Письма в ЖЭТФ, том 124, вып. 9, с. 734 – 745 © 2026 г. 10 ноября

Нарушение соответствия объем–граница в моделях Су–Шриффера–Хигера и Райса–Меле

А. А. Горбацевич[+1)], *А. Е. Широков*[*]

[*]*1mm*[+] *Физический институт им. П. Н. Лебедева РАН, 119991 Москва, Россия*

[*]*Национальный исследовательский университет "Московский институт электронной техники", 124498 Зеленоград, Россия*

Поступила в редакцию 31 июля 2026 г.
После переработки 26 сентября 2026 г.
Принята к публикации 26 сентября 2026 г.

В реальных кристаллах свойства приповерхностной области отличаются от объема. Поэтому возникает необходимость уточнения фундаментального понятия физики топологических изоляторов – соответствия объем–граница (*bulk-boundary correspondence*). В работе показано, что поверхностный потенциал, характеризующий отличие поверхности от объема, может как подавлять поверхностные связанные состояния в топологически нетривиальном материале, так и создавать их в топологически тривиальном материале. Определены границы областей "слабого" и "сильного" нарушения соответствия объем–граница. Различие топологического и нетопологического материалов сохраняется при учете поперечной дисперсии, которая существенно влияет на условия формирования поверхностных связанных состояний.

DOI: 10.7868/S3034576626110079

1. Введение. Исследование топологических материалов, особенности электронных свойств которых определяются законами топологии, в последние годы стало одним из наиболее ярких и динамично развивающихся направлений современной физики и науки о материалах. Различные аспекты этого круга явлений и теорий подобно изложены в ряде фундаментальных обзоров [1–6].

Важный класс топологических материалов образуют топологические изоляторы (ТИ), электронный спектр которых в объеме материала соответствует изолятору (полупроводнику), а на поверхности имеет металлический (бесщелевой) характер. ТИ характеризуются отличием от нуля некоторой инвариантной по отношению к малым изменениям параметров материала (деформациям) величины – топологического инварианта (индекса). В одномерных ($1D$) ТИ топологическим инвариантом служит число оборотов (*winding number*), в $2D$ ТИ – число Черна, а в Z_2 $2D$ и $3D$ ТИ топологический порядок связан с наличием инверсии зон и отвечает ненулевому элементу группы Z_2 (т.е. 1). Принципиальным обстоятельством служит то, что топологический инвариант вычисляется на объемных волновых функциях, но определяет поверхностные свойства системы. В этом проявляется фундаментальное свойство ТИ – наличие соответствия объем–граница (*bulk–boundary correspondence*). Физический механизм возникновения отличного от нуля топологического инварианта можно исследовать на упрощенных моделях [7], среди которых исторически особое место занимает наглядная 1D модель сильной связи Су–Шриффера–Хиггера (СШХ), первоначально использованная для описания электронных свойств цепочек полиацетилена [8]. Следует отметить, что, как показано в работе [9], особенности электронного спектра такого типичного Z_2 ТИ, как Bi_2Se_3, могут быть объяснены также и на базе трехмерного обобщения $1D$ модели Райса–Меле (РМ) [10], родственной СШХ модели.

Вычисление числа оборотов в $1D$ модели СШХ требует задания элементарной ячейки кристалла. При этом важно, что сдвиг границ элементарной ячейки меняет также число оборотов. В полубесконечном кристалле граница ячейки определяется границей кристалла, которая служит естественной границей элементарной ячейки, что и лежит в основе соответствия объем–граница. Таким образом, не только объемная топологическая характеристика определяет электронную структуру поверхности, но и поверхность путем задания границ элементарной ячейки определяет топологические свойства объема. В $2D$ и $3D$ структурах поперечная дисперсия приводит к формированию краевых проводящих каналов, связанных с топологическими поверхностными состояниями. Однако, как экспериментально продемонстрировано, например, в работе [11] на примере

[1)]e-mail: aagor137@mail.ru

HgTe квантовых ям и в работах [12, 13] для гетероструктур InAs/GaSb, краевой транспорт и, следовательно, локализованные на поверхности состояния могут сохраняться и в нетопологической фазе.

