{R}+\alpha\}$, $\{\sigma_y|\mathbf{R}+\alpha\}$, $\{\sigma_{xy}|\mathbf{R}+\alpha\}$. Здесь $\{\mathbf{R}\} = (a, a)$ – трансляции на период, $\{\alpha\} = (a/2, a/2)$ – трансляции на полпериода.

Проективные неприводимые представления группы волнового вектора. Кратность вырождения энергетических зон в определенной точке зоны Бриллюэна определяется размерностью неприводимого представления группы волнового вектора G_k данной точки $\mathbf{k}$. Нас будет интересовать точка M (рисунок), в которой возникает нетривиальный четырехкратно вырожденный безмассовый дираковский спектр.

Группа волнового вектора имеет нормальный делитель – группу трансляций. Фактор-группа группы волнового вектора изоморфна точечной группе направлений F_k. Поскольку пространственная группа содержит нетривиальные трансляции, неизбежно возникают проективные представления. Пусть $\mathcal{D}(g)$ – матрица некоторого представления пространственной группы, а $\mathcal{D}^k(h)$ – матрица представления ее фактор-группы, причем для элемента симметрии $g = \{h|\mathbf{R}+\alpha\} = \{h|\tau\}$ ($\tau = \mathbf{R}+\alpha$) они связаны соотношением $\mathcal{D}(g) = e^{i\mathbf{k}\tau}\mathcal{D}^k(h)$. Умножение матриц представления для разных элементов группы подчиняется закону (см., например, [8])

$$\mathcal{D}(g_1)\mathcal{D}(g_2) = \omega(g_1, g_2)\mathcal{D}(g_1 \cdot g_2),$$
$$\omega(g_1, g_2) = e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{g}_1^{-1}\mathbf{k})\alpha_2} = e^{i\mathbf{b}\alpha_2}, \tag{1}$$

где $\mathbf{b} = \mathbf{k} - \mathbf{g}_1^{-1}\mathbf{k}$ – некоторый вектор обратной решетки. В нашем случае факторы $\omega(g_1 \cdot g_2)$ не равны все тождественно единице. Действительно, имеем

$$\omega(C_4, \sigma_x) = \exp[i(\mathbf{k} - \mathbf{C}_4^{-1}\mathbf{k})\alpha] = \exp(2ik_y\alpha_x) = -1,$$
$$\omega(\sigma_x, C_4) = \exp[i(\mathbf{k} - \sigma_x^{-1}\mathbf{k})0] = 1. \tag{2}$$

Представления группы, содержащей нетривиальные трансляции, являются, как видно из (1), (2), не обычными, а проективными представлениями. Система множителей – фактор-система $\omega(g_i \cdot g_j)$ – определяет с точностью до множителя $u(g)$ ($|u(g)| = 1$ – произвольная однозначная функция на элементах группы g) проективные представления группы. При этом любые два проективных представления с фактор-системой из одного класса связаны соотношением $\mathcal{D}'(g) = \mathcal{D}(g)/u(g)$.

Для одной и той же группы возможны различные классы фактор-систем. Все фактор- системы из одного класса связаны соотношением $\omega'(g_1, g_2) = \omega(g_1, g_2)u(g_1g_2)/u(g_1)u(g_2)$. Если все множители $\omega(g_1, g_2)$ могут быть сделаны равными единице соответствующим выбором $u(g)$, то такое представление эквивалентно обычному векторному представлению группы и относится к классу K_0. Принадлежность фактор-системы к тому или иному классу определяется вычислением множителей ω для образующих элементов точечной группы. В нашем случае точечной группы C_{4v} имеется два образующих элемента: C_4 и σ_x ($(C_4)^4 = e$ и $(\sigma_x)^2 = e$). Согласно (1), (2) фактор-система относится к классу K_1. Это означает, что представления группы волнового вектора не сводятся к векторным и являются проективными представлениями. Все проективные представления для точечных групп давно построены. Они приведены, например, в [8]. Для группы C_{4v} имеется два двумерных проективных представления, $P_1^{(1)}$ и $P_2^{(1)}$, фактор-система которых относится к классу K_1 (фактор-системы могут быть приведены к стандартному виду, но для дальнейшего это нам не потребуется).

