

Об электронном спектре низкоразмерных структур с симметрией бордюров

С. Н. Молотков

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

Академия криптографии, 103025 Москва, Россия

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

Поступила в редакцию 22 апреля 2011 г.

После переработки 19 мая 2011 г.

Рассмотрены особенности электронного спектра в низкоразмерных (квазиодномерных) структурах с симметрией бордюров. Показано, что конический безмассовый (дираковский) вид спектра ($\varepsilon(\mathbf{k}) \propto \pm|\mathbf{k}|$) в бесспиновом случае возникает в группах с плоскостями скольжения. Данный спектр является следствием принудительного вырождения, которое возникает из-за совместного действия элементов симметрии решетки и инвариантности относительно обращения времени. Для спинорных представлений конический вид спектра возникает во всех группах.

В последние годы в связи с технологическими достижениями стало возможным создание различных искусственных низкоразмерных наноструктур. Одним из таких объектов является графен (двумерные монослои графита; см., например, обзор [1]). В графене наблюдается линейный безмассовый (дираковский) закон дисперсии электронного спектра на границе зоны Бриллюэна: $\varepsilon(\mathbf{k}) \propto \pm|\mathbf{k}|$ [1]. Давно известно, что линейный и кубический ($\varepsilon(\mathbf{k}) \propto \pm|\mathbf{k}|^3$) безмассовые законы дисперсии имеют место для поверхностных состояний на грани (111) полуметаллов V группы (Bi, As и Sb; см. [2]).

Экзотический безмассовый закон дисперсии определяет многие необычные физические свойства таких систем и диктуется симметрией пространственной решетки.

Соображения симметрии играют фундаментальную роль в квантовой физике. Приложения теории групп, точнее теории представлений групп, оказались очень эффективными в теории конденсированного состояния. Симметричные соображения, начиная с теории фазовых переходов второго рода Ландау [3], привели ко многим интересным физическим предсказаниям практически во всех разделах физики твердого тела. В известных работах [4–6] были предсказаны новые состояния сверхпроводников с экзотическими типами куперовского спаривания, а также нетривиальные топологически устойчивые структуры в жидком гелии $^3\text{He-A}$ [5, 6]. Аппарат гомотопических групп был успешно применен для классификации особенностей, имеющих топологическую природу, в различных физических системах [7].

Вид электронного спектра в таких структурах определяется исключительно симметрией пространственной группы решетки. Для трехмерных кристаллов, как известно, существует 230 пространственных групп Федорова (см., например, [8]). Такие группы относятся к типу G_3^3 . Верхний индекс обозначает размерность пространства, нижний – число измерений, по которым структура периодична.

Группа G_2^2 описывает строго двумерные структуры, периодические в двух измерениях. Плоских решеток, относящихся к данной группе, имеется 17 (графен является примером такой двумерной структуры и имеет решетку № 15 [1, 8]). Полная симметричная классификация особенностей электронного спектра для двумерных решеток осуществлена в [9, 10]. Отметим (см. [10]), что конический вид электронного спектра в графене не является единственным и уникальным. Конический вид электронного спектра в спинорном случае встречается практически во всех 17 плоских пространственных решетках. Кроме того, существуют еще более экзотические формы электронного спектра [10]. Поверхностные состояния на поверхности полубесконечных кристаллов также классифицируются по унитарным представлениям групп из семейства G_2^2 .

Группы слоев G_2^3 [8] описывают трехмерные объекты конечной толщины, имеющие периодичность в двух направлениях. Всего существует 80 пространственных групп из данного семейства. Например, электронный спектр в упаковке из двух монослоев графита должен описываться представлениями одной из групп семейства G_2^3 .

Таблица 1

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

Решетка 1	Точка ЗБ	Случай по Херрингу	Представл.	Четн.	Нечетн.
$p1$	$\Gamma, X (p1)$	a_1	A	k^2	
	$\Gamma', X' (p1)$	c_1	A	Ik^2	$\sigma_x k, \sigma_y k, \sigma_z k$

Таблица 2

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

Решетка 2	Точка ЗБ	Случай по Херрингу	Представл.	Четн.	Нечетн.
$p1g$	$\Gamma, (p1g)$	a_1	A^+, A^-	k^2	
	$X (p1g)$	b_1	A^+	Ik^2	$\sigma_z k$
	$\Gamma' (p1g)$	b_1	A^+	Ik^2	$\sigma_z k$
	$X' (p1g)$	c_1	A^+6	Ik^2	$\sigma_x k, \sigma_y k, \sigma_z k$

Существует 75 пространственных групп G_1^3 (так называемые группы стержней), описывающих объекты конечной толщины в двух направлениях (стержень), периодические в перпендикулярном направлении. Данные группы включают в себя цилиндрические и спиральные. Например, электронный спектр активно исследуемых нанотрубок из углерода и других материалов должен описываться представлениями одной из групп данного семейства. В данном семействе появляется новый элемент симметрии, который обычно называют спиральностью. Насколько нам известно, полная симметричная классификация электронного спектра для таких групп еще не осуществлена.