В существующих моделях соответствия объем–граница обычно рассматривается идеальный полубесконечный кристалл (см., например, [7, 9]). Однако в реальных кристаллических структурах поверхность и интерфейс подвержены реконструкции и релаксации. В результате этого атомные и электронные характеристики приповерхностной (интерфейсной) области, как правило, отличаются от объемных, что на качественном уровне описывается как появление дополнительного по отношению к объему материала поверхностного потенциала. Такой потенциал может самостоятельно создавать локализованные на поверхности состояния, на что обращал внимание еще Шокли [14].

В настоящей работе на примере базовой для описания топологических состояний 1D модели СШХ, а также модели РМ мы рассмотрели взаимосвязь и взаимовлияние поверхностного потенциала и топологического фактора при образовании поверхностных связанных электронных состояний (ПСС). Мы показали, что один и тот же тип поверхностного потенциала может как подавлять ПСС в топологически нетривиальном материале, так и создавать их в топологически тривиальном материале с нулевым числом оборотов. При этом существенное различие ПСС в топологическом и нетопологическом материалах сохраняется при учете поперечной дисперсии.

2. Базовая модель. Базовая модель представляет собой альтернированную цепочку с двумя атомами (узлами) a и b в элементарной ячейке и описывается уравнением для узельных амплитуд $c_{a,bn}$:

$$\begin{aligned}(\varepsilon-\varepsilon_a)\,c_{an} &= -t_2 c_{bn-1} - t_1 c_{bn},\\ (\varepsilon-\varepsilon_b)\,c_{bn} &= -t_1 c_{an} - t_2 c_{an+1}.\end{aligned} \tag{1}$$

Здесь $\varepsilon_{a,b}$ – узельные энергии, при $\varepsilon_a = \varepsilon_b = \varepsilon_0$ имеем модель СШХ, при $\varepsilon_a \neq \varepsilon_b$ – модель РМ; t_1 и t_2 – интегралы перескока соответственно внутри ячейки и между ячейками, n – номер элементарной ячейки. Сам выбор ячейки в объемном материале произволен, но диктуется положением границы или интерфейса в полубесконечном кристалле или в гетероструктуре. Для определенности независимо от выбора элементарной ячейки крайний атом всегда будем обозначать индексом a, что обеспечивает сохранение вида объемных уравнений (1), а вот соотношение между интегралами перескока t_1 и t_2 может быть различным. Объемный закон дисперсии в модели (1) имеет вид (период решетки принимаем за единицу):

$$\varepsilon_{c,v}(k) = \overline{\varepsilon} \pm \sqrt{\delta^2 + t_1^2 + t_2^2 + 2t_1 t_2 \cos(k)} = \overline{\varepsilon} \pm \Delta(k), \tag{2}$$

где $\delta = (\varepsilon_a - \varepsilon_b)/2$, $\overline{\varepsilon} = (\varepsilon_a + \varepsilon_b)/2$. Минимальная энергетическая щель равна $2\left[\delta^2 + (|t_1| - |t_2|)^2\right]^{1/2}$ и располагается: в центре зоны Бриллюэна ($k = 0$) при $t_1 t_2 < 0$ или на грани ($k = \pi$) при $t_1 t_2 > 0$. Как нетрудно видеть, объемный закон дисперсии (2) не зависит от выбора элементарной ячейки. В дальнейшем ветви закона дисперсии, соответствующие знакам $\pm$ в (2), будем называть верхней ветвью (ВВ) и нижней ветвью (НВ) соответственно.

Топологические свойства материала определяются поведением на комплексной плоскости вектора, составленного из компонент обобщенного комплексного интеграла перескока $\tau(k) = t_1 + t_2 e^{ik}$ (при нашем выборе элементарной ячейки), и характеризуются числом оборотов вокруг начала координат при изменении k от *0* до *2*π [7, 9]. Если замкнутая кривая (проекция этой кривой на плоскость $\delta = 0$ в пространстве параметров модели РМ [14]), которую описывает конец вектора $(\mathrm{Re}\ \tau(k), \mathrm{Im}\ \tau(k)$, включает начало координат, – число оборотов равно единице, и материал топологически нетривиален. На поверхности такого материала существует топологическое ПСС с энергией, равной энергии поверхностного атома ε_0 в модели СШХ или ε_a в модели РМ. Если же начало координат находится вне этого контура, число оборотов равно нулю, материал топологически тривиален и ПСС отсутствует. Покажем, что наличие поверхностного потенциала может изменить эти условия.