В таблице приведены характеры двумерных проективных ($P_1^{(1)}$ и $P_2^{(1)}$), спинорных (E_1' и E_2') и векторных (E) представлений. В ней приведены также волновые функции и компоненты волновых векторов и магнитного поля, преобразующиеся, соответственно, по спинорным и векторным представлениям. Спинорные представления далее не используются. Они приведены для иллюстрации их генетической связи с проективными представлениями, в которые они переходят. Двумерность представлений означает, что без учета симметрии к обращению времени спектр в точке M был бы двукратно вырожденным, причем как в безспиновом, так и в спинорном случае.

Требования инвариантности по отношению к обращению времени. Кроме инвариантности к операциям кристаллической симметрии, рассматриваемый гамильтониан инвариантен относительно операции обращения времени. Данная симметрия может приводить к дополнительному вырождению спектра. Операция инверсии времени $\mathcal{K}$ в безспиновом случае сводится к комплексному сопряжению волновой функции $\mathcal{K}\psi = \psi^*$. При учете спин-орбитального взаимодействия операция инверсии времени есть $\mathcal{K}\psi = \sigma_y\psi^*$.

$$\mathcal{K}^2\psi = K^2\psi = \tag{3}$$

$$\begin{cases} \sigma_y(\sigma_y\psi^*)^* = -\psi, & K^2 = -1 \text{ (спинорный случай)}, \\ (\psi^*)^* = \psi, & K^2 = +1 \text{ (безспиновый случай)}. \end{cases}$$

(Оператор инверсии времени используется также в эквивалентном виде: $\mathcal{K}\psi = i\sigma_y\psi^*$. Это зависит от выбора спин-орбитального взаимодействия в гамильтониане с множителем с мнимой единицей или без нее.) Пусть набор волновых функций $\psi_{k,i}^{\mu}$ некоторого уровня энергии преобразуется по неприводимому представлению $\mathcal{D}_{\mu}^{k}(g)$ группы волнового вектора G_k. Тогда набор волновых функций, связанных с $\psi_{k,i}^{\mu}$ операцией обращения времени $\mathcal{K}\psi_{k,i}^{\mu}$, преобразуется по комплексно-сопряженному представлению $\mathcal{D}_{\mu}^{k*}(g)$. При этом возможны две ситуации. В первой наборы функций $\psi_{k,i}^{\mu}$ и $\mathcal{K}\psi_{k,i}^{\mu}$ линейно-зависимы (эти наборы совпадают с точностью до унитарного поворота), т.е. выражаются друг через друга:

$$\mathcal{K}\psi_{k,i}^{\mu} = \sum_j T_{ij}\psi_{k,j}^{\mu}, \tag{4}$$

где T_{ij} – матрица унитарного оператора. В этой ситуации симметрия гамильтониана к обращению времени *не приводит к дополнительному вырождению*. Во второй ситуации наборы функций $\psi_{k,i}^{\mu}$ и $\mathcal{K}\psi_{k,i}^{\mu}$ линейно-независимы, т.е. не совпадают. В этом случае инвариантность к обращению времени приводит к дополнительному вырождению уровней. Таким образом, возможны три случая: a) функции $\psi_{k,i}^{\mu}$ и $\mathcal{K}\psi_{k,i}^{\mu}$ линейно-зависимы; b) функции $\psi_{k,i}^{\mu}$ и $\mathcal{K}\psi_{k,i}^{\mu}$ линейно независимы, представления $\mathcal{D}_{\mu}^{k}(g)$ и $\mathcal{D}_{\mu}^{k*}(g)$ неэквивалентны и имеют комплексные характеры; c) функции $\psi_{k,i}^{\mu}$ и $\mathcal{K}\psi_{k,i}^{\mu}$ линейно-независимы, представления $\mathcal{D}_{\mu}^{k}(g)$ и $\mathcal{D}_{\mu}^{k*}(g)$ эквивалентны и имеют вещественные характеры.

