Письма в ЖЭТФ, том 98, вып. 7, с. 466 – 471

О симметрийно-топологической классификации краевых состояний в кристаллических спин-холловских изоляторах с инверсией времени[1)]

С. Н. Молотков

Институт физики твердого тела РАН, 142432 Черноголовка, Россия

Академия криптографии РФ

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

Поступила в редакцию 18 июля 2013 г.
После переработки 28 августа 2013 г.

Симметрийный анализ дает все типы особенностей краевых состояний в 2D кристаллических системах с границей (2D→1D-системы), которые инвариантны относительно инверсии времени. Симметрия также дает условие сшивки материальных функций, параметризующих гамильтониан, в разных точках зоны Бриллюэна (ЗБ). Единая параметризация гамильтониана позволяет построить отображение замкнутых по квазиимпульсу k траекторий в ЗБ в топологическую группу $SU(2)$. Имеется только два класса эквивалентности гамильтонианов, которые даются элементами первой фундаментальной группы $\pi_1(SO(3)) = \pi_1(SU(2)/\mathcal{Z}_2) = \mathcal{Z}_2$. Первый тип поверхностных состояний отвечает обычному изолятору, второй – топологическому спин-холловскому изолятору. Проводится сравнение с $\mathcal{Z}_2$-классификацией, основанной на методе пфаффиана (Supplemental material).

DOI: 10.7868/S0370274X13190119

Введение. Известно, что в перпендикулярном магнитном поле в 2D-системах возможен целочисленный эффект Холла: холловская проводимость принимает квантованные значения. После работы [1] было осознано, что квантование холловской проводимости имеет, по-существу, топологическую природу. Позднее в работе [2] было показано, что квантование холловской проводимости возможно в системах без однородного магнитного поля: эффективно магнитное поле меняет знак от одной кристаллической ячейки к соседней ячейке. Инвариантность системы относительно инверсии времени потеряна. Поэтому нарушается и условие симметричности для спектра при $\mathbf{k}$ и $-\mathbf{k}$: $\varepsilon_\uparrow(\mathbf{k}) \neq \varepsilon_\downarrow(-\mathbf{k})$. В этом случае возникает одна ветвь безмассового фермионного спектра. Аналогичная аномалия (*parity anomaly*) возникает в полевых моделях (2+1). Из-за специфической структуры параметра порядка в тонких пленках ^{3}He-A также может возникать явление, аналогичное квантовому эффекту Холла [3]. Справедливости ради нужно отметить, что в работе [3] была использована классификация состояний системы, основанная на гомотопической группе π_2 (об использовании топологической классификации в $(2+1)$ полевых моделях см., например, в [4, 5]). Отметим, что в системах без центра инверсии с потерей инвариантности относительно инверсии времени возможны и другие экзотические типы упорядочения, например тороидный (см. обзор [6] и ссылки в нем). В таких системах из-за электрон-электронного взаимодействия может спонтанно нарушаться условие симметричности спектра: $\varepsilon_\uparrow(\mathbf{k}) \neq \varepsilon_\downarrow(-\mathbf{k})$.

В последнее десятилетие были открыты системы (см. обзоры [7, 8] и ссылки в них), которые *обладают инвариантностью относительно инверсии времени* (условие симметричности спектра сохраняется: $\varepsilon_\uparrow(\mathbf{k}) = \varepsilon_\downarrow(-\mathbf{k})$, но обнаруживают явление, аналогичное квантовому эффекту Холла. Данные системы были названы спин-холловскими изоляторами. Такие системы имеют устойчивые к рассеянию на немагнитных примесях краевые состояния, по которым при низких температурах возможен квантованный баллистический транспорт. При этом спектр краевых состояний имеет безмассовый дираковский вид и вырождение по проекциям момента отсутствует. Ниже речь пойдет о симметрийно-топологической классификации краевых состояний в таких системах.

2D→1D-системы – 2D-системы с границей и инверсией времени. На поверхности (границе) 2D-систем возможно возникновение поверхностных (краевых) состояний, локализованных вблизи границы и распространяющихся вдоль нее. Как известно

[1)] См. дополнительные материалы к данной статье на сайте нашего журнала www.jetpletters.as.ru том 98, вып. 7.