Опишем сначала влияние поверхностного потенциала на ПСС в модели СШХ. Для модели СШХ, которая первоначально использовалась для моделирования π-орбиталей в полиацетилене, наиболее типичное соотношение параметров таково, что $t_1 t_2 > 0$, и экстремумы зон находятся на грани зоны Бриллюэна. Поэтому для волнового вектора ПСС (объем расположен справа от поверхности) запишем

$$k = \pi + i\kappa. \tag{3}$$

Узельные амплитуды и закон дисперсии (2) ПСС при этом имеют вид $c_{a,bn} = c_{a,b\kappa}(-1)^n e^{-\kappa n}$ и подчиняются уравнениям в объеме материала:

$$\begin{aligned}(\varepsilon-\varepsilon_0)\,c_{a\kappa} &= (t_2 e^{\kappa} - t_1) c_{b\kappa},\\ (\varepsilon-\varepsilon_0)\,c_{b\kappa} &= (-t_1 + t_2 e^{-\kappa}) c_{a\kappa},\end{aligned} \tag{4}$$

где выражение, получающееся из объемного закона дисперсии (2) при комплексном значении волнового вектора (3)($\varepsilon = \varepsilon_{c,v}(\kappa)$), имеет вид:

$$\varepsilon_{c,v}(\kappa) = \varepsilon_0 \pm \sqrt{(t_1 - t_2)^2 ch\left(\frac{\kappa}{2}\right)^2 - (t_1 + t_2)^2 sh\left(\frac{\kappa}{2}\right)^2} \tag{5}$$

и описывает состояние с энергией внутри запрещенной зоны, локализованное у поверхности с декрементом κ. Декремент κ определяется граничным условием. Помимо ПСС (5), имеются еще и ПСС, соответствующие не (3), а $k = i\kappa$, и расположенные ниже валентной зоны и выше зоны проводимости. Эти состояния мы в статье не рассматриваем, поскольку при наличии дефекта они могут существовать и в пределе одноатомной цепочки без удвоения ($t_1 = t_2$) и расположены вне запрещенной зоны, т.е. в совершенно другой области энергий, чем топологические ПСС.

Рассмотрим модельный поверхностный потенциал, который характеризует отличие от своих объемных значений узельной энергии ($\varepsilon_0 \to \varepsilon_0 + \zeta$) и ближайшего к поверхности интеграла перескока ($t_1 \to t_s$). На рисунке 1 представлены варианты полубесконечной цепочки СШХ в отсутствие

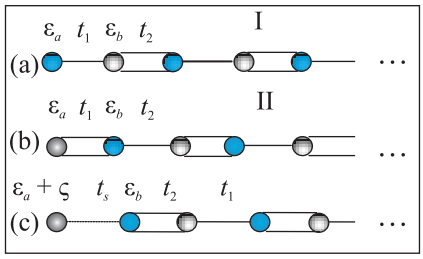

Рис. 1. (Цветной онлайн) Одномерные базовые модели сильной связи, рассматриваемые в настоящей работе. I – топологически нетривиальный 1D кристалл, II – топологически тривиальный 1D кристалл

поверхностного потенциала (рис. 1a, b) и при его наличии (рис. 1c). Двойными или одинарными линиями обозначены химические связи с большими (t_+) или меньшими (t_-) значениями интеграла перескока соответственно. Первый вариант (I) (рис. 1a) в отсутствие поверхностной реконструкции и поверхностного потенциала ($t_s = t_1 = t_-$, $t_2 = t_+$, $\zeta = 0$) отвечает топологически нетривиальному полубесконечному 1D кристаллу (имеется топологическое ПСС), второй вариант (II) ($t_s = t_1 = t_+$, $t_2 = t_-$, $\zeta = 0$) (рис. 1b) – топологически тривиальному (ПСС отсутствует). В отсутствие поверхностного потенциала в структуре, изображенной на рис. 1a, энергия ПСС расположена посередине запрещенной зоны (нулевая мода):

$$\varepsilon = \varepsilon_0, \quad \Delta(\kappa_0) = 0, \quad e^{-\kappa_0} = \frac{t_1}{t_2} = \frac{t_-}{t_+}, \tag{6}$$

амплитуды в узлах b равны нулю, а амплитуды в узлах a осциллируют с номером ячейки:

$$c_{bn} = c_{b\kappa} = 0, \quad c_{an} \propto (-1)^n e^{-\kappa_0 n}. \tag{7}$$