Рассматриваемый ниже случай четырехкратного вырождения относится к варианту b_1 [8]. Индекс "1" означает, что все точки M эквивалентны и входят в одну звезду волнового вектора, а представления $P_{1,2}^{(1,2)}$ неэквивалентны и имеют комплексные характеры. Критерий Херринга позволяет различать три случая [9]:

$$\Sigma = \frac{1}{h}\sum_{g\in G_k'}\chi_k(g^2)\delta_{k,-gk} = \begin{cases} K^2 & \text{(случай } a), \\ 0 & \text{(случай } b), \\ -K^2 & \text{(случай } c). \end{cases} \tag{5}$$

где суммирование ведется по элементам группы волнового вектора, для которых $g\mathbf{k} = -\mathbf{k}$. Вычислим

C_{4v}	e	a, a^3	a^2	b, a^2b	ab, a^3b	
	e	C_4, C_4^3	C_2	σ_x, σ_y	σ_{xy}, σ_{yx}	Функции, компоненты тензоров
$P_1^{(1)}$	2	$i\sqrt{2}$	0	0	0	
$P_2^{(1)}$	2	$-i\sqrt{2}$	0	0	0	
E_1'	2	$\sqrt{2}, -\sqrt{2}$	0	0	0	$(\lvert\alpha\rangle, \lvert\beta\rangle)$
E_2'	2	$-\sqrt{2}$, $\sqrt{2}$	0	0	0	$(\lvert(x+iy)\alpha\rangle, \lvert(x-iy)\beta\rangle)$
E	2	0	-2	0	0	(x,y), (k_x,k_y), $(H_y,-H_x)$

эту сумму. Пусть матрицы представлений для проективных представлений для образующих элементов симметрии $a \equiv C_4 - \mathbf{A}$ и $b \equiv \sigma_x - \mathbf{B}$ и удовлетворяют соотношениям $\mathbf{A}^4 = -\mathbf{I}$, $\mathbf{B}^2 = \mathbf{I}$, $\mathbf{BA} = \mathbf{A}^3\mathbf{B}$, где $\mathbf{I}$ – единичная матрица 2×2, и $(ab)^2 = abab = a(a^3b)b = a^4b^2$. Используя характеры для представления $P_{1,2}^{(1,2)}$,

$$\Sigma = \chi(e^2) + 2\chi[(C_4)^2] + \chi[(C_2)^2] + 2\chi[(\sigma_x)^2] + \tag{6}$$

$$+ 2\chi[(\sigma_{xy})^2] = \chi(e^2) + 2\chi(a^2) + \chi(a^4) + 2\chi(b^2) +$$

$$+ 2\chi(abab) = \mathrm{Tr}[\mathbf{I} + 2\mathbf{A}^2 + \mathbf{A}^4 + 2\mathbf{B}^2 + 2\mathbf{A}^4\mathbf{B}^2] =$$

$$= 2 + 2\cdot 0 - 2 + 2\cdot 2 - 2\cdot 2 = 0,$$

находим, что удвоение размерности представлений и дополнительное вырождение из-за инверсии времени возникают как без учета спина, так и при учете спин-орбитального взаимодействия.

Гамильтониан системы. Для построения гамильтониана вблизи точки M удобно воспользоваться методом инвариантов [8]. Пусть $\mathcal{D}(g)$ – некоторое представление группы пространственной симметрии кристалла в точке $\mathbf{k}$, а $\hat{\mathbf{H}}(k)$ – гамильтониан. Инвариантность гамильтониана по отношению к элементу симметрии g означает, что

$$\hat{\mathbf{H}}'(k') = \mathcal{D}(g)\hat{\mathbf{H}}(g^{-1}k)\mathcal{D}^{-1}(g) = \hat{\mathbf{H}}(k). \tag{7}$$

Матрицу гамильтониана $\hat{\mathbf{H}}(k)$ можно представить в виде произведения тензоров (степеней компонент волнового вектора, компонент продольного магнитного поля и других физических величин) k_i^κ и некоторых базисных матриц $\hat{\mathbf{X}}_i$, которые с учетом (7) преобразуются как

$$g^{-1}\hat{\mathbf{X}}_i = \hat{\mathbf{X}}_i' = \mathcal{D}(g)\hat{\mathbf{X}}_i\mathcal{D}^{-1}(g), \quad \hat{\mathbf{X}}_i' = \sum_j \mathcal{D}_{ij}^X(g)\hat{\mathbf{X}}_j. \tag{8}$$

Отсюда следует, что всегда можно выбрать набор базисных матриц так (детали см. в [8]), чтобы представление $\mathcal{D}^X(g)$, по которому преобразуются матрицы в (7), (8), являлось прямым произведением $\mathcal{D}(g)\mathcal{D}^*(g)$ матриц в (8).