Наконец, имеется семейство групп G_1^2 (группы бордюров [8]). Данные группы описывают объекты конечных размеров в одном измерении в плоскости, имеющие периодичность в перпендикулярном направлении¹). Имеется всего 7 таких пространственных групп. Они приведены на рис. 1.

Оказывается, что безмассовый спектр возникает и в данных структурах даже для обычных (не спинорных) представлений. Глубинной причиной, ответственной за такой спектр, является симметрия решетки вместе с требованием инвариантности по отношению к обращению времени. Ниже будут приведены все возможные особенности электронного спектра, которые имеют место в низкоразмерных структурах с симметрией бордюров.

Данные структуры периодичны в одном направлении. Поэтому зона Бриллюэна представляет собой

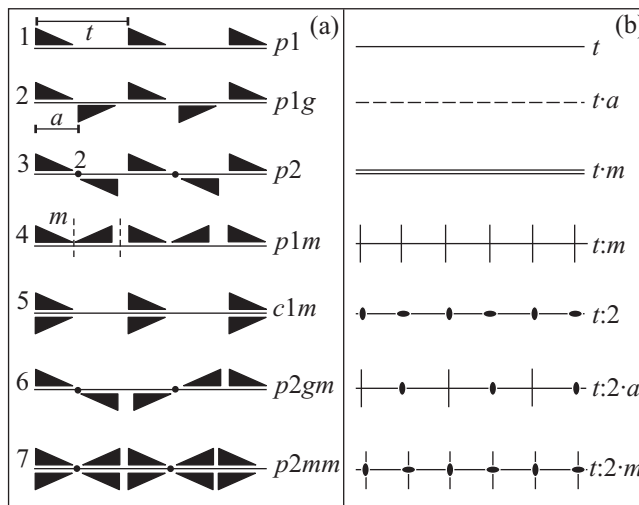


Рис. 1. Пространственные группы G_1^2 с симметрией бордюров. (a) – Изображение элементов симметрии групп. (b) – правильные системы точек, характеризующие группы

отрезок. В зоне Бриллюэна имеется две точки с выделенной симметрией; точка $\Gamma (k = 0)$ – центр зоны и точка $X (k = \pm\pi/t)$ – ее граница. Кратность вырождения уровня энергии в некоторой точке k определяется размерностью представления $\mathcal{D}(g)$ группы волнового вектора G_k . Инвариантность гамильтониана по отношению к обращению времени²) может приводить к дополнительному (принудительному) вырождению. Впервые этот вопрос применительно к электронному спектру в твердых телах был рассмотрен

¹) Фактически это квазиодномерные структуры типа ленты (бордюров).

²) Рассматриваем обычные (не цветные, не магнитные) группы пространственной симметрии.

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

Решетка 3	Точка ЗБ	Случай по Херрингу	Представл.	Четн.	Нечетн.
$p2$	$\Gamma, X (p2)$	a_1	A, B	k^2	
	$\Gamma', X' (p2)$	b_1	A_1	Ik^2	
			A_2		$\sigma_x k, \sigma_y k$

Таблица 4

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

Решетка 4	Точка ЗБ	Случай по Херрингу	Представл.	Четн.	Нечетн.
$p1m$	$\Gamma, X (p1m)$	a_1	A^+	k^2	
	$\Gamma', X' (p1m)$	b_1	A^+	Ik^2	
			A^-		$\sigma_x k, \sigma_y x$

Херрингом [11] (см. также [12]). Пусть ψ – набор волновых функций, относящихся к представлению $\mathcal{D}(g)$, а $\hat{K}\psi$ – функции, полученные из ψ операцией обращения времени (крамерсовского сопряжения \hat{K}), которые преобразуются по сопряженному представлению $\mathcal{D}^*(g)$. Возможны три случая (см. [11] и [12]).

1. Наборы функций ψ и $\hat{K}\psi$ линейно зависимы. Представления $\mathcal{D}(g)$ и $\mathcal{D}^*(g)$ в этом случае эквивалентны.

2. Наборы функций ψ и $\hat{K}\psi$ линейно независимы. Представления $\mathcal{D}(g)$ и $\mathcal{D}^*(g)$ неэквивалентны и имеют комплексно сопряженные характеры ($\chi(g) \neq \chi^*(g)$).