еще с работы Тамма [9], причиной появления поверхностных состояний является нарушение периодичности. В бесконечной периодической 2D-системе "объемный" спектр одночастичных возбуждений представляет собой набор зон $\varepsilon_m(\mathbf{k})$ (где m – зонный индекс, $\mathbf{k} = (k_z, k_y)$ – двумерный вектор квазиимпульса в плоскости). Значения энергии $\varepsilon_m(\mathbf{k})$ – набор двумерных зон являются собственными значениями гамильтониана $\widehat{\mathcal{H}}_{2\mathrm{D}}(\mathbf{k})$, который инвариантен относительно элементов симметрии одной из 17 допустимых в природе пространственных 2D кристаллических групп и операции инверсии времени:

$$\widehat{\mathcal{H}}_{2\mathrm{D}}(\mathbf{k})|u_m(\mathbf{k})\rangle = \varepsilon_m(\mathbf{k})|u_m(\mathbf{k})\rangle. \tag{1}$$

Здесь $|u_m(\mathbf{k})\rangle$ – блоховская функция, отвечающая собственным значениям энергии $\varepsilon_m(\mathbf{k})$.

Если 2D бесконечный кристалл разрезать на две половины вдоль произвольного направления, например вдоль направления x, то возникнет полубесконечный кристалл с границей вдоль оси x. Из бесконечного кристалла можно также вырезать ленту с границами вдоль оси x. Если лента достаточно широкая и волновые функции состояний, локализованных на границах, не перекрываются, то состояния на границах ленты будут эквивалентны состояниям на границе полубесконечного 2D-кристалла. Принципиально важно, что *физически разрезание бесконечного кристалла означает введение потенциала, который разрывает кристалл на две половины.* Разрыв кристалла на две половины приводит к понижению симметрии бесконечного 2D-кристалла. Симметрия допускает только 7 пространственных кристаллических групп полубесконечного кристалла. Электронные состояния 2D-кристалла с границей должны классифицироваться по неприводимым представлениям семи групп бордюров с учетом инвариантности относительно инверсии времени. Пусть спектр исходного бесконечного 2D-кристалла отвечает изолятору, т.е. имеются два множества зон. Первое из них – множество валентных зон $\{\varepsilon^v_m(\mathbf{k})\}$, второе – множество зон проводимости $\{\varepsilon^c_m(\mathbf{k})\}$. При этом два набора зон отделены энергетической щелью, т.е. при любых значениях двумерных квазиимпульсов $\mathbf{k}$ и $\mathbf{k}'$ и зонных индексов m и m' валентные зоны и зоны проводимости не перекрываются по энергии:

$$\varepsilon_G = \min_{\mathbf{k},\mathbf{k}',m,m'} \left[\varepsilon^c_m(\mathbf{k}) - \varepsilon^v_{m'}(\mathbf{k}')\right] > 0. \tag{2}$$

Если все валентные зоны заполнены, то 2D-система является изолятором. Спроектируем объемные зоны бесконечного 2D-кристалла $\varepsilon_m(\mathbf{k})$ на воображаемую поверхность (границу). В этом случае возникнут проекции объемных зон $\varepsilon_{m,\mathrm{bulk}}(k_x) = \Pi_{k_y}\varepsilon^c_m(\mathbf{k})$. Если в объеме 2D-система была изолятором, то энергетическая щель ε_G останется и между проекциями зон:

$$\begin{aligned}\varepsilon_G &= \min_{\mathbf{k},\mathbf{k}',m,m'} \Pi_{k_y,k'_y}\left[\varepsilon^c_m(\mathbf{k}) - \varepsilon^v_{m'}(\mathbf{k}')\right] = \\ &= \min_{k_x,k'_x,m,m'}\left[\varepsilon^c_{m,\mathrm{bulk}}(k_x) - \varepsilon^v_{m',\mathrm{bulk}}(k'_x)\right] > 0.\end{aligned} \tag{3}$$

Для дальнейшего принципиально важно, что *проекции объемных зон в* (3) *не содержат никакой информации о реальной поверхности, поскольку в* (3) *используется только спектр 2D бесконечного кристалла, который описывается невозмущенным образованием поверхности, гамильтонианом* $\widehat{\mathcal{H}}_{2\mathrm{D}}(\mathbf{k})$. *При таком проектировании никакие поверхностные состояния в щели объемного спектра не возникают.* (Естественно, поверхностные состояния "набираются" из объемных, поскольку полное число состояний в полубесконечном кристалле не может измениться. Однако появление поверхностных состояний обязано исключительно реальному нарушению периодичности кристалла потенциалом, а не мысленному проектированию зон.)