Компоненты тензоров k_i^κ преобразуются по обычным неприводимым векторным представлениям $\mathcal{D}_\kappa(g)$ группы направлений F_k точки $\mathbf{k}$. Представление $\mathcal{D}^X(g)$ имеет характеры $\chi^X(g) = |\chi(g)|^2$ и является, вообще говоря, приводимым по группе F_k (представление $\mathcal{D}(g)$ есть некоторое неприводимое представление $\mathcal{D}_\mu^k(g)$ группы волнового вектора G^k в точке $\mathbf{k}$, см. ниже). Оно может быть разложено на неприводимые представления. Пусть $\hat{\mathbf{X}}_i^\kappa$ – набор матриц, преобразующийся по κ-му неприводимому представлению F_k (индекс "i" означает, что может существовать несколько разных наборов матриц). Далее, пусть $k_i^{\kappa *}$ – компоненты тензоров, преобразующиеся по сопряженному $\mathcal{D}_\kappa^*(g)$ неприводимому представлению F_k. Тогда в гамильтониан могут входить инвариантные слагаемые, преобразующиеся по единичному представлению:

$$\hat{\mathbf{H}}(k) = \sum_i d_i \hat{\mathbf{X}}_i^\kappa k_i^{\kappa *}, \tag{9}$$

где d_i – материальные константы, которые можно выбрать вещественными при условии выбора матриц $\hat{\mathbf{X}}_i^\kappa$ эрмитовыми [8]. Число независимых слагаемых с данным индексом "κ" в (9) определяется числом вхождения представления $\mathcal{D}_\kappa(g)$ в представление $\mathcal{D}^X(g)$ (см. формулы (13), (14)).

Объединение представлений при инверсии времени. Поскольку инверсия времени требует объединения двух проективных представлений, для построения соответствующего гамильтониана должен быть использован базис $\psi_{\mathrm{I}}, \psi_{\mathrm{II}} = \mathcal{K}\psi_{\mathrm{I}}$. Функции преобразуются, соответственно, по представлениям D_μ^k и D_μ^{k*}. Функции преобразуются сами в себя при помощи оператора

$$\hat{\mathbf{T}} = \begin{pmatrix} 0 & \mathcal{K}^2\mathbf{I} \\ \mathbf{I} & 0 \end{pmatrix}. \tag{10}$$

Инвариантность гамильтониана в базисе ψ_{I}, ψ_{II} относительно инверсии времени означает, что

$$\hat{\mathbf{T}}^{-1}\hat{\mathbf{H}}(fk)\hat{\mathbf{T}} = \hat{\mathbf{H}}(k)^*,$$
$$\hat{\mathbf{H}}(k) = \begin{pmatrix} \mathbf{H}_{\mathrm{II}}(k) & \mathbf{H}_{\mathrm{I\ II}}(k) \\ \mathbf{H}_{\mathrm{II\ I}}(k) & \mathbf{H}_{\mathrm{II\ II}}(k) \end{pmatrix}. \quad (11)$$

Условия (11) накладывают ограничения на диагональные и недиагональные элементы матрицы гамильтониана. Имеем

$$\mathbf{H}_{\mathrm{II\ II}}(k) = \mathbf{H}^*_{\mathrm{II}}(fk), \quad \mathbf{H}_{\mathrm{II\ I}}(k) = K^2\mathbf{H}^*_{\mathrm{I\ II}}(fk), \quad (12)$$

где фактор $f = \pm$ для четных $(+)$ и нечетных $(-)$ относительно обращения времени компонент тензоров k_i^κ. Остается рассчитать число независимых наборов базисных матриц. Число независимых наборов с индексом "κ" для диагональных матричных элементов определяется числом вхождения произведения представлений $\mathcal{D}_\mu(g)^k\mathcal{D}_\mu(g)^{k*}$ в представление $\mathcal{D}_\kappa(g)$. Имеем

$$N_{\mathrm{diag}} = \frac{1}{h}\sum_{g\in G'_k} |\chi^k_\mu(g)|^2\chi_\kappa(g). \quad (13)$$