3. Наборы функций ψ и $\hat{K}\psi$ линейно независимы. Представления $\mathcal{D}(g)$ и $\mathcal{D}^*(g)$ эквивалентны и имеют вещественные характеры ($\chi(g) = \chi^*(g)$).

Инвариантность гамильтониана (и, соответственно, его собственных значений) по отношению к обращению времени означает, что наборы функций ψ и $\hat{K}\psi$ отвечают уровню с одной и той же энергией, что фактически означает удвоение кратности вырождения (или, более формально, принудительное удвоение размерности представлений за счет их объединения). Критерий Херринга [11] позволяет различать эти три случая, если известны характеры представлений группы волнового вектора. Критерий гласит, что

$$\Sigma = \frac{1}{N_G} \sum_{G'_k} \chi_k(g^2) \delta_{k, -gk} = \begin{cases} K^2 & \text{для случая 1,} \\ 0 & \text{для случая 2,} \\ -K^2 & \text{для случая 3,} \end{cases} \quad (1)$$

где $K^2 = 1$ для обычных представлений, $K^2 = -1$ для спинорных представлений, G_k – группа волнового вектора, G'_k – группа волнового вектора, не содержащая примитивных трансляций. В случаях 2 и 3 возникает дополнительное вырождение.

Для классификации электронного спектра в симметричных точках зоны Бриллюэна удобно воспользоваться методом инвариантов, изложенным в монографии [12]. Он 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 . Гамильтониан может быть представлен в виде [12]

$$\mathcal{H}(k) = \sum_m \sum_l a_m X_l^m K_l^{*m}. \quad (2)$$

Здесь X_l^m – базисные матрицы, преобразующиеся по некоторому представлению (их удобно выбрать эрмитовыми), K_l^{*m} – компоненты тензора, составленные из компонент волнового вектора, преобразующиеся по сопряженному по отношению к базисным матрицам представлению, a_m – произвольные константы, которые являются вещественными, если базисные матрицы выбраны эрмитовыми. При этом одни и те же компоненты тензоров могут входить в произведение с разными базисными матрицами. Структура базисных матриц и компонент тензора диктуется симметрией пространственной решетки с точностью до выбора базиса.

Таблица 5

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

Решетка 5	Точка ЗБ	Случай по Херрингу	Представл.	Четн.	Нечетн.
$c1m$	$\Gamma, X (c1m)$	a_1	A^+	k^2	
	$\Gamma', X' (c1m)$	b_1	A^+	Ik^2	$\sigma_z k$

Таблица 6

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

Решетка 6	Точка ЗБ	Случай по Херрингу	Представл.	Четн.	Нечетн.
$p2gm$	$\Gamma (p2gm)$	a_1	A^+	k^2	
			B^+		$\sigma_y k$
	$\Gamma' (p1gm)$	a_1	A^+	Ik^2	
			B^-		$\sigma_y k$
	$X' (p1gm)$	b_1	A^+	Ik^2	
			B^+		$\sigma_x k, \sigma_y k$

При объединении двух представлений (случаи 2 и 3) матрица гамильтониана имеет вид (детали см. в [12])

$$\mathcal{H}(k) = \begin{pmatrix} \mathcal{H}_{11}(k) & \mathcal{H}_{12}(k) \\ \mathcal{H}_{21}(k) & \mathcal{H}_{22}(k) \end{pmatrix}. \quad (3)$$

Поскольку в одномерном случае волновые векторы \mathbf{k} и $-\mathbf{k}$ для Γ и X точек зоны Бриллюэна эквивалентны, для диагональных и недиагональных компонент матрицы гамильтониана (2) инверсия времени приводит к условиям (т.е. реализуются только случаи a_1, b_1, c_1 из [12])

$$\mathcal{H}_{22}(k) = \mathcal{H}_{11}^*(fk), \quad \mathcal{H}_{21}(k) = K^2 \mathcal{H}_{12}^*(fk), \quad (4)$$

где $f = 1$ и -1 для четных и нечетных компонент базисных матриц X_l^m по отношению к обращению времени. При этом в произведение в (2) могут входить матрицы и компоненты тензоров одинаковой четности.