Поверхностные (краевые) состояния в 2D→1D-системах. Гамильтониан, описывающий полубесконечный кристалл, может быть представлен в виде $\widehat{\mathcal{H}}_{1\mathrm{D}}(k_x, y) = \widehat{\mathcal{H}}_{2\mathrm{D}}(k_x, y) + V(k_x, y)$ (далее $k = k_x$). Спектр полубесконечного кристалла дается собственными числами:

$$\widehat{\mathcal{H}}_{1\mathrm{D}}(k, y)|u_n(k, y)\rangle = \varepsilon_n(k)|u_n(k, y)\rangle, \tag{4}$$

где $V(k_x, y)$ – потенциал, разрывающий бесконечный 2D-кристалл, $\widehat{\mathcal{H}}_{2\mathrm{D}}(k_x, y) = \int dk_y e^{ik_y y}\widehat{\mathcal{H}}_{2D}(k_x, k_y)$. На границе в зависимости от потенциала на поверхности могут возникать или не возникать поверхностные состояния, которые не принадлежат систематике объемного спектра.

Спектр $\varepsilon_n(k)$ представляет собой набор зон в одномерной зоне Бриллюэна (ЗБ). Среди решений (4) могут оказаться состояния, которые при некоторых значениях k_x находятся в запрещенной зоне, т.е. вне проекций объемных зон (3), $\varepsilon_{n,y}(k_x) \in \varepsilon_G$. Переменная y описывает поведение состояний $|u_n(k, y)\rangle$ в направлении, нормальном к границе. Если энергия $\varepsilon_n(k)$ попадает в проекции объемных зон, то состояния $|u_n(k, y)\rangle$ не локализованы вблизи поверхности, а размазаны на весь кристалл. Если уровень Ферми лежит в запрещенной зоне (3) и пересекает поверхностные зоны, то система, являясь *в объеме изолятором, оказывается проводящей по поверхностным состояниям.*

Поскольку поверхностные состояния описываются гамильтонианом полубесконечного 2D-кристалла или ленты, с точки зрения симметрии данные состояния должны классифицироваться по неприводимым представлениям семи пространственных кристаллических групп бордюров с учетом инвариантности к инверсии времени.

Строго говоря, даже объемный спектр полубесконечного 2D-*кристалла должен классифицироваться по представлениям семи групп бордюров и также представляет собой набор одномерных зон* $\varepsilon_n(k)$. В реальной ситуации из-за локализованности потенциала, разрывающего бесконечный кристалл на две половины, основная масса исходных объемных состояний не возмущается. Поверхностные состояния формируются из небольшой группы объемных состояний вблизи краев валентной зоны и зоны проводимости. Масштаб возмущения объемных зон при образовании поверхностных состояний, находящихся в щели объемного спектра, имеет порядок $\varepsilon_G/\Delta\varepsilon^{c,v}_{\mathrm{bulk}}$, где $\Delta\varepsilon^{c,v}_{\mathrm{bulk}}$ – ширина зоны проводимости и валентной зоны в щели ε_G, между которыми возникают поверхностные состояния.

Отношение числа состояний полубесконечного кристалла, участвующих в формировании поверхностных состояний, к полному числу состояний в полубесконечном кристалле есть отношение длины границы к "объему" полуплоскости. Следовательно, оно стремится к нулю. Это означает, что основная масса объемных состояний не возмущается поверхностью. Поэтому принято изображать проекции объемных зон на поверхность, используя объемный спектр $\varepsilon_{m,\mathrm{bulk}}(k_x) = \Pi_{k_y}\varepsilon^c_m(\mathbf{k})$.

Еще раз подчеркнем, что *проекции объемных зон, полученные из спектра бесконечного* 2D-*кристалла, никаких поверхностных состояний не содержат.*

Типы гамильтонианов и особенностей спектра краевых состояний в 2D→1-системах в симметричных точках 1D ЗБ. Существуют два взаимосвязанных вопроса [7, 8].

1. Какие типы гамильтонианов и особенностей электронного спектра поверхностных состояний полубесконечного кристалла допускаются кристаллической симметрией и операцией инверсии времени?