Аналогично число независимых недиагональных наборов матриц определяется из условия [8]

$$N_{\text{off-diag}} = \frac{1}{2h}\sum_{g\in G'_k} \chi_\kappa(g)\{[\chi^k_\mu(g)]^2 + K^2 f\chi^k_\mu(g^2)\}, \quad (14)$$

где $\chi^k_\mu(g)$ – характер представления группы волнового вектора G_k ($P^{(1,2)}_{1,2}$) точки k, $\chi^\kappa(g)$ – характер представления точечной группы направлений F_k. Число независимых диагональных матриц

$$N_{\mathrm{diag}} = \frac{1}{8}[\chi_\kappa(e)|\chi^k_\mu(e)|^2 + 2\chi_\kappa(C_4)|\chi^k_\mu(C_4)|^2 + $$
$$+ \chi_\kappa(C_2)|\chi^k_\mu(C_2)|^2 + 2\chi_\kappa(\sigma_x)|\chi^k_\mu(\sigma_x)|^2 +$$
$$+ 2\chi_\kappa(\sigma_{xy})|\chi^k_\mu(\sigma_{xy})|^2] =$$
$$= \frac{1}{8}[2\cdot 2^2 + 2\cdot 0\cdot 2 - 2\cdot 0 + 2\cdot 0\cdot 0 + 2\cdot 0\cdot 0] = 1, \quad (15)$$

причем для обоих проективных представлений группы волнового вектора G_k: $\mathcal{D}^k_\mu \to P^{(1)}_1$ и $\mathcal{D}^{k*}_\mu \to P^{(2)}_2$.

В качестве одного из наборов матриц, преобразующихся аналогично (k_x, k_y), можно выбрать

$$(\mathbf{X}_x, \mathbf{X}_y) = \left(\begin{pmatrix} \sigma_y & 0 \\ 0 & \sigma_y \end{pmatrix}_x, \begin{pmatrix} -\sigma_x & 0 \\ 0 & \sigma_x \end{pmatrix}_y\right). \quad (16)$$

Последние удовлетворяют соотношениям для диагональных компонент гамильтониана (12) и являются нечетными по времени. В гамильтониане *как в безспиновом, так и в спинорном случаях* возникает слагаемое $\mathcal{H}(\mathbf{k}) \sim d\,(\mathbf{X}_x k_x + \mathbf{X}_y k_y)$ (где d – *одна общая материальная константа*).

Аналогично (13), (15) может быть рассчитано число (14) независимых недиагональных наборов базисных матриц гамильтониана. Число недиагональных наборов в безспиновом и спинорном случаях оказывается разным. Это связано с наличием в (14) множителя K^2 ($K^2 = 1$ в безспиновом и $K^2 = -1$ в спинорном случае). Для безспинового случая число недиагональных наборов $N_{\text{off-diag}} = 0$, а для спинорного $N_{\text{off-diag}} = 2$. Удобно выбрать следующие два набора, которые, естественно, удовлетворяют соотношениям (12), диктуемым инвариантностью по отношению к инверсии времени:

$$\left(\mathbf{X}^{(1)}_x, \mathbf{X}^{(1)}_y\right) = \left(\begin{pmatrix} 0 & -i\sigma_x \\ i\sigma_x & 0 \end{pmatrix}_x, \begin{pmatrix} 0 & -\sigma_x \\ -\sigma_x & 0 \end{pmatrix}_y\right)$$
$$\left(\mathbf{X}^{(2)}_x, \mathbf{X}^{(2)}_y\right) = \left(\begin{pmatrix} 0 & -i\sigma_z \\ i\sigma_z & 0 \end{pmatrix}_x, \begin{pmatrix} 0 & -\sigma_z \\ -\sigma_z & 0 \end{pmatrix}_y\right). \quad (17)$$

Спектр фермионов. Окончательно гамильтониан и спектр имеют следующий вид.