Число независимых констант a_m и независимых диагональных и недиагональных компонент базисных матриц, четных либо нечетных, входящих в (2), преобразующихся по представлению \mathcal{D}_κ точечной группы направлений, равно числу представлений \mathcal{D}_κ , содержащихся в прямом произведении $\mathcal{D}_\mu^k \times \mathcal{D}_\mu^{*k}$. Имеем

$$N_\kappa = \frac{1}{N_G} \sum_{g \in G'_\kappa} |\chi_\mu^k(g)|^2 \chi_\kappa(g). \quad (5)$$

Соответственно число четных и нечетных матриц определяется по следующим формулам (случаи a_1, b_1 из [12]):

$$N_\kappa = \frac{1}{2N_G} \sum_{g \in G'_\kappa} \chi_\kappa(g) \{[\chi_\mu^k(g)]^2 + K^2 f \chi_\mu^k(g^2)\}. \quad (6)$$

Воспользуемся формулами (1)–(6) для получения инвариантов. Все возможные инварианты приведены в табл. 1–7. В первой колонке указан номер группы, во второй – симметричные точки в зоне Бриллюэна с соответствующими группами волнового вектора (спинорные представления снабжены штрихами), в третьей – случай по Херрингу, в четвертой – представления группы направлений (в обозначениях [8]), содержащихся в прямом произведении $\mathcal{D}_\mu^k \times \mathcal{D}_\mu^{*k}$, в пятой – четные относительно обращения времени инварианты, в шестой – нечетные.

Как следует из таблиц (последние две колонки), конический вид спектра ($\varepsilon(\mathbf{k}) \propto \pm|\mathbf{k}|$) в бесспиновом случае возникает в группах, имеющих плоскость скользящего отражения (2 и 6). Конический вид спектра (принудительное вырождение) в симметричных точках возникает в результате совместной комбинации элементов симметрии пространственной решетки и инвариантности по отношению к обращению времени (крамерсовского сопряжения).

Для спинорных представлений конический вид спектра возникает во всех группах.

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

Решетка 7	Точка ЗБ	Случай по Херрингу	Представл.	Четн.	Нечетн.
$p2mm$	Γ, X ($p2mm$)	a_1	A^+	k^2	
	Γ', X' ($p2mm$)	a_1	A^{+6}	Ik^2	
			B^-		$\sigma_y k$

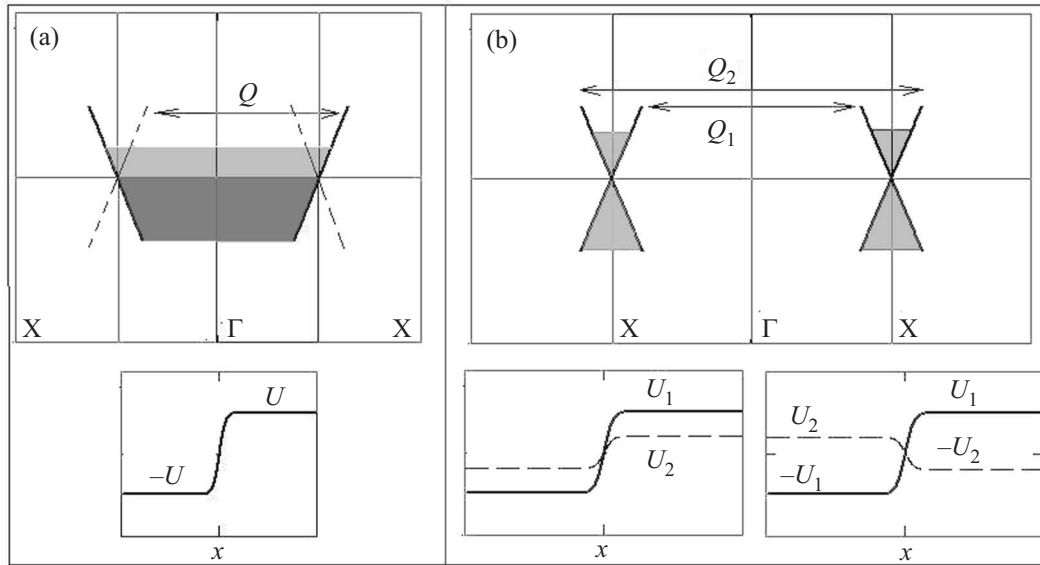


Рис. 2. (а) – Пример нестинга, приводящего к пайерлсовской неустойчивости, для простого невырожденного спектра типа $\varepsilon(k) = \cos(k/L)$. Показана линейная часть невырожденного спектра вблизи уровня Ферми. Темным фоном показано половинное заполнение зоны, более светлым – отклонение от половинного заполнения. Нижняя половина рисунка – доменная стенка параметра порядка. (б) – Пример нестинга для симметрично вырожденного конического спектра $\varepsilon_{\pm}(k) = \pm|k|$ вблизи границы зоны Бриллюэна. Нижняя часть – возможные типы неустойчивостей и доменные стенки

Кратко обсудим некоторые очевидные физические следствия, к которым приводит принудительное симметричное вырождение.