2. Какие классы эквивалентности гамильтонианов (поверхностных состояний) возможны и сколько их?

Гамильтонианы (поверхностные состояния) из одного класса можно перевести непрерывной деформацией один в другой, а из разных классов – нет. (Подразумевается, что при такой деформации щель в проекциях объемных зон сохраняется.) При этом непрерывная деформация может быть двух типов. В первом случае при деформации разрешается изменение кристаллической симметрии, а во втором – нет. Ответ на первый вопрос дается симметрией, на второй – топологией.

Типы гамильтонианов. Элементы кристаллической группы полубесконечного кристалла (7 групп бордюров) совместно с инвариантностью гамильтониана $\widehat{\mathcal{H}}_{1\mathrm{D}}(k,y)$ относительно инверсии времени приводят к специфическим особенностям электронного спектра в симметричных точках Γ и X одномерной ЗБ (см. таблицу).

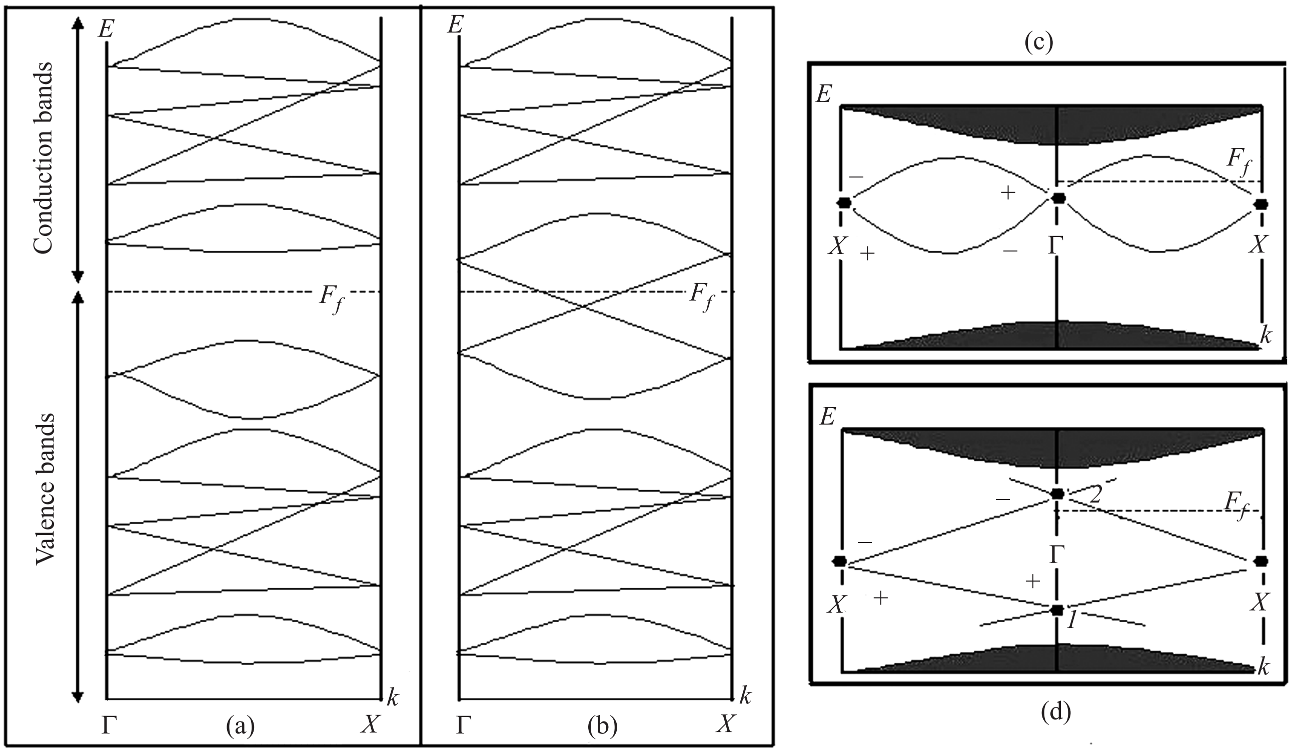
Составляющие магнитных восприимчивостей $KIrF_6$, K_2OsF_6 и K_2RuF_6