В безспином случае

$$\mathcal{H}(\mathbf{k}) = d\,(\mathbf{X}_x k_x + \mathbf{X}_y k_y),$$
$$\varepsilon^\pm_1(\mathbf{k}) = \pm v|\mathbf{k}|, \quad (18)$$
$$\varepsilon^\pm_2(\mathbf{k}) = \pm v|\mathbf{k}|, \quad v = |d|.$$

Спектр квазичастиц имеет безмассовый закон дисперсии. При этом спектр четырехкратно вырожден при $\mathbf{k} = 0$ и двукратно вырожден при $\mathbf{k} \neq 0$ ($\mathbf{k} = (k_x, k_y)$).

В спинорном случае

$$\mathcal{H}(\mathbf{k}) = d\,(\mathbf{X}_x k_x + \mathbf{X}_y k_y) +$$
$$+ d_1\left(\mathbf{X}^{(1)}_x k_x + \mathbf{X}^{(1)}_y k_y\right) + d_2\left(\mathbf{X}^{(2)}_x k_x + \mathbf{X}^{(2)}_y k_y\right). \quad (19)$$

Диагонализуя (19), находим спектр фермионов:

$$\varepsilon^\pm_1(\mathbf{k}) = \pm v_s|\mathbf{k}|,\ \varepsilon^\pm_2(\mathbf{k}) = \pm v_s|\mathbf{k}|,\ v_s = \sqrt{d^2 + d_1^2 + d_2^2}. \quad (20)$$

Спектр в продольном магнитном поле. Продольное магнитное поле в 2D-структуре не приводит к квантованию. Компоненты магнитного поля входят в гамильтониан со своими материальными константами. Число независимых наборов диагональных и недиагональных наборов матриц определяется аналогично предыдущему случаю с компонентами волнового вектора. С учетом таблицы находим следующее.

В безспиновом случае гамильтониан и спектр в продольном поле $\mathbf{H} = (H_y, -H_x)$ имеют вид (где Q – *одна общая материальная константа*)

$$\mathcal{H}(\mathbf{H}) = Q\left(\mathbf{X}_x H_y - \mathbf{X}_y H_x\right),$$

$$\varepsilon_1^{\pm}(\mathbf{k}, \mathbf{H}) = \pm v|\mathbf{k} + q\mathbf{H}|, \tag{21}$$

$$\varepsilon_2^{\pm}(\mathbf{k}) = \pm v|\mathbf{k} + q\mathbf{H}|, \quad q = Q/d.$$

Спектр квазичастиц имеет безмассовый закон дисперсии. При этом спектр четырехкратно вырожден при $\mathbf{k} = -q\mathbf{H}$ и двукратно вырожден при $\mathbf{k} \neq -q\mathbf{H}$. Магнитное поле приводит к сдвигу начала отсчета по $\mathbf{k}$. Фактически продольное магнитное поле приводит к замене

$$k_x \to k_x + qH_y, \quad k_y \to k_y - qH_x. \tag{22}$$

В спинорном случае гамильтониан и спектр имеют вид (где Q, Q_1 и Q_2 – материальные константы)

$$\begin{gathered}\mathcal{H}(\mathbf{H}) = Q\left(\mathbf{X}_x H_y - \mathbf{X}_y H_x\right) + \\ + Q_1\left(\mathbf{X}_x^{(1)} H_y - \mathbf{X}_y^{(1)} H_x\right) + \\ + Q_2\left(\mathbf{X}_x^{(2)} H_y - \mathbf{X}_y^{(2)} H_x\right).\end{gathered} \tag{23}$$

$$\varepsilon_1^{\pm}(\mathbf{k}, \mathbf{H}) =$$
$$= \pm\sqrt{d^2(\mathbf{k} + q\mathbf{H})^2 + d_1^2(\mathbf{k} + q_1\mathbf{H})^2 + d_2^2(\mathbf{k} + q_2\mathbf{H})^2},$$
$$\varepsilon_2^{\pm}(\mathbf{k}, \mathbf{H}) =$$
$$= \pm\sqrt{d^2(\mathbf{k} + q\mathbf{H})^2 + d_1^2(\mathbf{k} + q_1\mathbf{H})^2 + d_2^2(\mathbf{k} + q_2\mathbf{H})^2},$$
$$q = Q/d, \quad q_{1,2} = Q_{1,2}/d_{1,2}.$$

Магнитное поле в спинорном случае приводит к замене компонент волнового вектора аналогичной (22), но с иными материальными константами. В результате между положительными и отрицательными ветвями спектра открывается щель. При этом остается только двукратное вырождение. При больших $|\mathbf{k}| \gg \gg \{q, q_{1,2}|\mathbf{H}|\}$ спектр выходит на двукратно вырожденный конус (20).