При наличии поверхностного потенциала уравнения для узельных амплитуд вблизи поверхности имеют вид:

$$\begin{aligned} (\varepsilon - \varepsilon_0 - \zeta)\, c_{a0} &= -t_s c_{b0}, \\ (\varepsilon - \varepsilon_0)\, c_{b0} &= -t_s c_{a0} - t_2 c_{a1}. \end{aligned} \tag{8}$$

Рассмотрим частный случай $t_s = t_1$ (поверхностный потенциал локализован только на крайнем узле). Второе уравнение в (8) при этом удовлетворяется тождественно (см. (1)). Граничное условие в удобном для анализа виде можно получить, дополнив первое уравнение (8) до объемного уравнения (1) путем добавления и вычитания члена $t_2 \tilde{c}_{b-1}$, где знак тильда означает значение амплитуды в узле b, экстраполированное из объема на фиктивный узел с $n = -1$. В результате находим независящее явно от энергии граничное условие:

$$-\zeta c_{a0} = t_2 \tilde{c}_{b-1}. \tag{9}$$

Заметим, что в случае отсутствия поверхностного потенциала ($\zeta = 0$) (невозмущенная исходная модель СШХ (1)) из граничного условия (9) без каких-либо дополнительных вычислений (ср. с [9]) немедленно получаем $c_{b\kappa} = 0$ (7), а из первого уравнения (8) $\varepsilon = \varepsilon_0$, т.е. (6).

Поскольку амплитуды a и b связаны соотношением (4), уравнение (9) определяет декремент κ и энергию ПСС (5). Из соотношения (9) следует важный вывод: при наличии поверхностного потенциала узельного типа амплитуда в узле b уже не равна нулю, в отличие от стандартного топологического состояния (7). Можно показать, что в структуре I (топологически нетривиальный материал) при малых значениях ζ и $t_1 = t_-$, $t_2 = t_+$:

$$\varepsilon_I - \varepsilon_0 \approx \zeta \frac{t_+^2 - t_-^2}{t_+^2}. \tag{10}$$

Как следует из (10), при наличии поверхностного потенциала, локализованного на узле, уровень топологического ПСС смещается из центра запрещенной зоны к ее краю. Мерой сохранения влияния топологического фактора на формирование ПСС при этом может служить отношение узельных амплитуд в под-

решетках a и b. Когда это отношение становится величиной порядка единицы, роль топологического фактора следует считать незначительной. При увеличении амплитуды поверхностного потенциала до значения

$$|\zeta| = t_+ \tag{11}$$

декремент обращается в нуль, уровень ПСС при дальнейшем увеличении $|\zeta|$ пересекает край разрешенной зоны, и ПСС исчезает. При этом объемные топологические характеристики не меняются (в рассматриваемой ситуации число оборотов равно единице), и точка (11) есть точка нарушения соответствия объем–поверхность.

В случае $t_1 = t_+,\ \ t_2 = t_-$ (нетопологический материал II) модуль отношения амплитуд $c_{b\kappa}/c_{a\kappa}$ (4) при изменении декремента от нуля до критического значения (6) κ_0 пробегает значения от единицы до бесконечности. Следовательно (см. (9)), ПСС в топологически тривиальном материале возникает при значении поверхностного потенциала $|\zeta| > t_- = t_2$. Можно показать, что энергия ПСС при этом в пределе слабого отклонения потенциала от критического значения $t_-(|\zeta| = t_- + \zeta',\ \zeta' << t_-)$ равна:

$$\varepsilon_{\rm II} - \varepsilon_0 = -\mathrm{sign}(\zeta)\left(t_+ - t_- - \frac{1}{2}\kappa^2\frac{t_+t_-}{(t_+-t_-)^2}\right), \tag{12}$$

где декремент κ связан с поверхностным потенциалом соотношением

$$\kappa = \zeta'\frac{t_+-t_-}{t_+t_-},$$

т.е. энергия ПСС отщепляется от края разрешенной зоны и с ростом $|\zeta|$ смещается вглубь запрещенной зоны. Таким образом, в интервале значений поверхностного потенциала

$$t_- < |\zeta| < t_+ \tag{13}$$

ПСС существует как в топологически нетривиальном (I) (10), так и в топологически тривиальном (II) (12) материалах. В этом интервале "сила влияния" поверхностного потенциала достаточно велика, чтобы образовать ПСС и в отсутствие действия топологического фактора. Поэтому следует полагать, что и в топологически нетривиальном материале ПСС в значительной степени сформировано в результате действия поверхностного потенциала, а не топологического фактора. Данный интервал можно считать областью "слабого" нарушения соответствия объем–поверхность. Интервал же $|\zeta| > t_+$, где ПСС в топологически нетривиальном материале отсутствует, уместно рассматривать как область "сильного" нарушение этого соответствия.