Группа	$\widehat{\mathcal{H}}_\Gamma(k)$	$\widehat{\mathcal{H}}_X(k)$
p1	$(v^x_\Gamma\sigma_x + v^y_\Gamma\sigma_y + v^z_\Gamma\sigma_z)k$	$(v^x_X\sigma_x + v^y_X\sigma_y + v^z_X\sigma_z)k$
p1g	$v^z_\Gamma\sigma_z k$	$(v^x_X\sigma_x + v^y_X\sigma_y + v^z_X\sigma_z)k$
p2	$(v^x_\Gamma\sigma_x + v^y_\Gamma\sigma_y)k$	$(v^x_X\sigma_x + v^y_X\sigma_y)k$
p1m	$(v^x_\Gamma\sigma_x + v^y_\Gamma\sigma_y)k$	$(v^x_X\sigma_x + v^y_X\sigma_y)k$
c1m	$v^z_\Gamma\sigma_z k$	$v^z_X\sigma_z k$
p2gm	$v^y_\Gamma\sigma_y k$	$(v^x_X\sigma_x + v^z_X\sigma_z)k$
p2mm	$v^y_\Gamma\sigma_y k$	$v^y_X\sigma_y k$

Как видно из таблицы, кристаллическая симметрия и инверсия времени диктуют конический безмассовый вид спектра в симметричных точках Γ и X [10]. *Для вычисления интересующих нас глобальных топологических инвариантов необходимо знать поведение гамильтониана по всей* 1D *зоне Бриллюэна. Условия согласования представлений в разных симметричных точках* ЗБ *и непрерывности спектра* $\varepsilon_n(k)$ *позволяют восстановить поведение спектра по всей одномерной* ЗБ. Эффективный гамильтониан, описывающий поверхностные состояния в окрестности симметричных точек в области энергий в запрещенной зоне, имеет вид

$$\widehat{\mathcal{H}}_\Gamma(k) = \sum_{i,x,y,z} a^i_\Gamma(k)\sigma_i,\ \widehat{\mathcal{H}}_X(k) = \sum_{i,x,y,z} a^i_X(k)\sigma_i. \quad (5)$$

В каждой из точек Γ и X в запрещенной зоне может реализоваться несколько копий одного и того же представления, приводящего к коническим особенностям (5) (рис. a и b). Пусть имеется лента с двумя границами, содержащая макроскопически большое число N_l одномерных "слоев", параллельных границам. Электронный спектр такой системы должен классифицироваться по неприводимым представлениям с учетом инверсии времени одной из семи групп бордюров. В спинорном случае в этих группах в точках Γ и X допустим только конический дираковский вид спектра (см. рисунок). Полный гамильтониан си-



Пример энергетического спектра 2D→1D-кристалла с границей

стемы как целого в окрестности симметричных точек диагонализуется и дается прямой суммой:

$$\widehat{\mathcal{H}}_\Gamma = \oplus_{i=1,N}\widehat{\mathcal{H}}_{i,\Gamma}(k),\ \widehat{\mathcal{H}}_X = \oplus_{i=1,N}\widehat{\mathcal{H}}_{i,X}(k), \qquad (6)$$

где N – полное число уровней в пересчете на элементарную ячейку ($N = sN_l$, s – число атомных орбиталей на атом с учетом спина, принимаемых к рассмотрению). Гамильтониан кристалла как целого инвариантен относительно элементов кристаллической симметрии и инверсии времени. Матрица представления в симметричных точках распадается на прямую сумму N представлений, одинаковых в Γ и одинаковых в X. Естественно, что в зависимости от группы симметрии представления в Γ и X, вообще говоря, различаются

$$\widehat{\mathcal{D}}_\Gamma = \oplus_{i=1,N}\widehat{\mathcal{D}}_{i,\Gamma},\ \widehat{\mathcal{D}}_X = \oplus_{i=1,N}\widehat{\mathcal{D}}_{i,X}. \qquad (7)$$

Если число электронов на ячейку является четным, то система (рис. a) будет обычным изолятором. В случае же рис. b она оказывается топологическим изолятором. Отметим, что возможно большое число различных соединений уровней между симметричными точками. Однако если в объеме система изолятор, то достаточно рассмотреть только уровни вблизи уровня Ферми.