Интерпретация результатов. Инверсия времени без учета спин-орбитального взаимодействия приводит к объединению двумерных представлений с одной и той же константой d для обоих. В первом представлении (см. таблицу) базисной является пара функций, генетически происходящих из состояний $|\alpha\rangle = |1/2\rangle$, $|\beta\rangle = |-1/2\rangle$, во втором – из $|(x+iy)\alpha\rangle = |3/2\rangle$, $|(x-iy)\beta\rangle = |-3/2\rangle$. Здесь $|\pm 1/2, \pm 3/2\rangle$ – функции с определенными проекциями псевдомомента. Вырожденным ветвям спектра отвечают волновые функции $|\Psi_1^{\pm}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(e^{i\varphi(\mathbf{k})/2}|\frac{1}{2}\rangle \pm \pm e^{-i\varphi(\mathbf{k})/2}|-\frac{1}{2}\rangle)$ и $|\Psi_2^{\pm}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(e^{i\varphi(\mathbf{k})/2}|\frac{3}{2}\rangle \pm e^{-i\varphi(\mathbf{k})/2}|- -\frac{3}{2}\rangle)$, где $\varphi(\mathbf{k}) = \arg\frac{ik_x + k_y}{\sqrt{k_x^2 + k_y^2}}$. В продольном магнитном поле в безспиновом случае четырехкратное вырождение не снимается. Поле приводит только к сдвигу вершины конуса из точки $\mathbf{k} = 0$ в точку $\mathbf{k} = -q\mathbf{H}$ (21).

При учете спин-орбитального взаимодействия имеются три независимые константы: $q, q_{1,2}$. При этом каждой ветви спектра отвечает волновая функция, являющаяся суперпозицией всех четырех функций с разными проекциями псевдомомента: $|\Psi_i^{\pm}\rangle = c_{i,1/2}^{\pm}|\frac{1}{2}\rangle + c_{i,1/2}^{\pm}|-\frac{1}{2}\rangle + c_{i,3/2}^{\pm}|\frac{3}{2}\rangle + c_{i,-\frac{3}{2}}^{\pm}|-\frac{3}{2}\rangle$, где $i = 1, 2$. В продольном магнитном поле в спинорном случае четырехкратное вырождение заменяется на двукратное. Магнитное поле открывает щель в спектре. Физически это связано с тем, что магнитное поле нарушает инвариантность к обращению времени и разрушает "слипание" комплексно-сопряженных представлений в спинорном случае. Без учета спина объединение комплексно-сопряженных представлений в определенном смысле тривиально, т.к. матрица гамильтониана имеет блочно-диагональный вид (18). Магнитное поле действует одинаково на каждый блок, что сохраняет вырождение.

Авторы признательны неизвестному рецензенту, который обратил их внимание на вычислительную ошибку в формуле (20) в первоначальном варианте работы.

1. N. D. Mermin, Rev. Mod. Phys. **51**, 591 (1979).
2. G. E. Volovik, arXiv/cond-mat/0601372.
3. M. Z. Hasan and C. L. Kane, Rev. Mod. Phys. **82**, 3045 (2010).
4. X.-L. Qi and Sh.-Ch. Zhang, Rev. Mod. Phys. **83**, 1057 (2011).
5. S. V. Meshkov and S. N. Molotkov, Surface Science **240**, 263 (1990).
6. С. Н. Молотков, Письма в ЖЭТФ **94**, 306 (2011).
7. Б. К. Вайнштейн (гл. ред), *Кристаллография*, т. 1, М.: Наука, 1979.
8. Г. Л. Бир, Г. Е. Пикус, *Симметрия и деформационные эффекты в полупроводниках*, М.: Наука, 1972.
9. C. Herring, Phys. Rev. **52**, 361 (1937).