Рассмотрим другой частный случай (условно – релаксация поверхности) $\zeta = 0,\ t_s \neq t_1$ в (8). Выполнив описанную выше процедуру дополнения уравнений для амплитуд вблизи границы до объемных уравнений, получим следующие граничные условия:

$$c_{b0} = \ \tilde{c}_{b0}, \quad c_{a0} = \frac{t_1}{t_s}\tilde{c}_{a0}, \ \ \left(t_s^2 - t_1^2\right)\tilde{c}_{b0} = t_1t_2\tilde{c}_{b-1}. \tag{14}$$

Здесь, как и выше, знаком тильда обозначены экстраполированные из объема значения узельных амплитуд. Заметим, что в отличие от поверхностного потенциала, локализованного на узле, поверхностный потенциал, локализованный на связи, не перепутывает узельные амплитуды на различных подрешетках. Поэтому стандартное топологическое ПСС (6), (7) (с нулевой амплитудой на узлах подрешетки b) сохраняется при условии $t_1 < t_2$ (система I на рис. 1). Таким образом, поверхностный потенциал, локализованный на связи, не приводит к нарушению соответствия объем–поверхность.

С учетом (3) и (8), из (14) получим следующее условие существования ПСС, связанного с собственно поверхностным потенциалом:

$$e^\kappa = \frac{t_1^2 - t_s^2}{t_1t_2}. \tag{15}$$

Как следует из (15), декремент отличен от нуля, и ПСС существует только при условии:

$$t_s^2 < t_1(t_1 - t_2). \tag{16}$$

Из (16) немедленно следует, что в топологически нетривиальном материале (вариант I рис. 1, $t_1 < t_2$) ПСС, связанные собственно с поверхностным потенциалом, локализованным на связи, отсутствуют. В топологически тривиальном материале (вариант II рис. 1) соотношение (15) можно записать как

$$e^\kappa = \frac{t_+^2 - t_s^2}{t_+t_-}. \tag{17}$$

При уменьшении величины крайнего интеграла перескока от значения $t_s^2 = t_+(t_+ - t_-)$ (т.е. при увеличении абсолютной величины локализованного на связи поверхностного потенциала $|t_s - t_+\,|$) нетопологические ПСС симметричными парами отщепляются от краев разрешенных зон и смещаются к центру запрещенной зоны. При обращении t_s в нуль крайняя валентная связь (рис. 1b) исчезает, вариант II структуры превращается в вариант I на рис. 1, энергия ПСС совпадает с энергией нулевой моды (6), а условие (17) совпадает с условием существования топологическо-

го ПСС (последнее соотношение в (6)). Заметим, что с химической точки зрения топологическое ПСС в топологически нетривиальном материале со слабой связью, выходящей на поверхность, представляет собой ненасыщенный радикал (поверхностное состояние Шокли) [14, 15]. Поэтому признаком, определяющим значительный вклад топологического фактора в формирование ПСС в нетопологическом материале, может служить существенно меньшая величина поверхностного интеграла перескока t_s по сравнению с t_+. В этом случае на поверхность формально выходят последовательно две ненасыщенные валентные связи, туннельное расщепление которых порождает пару ПСС (17).

Можно показать, что в ситуации, когда присутствуют и узельная компонента поверхностного потенциала, и компонента, связанная с модификацией интеграла перескока, границы областей существования ПСС (11), (12) модифицируются. Так, критическое значение узельной компоненты поверхностного потенциала, выше которого ПСС отсутствуют, в зависимости от величины компоненты поверхностного потенциала, локализованной на связи t_s, может как увеличиваться, так и уменьшаться. Но интервал значений ζ, в котором имеет место "слабое" нарушение соответствия объем–поверхность, в меру t_s увеличивается.

На базе полученных результатов перейдем к рассмотрению модели РМ.

3. Модель РМ. Модель РМ описывает цепочку, альтернированную как по связям, так и по узлам. Узельные амплитуды в объеме определяются исходными уравнениями (1). При этом в уравнениях модели СШХ (4) для фурье-амплитуд узельную энергию ε_0 следует заменить на энергии ε_a и ε_b для подрешеток a и b соответственно. Закон дисперсии в модели РМ имеет вид (2).