Два факта позволяют ограничиться областью энергий в запрещенной зоне. Во-первых, в симметричных точках все представления двумерны (см., например, рис. a и b) в зависимости от группы либо за счет объединения при инверсии времени двух одномерных представлений, либо изначально, как это имеет место в группах (p2mm) и (p2mg). При этом инверсия времени не приводит к объединению представлений [11, 12]. Во-вторых, сходная бесконечная система–изолятор, что позволяет учитывать только те гамильтонианы $\widehat{\mathcal{H}}_{i,\Gamma}(k)$ и $\widehat{\mathcal{H}}_{i,X}(k)$, уровни от которых переходят друг в друга при движении от Γ к X внутри запрещенной зоны. Фактически эти два факта приводят к $\mathcal{Z}_2$-классификации (см. ниже). При топологической классификации *полного гамильтониана* из-за множества различных типов соединения уровней в симметричных точках (рис. c и d) обойтись только $\mathcal{Z}_2$-классификацией вряд ли возможно.

В зависимости от типа кристаллической симметрии гамильтонианы содержат разное число независимых функций $a^i_\Gamma(k)$ и $a^i_X(k)$ (где $i = 1, 2, 3$), которые в окрестности симметричных точек линейны по k ($v^i_{\Gamma,X} = da^i_X(k)dk|_{k=\Gamma,X}$), однако не являются независимыми в точках Γ и X. Полубесконечный кристалл описывается единым гамильтонианом. Поэтому материальные функции в (5) фактически представляют собой лишь разную запись одних и тех же функций, единых по всей 1D ЗБ. Иначе говоря, представления уровней энергии в точках Γ и X должны быть согласованы. На этот факт впервые было обращено внимание еще в работах Вигнера и др. [13, 14].

Обратимся к рис. c. При отходе по k от точки Γ в направлении точки X имеются две ветви спектра, которые даются спектром гамильтониана $\widehat{\mathcal{H}}_\Gamma(k)$. С другой стороны, при движении по k от точки X к точке Γ те же ветви даются собственными числами $\widehat{\mathcal{H}}_X(k)$:

$$\varepsilon_\Gamma^\pm(k) = \pm\sqrt{\sum_{i=x,y,z}[a_\Gamma^i(k)]^2},\ \varepsilon_X^\pm(k) = \pm\sqrt{\sum_{i=x,y,z}[a_X^i(k)]^2}. \tag{8}$$

В результате в ситуации рис. c изменение k от точки Γ в точку X и обратно индуцирует преобразование гамильтониана (материальные функции также испытывают преобразование)

$$\begin{gathered} k:\Gamma\to X\to\Gamma,\quad \widehat{\mathcal{H}}_\Gamma(k)\to\widehat{\mathcal{H}}_X(k)\to\widehat{\mathcal{H}}_\Gamma(k),\\ k:\Gamma\to X\to\Gamma,\quad a_\Gamma^i(k)\to a_X^i(k)\to a_\Gamma^i(k).\end{gathered} \tag{9}$$

Таким образом, гамильтониан в точке Γ при циклическом изменении k переходит сам в себя. При этом в соответствии с таблицей при переходе от центра ЗБ к границе часть материальных функций может обращаться в нуль. При движении по k происходит движение по ветвям спектра:

$$k:\Gamma\to X\to\Gamma,\ \varepsilon_\Gamma^+(k)\to(\varepsilon_X^-(k),\varepsilon_X^+(k))\to\varepsilon_\Gamma^-(k). \tag{10}$$

В ситуации рис. d отображение замкнутой траектории в 1D ЗБ по k индуцирует отображения, аналогичные (9), (10):

$$k:\Gamma\to X\to\Gamma,\quad \widehat{\mathcal{H}}_{\Gamma_1}(k)\to\widehat{\mathcal{H}}_X(k)\to\widehat{\mathcal{H}}_{\Gamma_2}(k), \tag{11}$$

$$\begin{gathered} k:\Gamma\to X\to\Gamma,\quad a_{\Gamma_1}^i(k)\to a_X^i(k)\to a_{\Gamma_2}^i(k),\\ k:\Gamma\to X\to\Gamma,\quad \varepsilon_{\Gamma_1}^+(k)\to(\varepsilon_X^+(k),\varepsilon_X^-(k))\to\varepsilon_{\Gamma_2}^-(k).\end{gathered} \tag{12}$$

Разница состоит в том, что при возврате в точку Γ гамильтониан $\widehat{\mathcal{H}}_{\Gamma_1}(k)$ (соответственно ветви спектра) переходит в $\widehat{\mathcal{H}}_{\Gamma_2}(k)$.