Как известно, в одномерном случае условие совмещения (*nesting*) затравочного одночастичного электронного спектра для невырожденного закона дисперсии, $\varepsilon(k) = -\varepsilon(k+Q)$, приводит к логарифмической особенности в электронном поляризационном операторе. Данная особенность при нестинге всегда имеет место (рис. 2а). Она приводит к пайерлсовской неустойчивости [13] – образованию волны зарядовой плотности (модуляции решетки и электронной плотности с периодом Q ; возможно также образование несоизмеримых структур [14]). При учете межэлектронного взаимодействия возможно также появление волны спиновой плотности [15]. Классический пример пайерлсовской неустойчивости при половинном заполнении зоны, а именно удвоение периода

решетки с дополнительной модуляцией электронной плотности (рис. 2а), описывается параметром порядка $U(Q)$. Неустойчивость приводит к открытию щели на уровне Ферми. Новый спектр дается собственными числами $E_{1,2}(k)$ гамильтониана, описывающего пайерлсовскую неустойчивость. Имеем

$$\begin{pmatrix} \varepsilon(k) & U(Q) \\ U(Q) & \varepsilon(k+Q) \end{pmatrix}, \quad \varepsilon(k) = k, \quad \varepsilon(k+Q) = -k, \quad (7)$$

где $E_{1,2}(k) = \pm\sqrt{k^2 + U^2(Q)}$.

Возможны также доменные стенки: слева и справа смещение решетки $U(x)$ и дополнительная модуляция электронной плотности имеют разные знаки (рис. 2а). На таких доменных стенках возникают локализованные состояния, в которых имеет место разделение спина и заряда (см., например, [16]).

В случае изначально симметрично вырожденно-го конического спектра (рис.2b), при отклонении заполнения при легировании от половинного возникают две ветви электронного спектра, для которых выполнено условие нестинга $\varepsilon_+(k) = -\varepsilon_-(k + Q_1)$ и $\varepsilon_-(k) = -\varepsilon_+(k + Q_2)$ ($\varepsilon_{\pm}(k) = \pm|k|$). Поэтому должны возникать по крайней мере два новых параметра порядка, $U_1(Q_1)$ и $U_2(Q_2)$, которые генетически связаны из-за принудительного вырождения электронного спектра. Матрица соответствующего гамильтониана, аналогичная (14), имеет размерность 4×4 . Аналогично предыдущему случаю возможно большее разнообразие доменных стенок (рис.2b) и сочетаний зарядовых и спиновых свойств состояний на данных стенках. Напомним, что из-за принудительного вырождения за счет пространственных элементов симметрии и крамерсовского обращения времени даже для затравочного конического спектра спин квазичастиц уже не является хорошим квантовым числом.

1. A. H. Castro Neto, F. Guinea, N. M. R. Peres et al., *Rev. Mod. Phys.* **81**, 109 (2009).
2. С. Н. Молотков, В. В. Татарский, *Поверхность* **5**, 17 (1988).
3. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Статистическая физика*, Т. 5, Ч. 1, М.: Наука, 1978.
4. Г. Е. Воловик, Л. П. Горьков, *ЖЭТФ* **88**, 1412 (1985).
5. В. П. Минеев, *УФН* **139**, 303 (1983).
6. Г. Е. Воловик, *УФН* **143**, 73 (1984).
7. G. E. Volovik, *Quantum Analogies, From Phase Transitions to Black Holes and Cosmology*, Ed. by W. G. Unruh, R. Schützhold, *Springer Lecture Notes in Physics* **718**, 31 (2007).
8. *Кристаллография*, Т. 1, Под ред. Б. К. Вайнштейна, М.: Наука, 1979.
9. S. V. Meshkov and S. N. Molotkov, *Surface Science* **240**, 263 (1990).
10. С. Н. Молотков, *Письма в ЖЭТФ* **90**, 382 (2009).
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. R. Peirls, *Quantum Theory of Solids*, Oxford: Clarendon Press, 1955.
14. С. А. Бразовский, С. А. Гордюнин, Н. Н. Кирова, *Письма в ЖЭТФ* **31**, 486 (1980); С. А. Бразовский, С. А. Гордюнин, *Письма в ЖЭТФ* **31**, 399 (1980).
15. Ю. В. Копаев, *Некоторые вопросы сверхпроводимости. К теории взаимосвязи электронных, структурных превращений и сверхпроводимости*, Труды ФИАН им. П. Н. Лебедева, 1975.
16. С. А. Бразовский, *Письма в ЖЭТФ* **28**, 656 (1978).