Таким образом, единый гамильтониан $\widehat{\mathcal{H}}_{1\mathrm{D}}(k,\{a(k)\})$ в области энергий в запрещенной зоне, описывающий поверхностные состояния по всей зоне Бриллюэна, который в точках Γ и X переходит в $\widehat{\mathcal{H}}_\Gamma(k)$, $\widehat{\mathcal{H}}_X(k)$ (или в $\widehat{\mathcal{H}}_{\Gamma_{1,2}}(k)$, $\widehat{\mathcal{H}}_X(k)$), может быть задан набором единых функций $\{a^i(k)\}$, непрерывных по всей ЗБ.

Из-за того, что все представления при разных энергиях в точках Γ и X являются копиями одних и тех же представлений (7), *ветви спектра в этих точках могут соединяться лишь двумя способами*: 1) *две ветви $\varepsilon_X^\pm(k)$ одного представления $\mathcal{D}_X$ в X переходят в две ветви $\varepsilon_\Gamma^\pm(k)$ одного представления $\mathcal{D}_\Gamma$*; 2) *две ветви $\varepsilon_X^\pm(k)$ одного представления $\mathcal{D}_X$ в X переходят в две ветви $\varepsilon_{\Gamma_1}^\pm(k)$ и $\varepsilon_{\Gamma_2}^\pm(k)$ двух копий (при разных энергиях) одного и того же представления, $\mathcal{D}_{\Gamma_1}$ и $\mathcal{D}_{\Gamma_2}$. Именно этот факт предопределяет топологическую $\mathcal{Z}_2$-классификацию уровней в запрещенной зоне.*

Топологическая классификация 2D→1D-гамильтонианов и поверхностных (краевых) состояний. Непрерывная деформация одного гамильтониана в другой означает деформацию функций $\{a^i(k)\}$, параметризующих гамильтониан по всей 1D ЗБ. Возможна деформация двух видов: без нарушения и с нарушением кристаллической симметрии. Деформации первого вида означают, что число независимых функций $\{a^i(k)\}$ не меняется. Соответственно не нарушается кристаллическая симметрия, диктующая число независимых функций. Во втором случае число независимых функций $\{a^i(k)\}$ может меняться. Например, пусть задан гамильтониан для группы (p1), не имеющей никаких пространственных элементов симметрии, кроме единичного, который содержит три независимые функции $a_{1,2,3}(k)$. При деформации можно устремить одну из функций, например $a_1(k)$, к нулю. Это будет фактически означать "увеличение" симметрии системы, поскольку две независимые функции могут быть только в группах (p2), (p1m) и (p2gm) (см. таблицу).

Важно отметить, что *при любых деформациях гамильтонианов, как с сохранением кристаллической симметрии, так и с ее нарушением, конические особенности сохраняются. Это свойство только групп бордюров. Для 2D-поверхностных групп оно уже не справедливо.* Далее будем допускать деформации гамильтонианов самого общего вида, даже с нарушением кристаллической симметрии.

Из проведенного выше анализа следует, что топологическое пространство гамильтонианов в симметричных точках представляет собой прямую сумму пространств эрмитовых матриц вида 2 × 2. Удобно перейти от множества эрмитовых матриц вида (5) к топологической группе $SU(2)$. Изменение волнового вектора в 1D ЗБ приводит к изменению гамильтониана и соответствующей эволюции вектора состояний $e^{i\widehat{\mathcal{H}}_{1\mathrm{D}}(k,\{a(k)\})}|u(k)\rangle$. Как обычно,

$$e^{i\widehat{\mathcal{H}}_{1\mathrm{D}}(k,\{a(k)\})} = \cos[a(k)) + i\sin(a(k)]\mathbf{n}_a\cdot\boldsymbol{\sigma}\in SU(2), \tag{13}$$

$a(k) = \sqrt{\sum_{i=x,y,z}[a^i(k)]^2}$, $\mathbf{n}_a = \mathbf{a}(k)/a(k)$. Замкнутая траектория волнового вектора в ЗБ $\Gamma \to X \to \Gamma$ (отрезок с отождествленными в точке $k = \Gamma$ концами есть окружность S^1) приводит к траектории в топологической группе $SU(2)$. После этого задача сводится к классификации гомотопически эквивалентных отображений

$$S^1 \to SU(2), \tag{14}$$

которые известны [15] и даются первой фундаментальной группой $\pi_1(SU(2)/\mathcal{Z}_2) = \mathcal{Z}_2$.

Таким образом, имеются два класса эквивалентности гамильтонианов (соответственно, краевых состояний). Внутри класса путем непрерывной деформации функций $\{a^i(k)\}$, которые фактически играют роль углов поворота, можно перейти от одного гамильтониана (соответственно, типа поверхностных состояний) к другому. Непрерывный переход между разными классами невозможен. Естественно сопоставить два класса двум типам поверхностных состояний. Поскольку $SO(3) \approx SU(2)/\mathcal{Z}_2$-группа ортогональных вращений есть фактор-группа накрывающей группы $SU(2)$, состояния второго типа (рис. d) представляют собой состояния с перекруткой (*twisted states*) при двукратном циклическом обходе ЗБ. При непрерывной деформации гамильтониана $\mathbf{n}_a$ совершает намотку на сферу $SO(3)$, накрывая ее один или два раза (точнее, четное или нечетное число раз). Отметим, что состояния как первого, так и второго типа могут иметь и большее число пересечений между ветвями на интервале Γ–X (см. рис. c и d). Такие пересечения называются случайными. Они могут быть убраны непрерывной деформацией $\{a^i(k)\}$, в отличие от пересечения (вырождения) уровней в точках Γ и X, которое диктуется кристаллической симметрией и инверсией времени. Количество дополнительных пересечений может отличаться от представленного на рис. c и d только на четное число.

Заключение. Итак, в 2D→1D-системах имеется только два топологически различных класса эквивалентности поверхностных состояний в щели проекций объемного спектра. Симметрийный анализ дает все типы особенностей на границе 2D-систем. Других особенностей в кристаллических системах симметрия не допускает. Симметрия также дает условие сшивки материальных функций, параметризующих гамильтониан в разных точках ЗБ. Единая по всей ЗБ параметризация материальных функций позволяет построить отображение замкнутых траекторий по квазиимпульсу k в ЗБ в пространство эрмитовых матриц 2×2 – гамильтонианов (точнее, в топологическую группу $SU(2)$; гамильтонианы реализуют экспоненциальное представление этой группы). Классы эквивалентности топологически разных типов гамильтонианов даются элементами первой фундаментальной группы $\pi_1(SO(3)) = \pi_1(SU(2)/\mathcal{Z}_2) = \mathcal{Z}_2$. Первый тип (рис. a и c) отвечает поверхностным состояниям типа “обычный изолятор??, второй (рис. b и d) – топологическому спин-холловскому изолятору. Выражаю благодарность С.С. Назину за многочисленные и полезные обсуждения.

1. D. J. Thouless, M. Kohmoto, M. P. Nightingale, and M. den Nijs, Phys. Rev. Lett. **49**, 405 (1982).
2. F. D. M. Haldane, Phys. Rev. Lett. **61**, 2015 (1988).
3. G. E. Volovik, Sov. Phys. JETP **67**(9), 1804 (1988).
4. H. So, Prog Theor. Phys. **74**, 585 (1985).
5. V. M. Yakovlenko, arXiv:cond-mat/9703195.
6. Ю. В. Копаев, УФН **179**(11), 1175 (2009).
7. M. Z. Hasan and C. L. Kane, Rev. Mod. Phys. **82**, 3045 (2010).
8. Xi,-L. Qi and Sh.-Ch. Zhang, Rev. Mod. Phys. **83**, 1057 (2011).
9. I. E. Tamm, Z. Phys. **76**, 849 (1932).
10. С. Н. Молотков, Письма в ЖЭТФ **94**, 306 (2011).
11. C. Herring, Phys. Rev. **52**, 361 (1937).
12. Г. Л. Бир, Г. Е. Пикус, *Симметрия и деформационные эффекты в полупроводниках*, М.: Наука, 1972.
13. L. P. Bouckaert, R. Smoluchowski, and E. Wigner, Phys. Rev. **50**, 58 (1936).
14. J. von Neumann and E. Wigner, Z. Phys. **30**, 467 (1929).
15. A. Hatcher, *Algebraic Topology*, Cambridge University Press, 2002.