Фундаментальное отличие модели РМ от модели СШХ заключается в отсутствии симметрии относительно инверсии координат, а также киральной симметрии. Последнее обстоятельство приводит к тому, что число оборотов не квантуется, поскольку поворот вектора Гамильтониана при прохождении волновым вектором зоны Бриллюэна происходит не в двумерном, а в трехмерном псевдоспиновом пространстве и характеризуется не замкнутой двумерной кривой, а телесным углом. Однако, как показано, например, в [9], и в модели РМ можно ввести топологическую характеристику, аналогичную числу оборотов, если рассмотреть проекцию телесного угла на плоскость $\delta = 0$ в пространстве параметров модели РМ. Таким образом, и в 1D модели РМ существуют топологически тривиальные и топологически нетривиальные фазы в полубесконечной цепочке (роль поперечной дисперсии рассмотрена ниже).

По-прежнему считаем, что $t_1 t_2 > 0$, и экстремумы зон расположены на грани зоны Бриллюэна. Уравнения для узельных амплитуд в k-пространстве в модели РМ следуют непосредственно из (1) и имеют вид (4) с заменой ε_0 на ε_a и ε_b в подрешетках a и b соответственно. Как и в модели СШХ, топологически нетривиальной ситуации отвечает материал, имеющий на границе слабую связь t_-. При этом правая часть второго уравнения в (4) (уравнения для амплитуды в подрешетке b) также может обращаться в нуль при $t_1 = t_-,\ t_2 = t_+$, что требует обращения в нуль левой части вследствие равенства нулю амплитуд в подрешетке b. Таким образом, стандартное (без учета поверхностного потенциала) топологическое ПСС в модели РМ аналогично стандартному топологическому состоянию в модели СШХ (6), но его энергия расположена не в центре запрещенной зоны $\overline{\varepsilon}$ (2), а совпадает с энергией крайнего атома, т.е. с узельной энергией подрешетки a: $\varepsilon = \varepsilon_a$ ($\Delta = |\delta|$ в (2)), что обеспечивает равенство нулю левой части первого уравнения (4) (правая часть пропорциональна нулевой амплитуде в подрешетке b). Декременты для стандартного топологического ПСС в модели СШХ (SSH) и в модели РМ (RM) совпадают:

$$e^{\kappa_{0\mathrm{SSH}}} = e^{\kappa_{0\mathrm{RM}}} = \frac{t_+}{t_-}.$$

Если в модели СШХ максимальная величина декремента, определяемая условием действительности энергии (5), ограничена значением $e^{\kappa_0} = t_+/t_-$, то в модели РМ декремент, как следует из (2) и (5), может принимать существенно большие значения, ограниченные величиной:

$$ch\,(\kappa_c) = \ ch\,(\kappa_0) + \frac{\delta^2}{2t_- t_+}, \tag{18}$$

при которой энергетический уровень ПСС находится строго посередине запрещенной зоны $\varepsilon = \overline{\varepsilon}$ ($\Delta = 0$ в (2)) и происходит смыкание ВВ и НВ закона дисперсии. При этом, если $\varepsilon_a > \varepsilon_b$, то ПСС отвечает ВВ, а если $\varepsilon_a < \varepsilon_b$ – НВ закона дисперсии.

Поверхностный потенциал в модели РМ, как и в модели СШХ, также приводит к нарушению соответствия объем–поверхность. Но поведение энергетического уровня и волновой функции ПСС при изменении ζ в модели РМ существенно отличается от модели СШХ. В модели РМ для поверхностного потенциала, локализованного на узле, остается справедливо граничное условие (9) в модели СШХ, которое в фурье-компонентах можно переписать так:

$$\zeta = t_2 e^{\kappa} \nu(\kappa), \quad \nu(\kappa) = \frac{c_{b\kappa}}{c_{a\kappa}}. \tag{19}$$

Введенная в (19) характеристическая функция $\nu(\kappa)$ определяется объемными уравнениями для амплитуд (4), в которых конкретные значения t_1 и t_2 зависят от выбора элементарной ячейки, и, соответственно, от типа границы. Согласно граничному условию (19) поверхностный потенциал ζ и функция $\nu(\kappa)$ должны иметь одинаковый знак.

Пусть $\varepsilon_a > \varepsilon_b$ ($\delta > 0$ в (2)). В топологически нетривиальном материале I ($t_2 = t_+$ в граничном условии (19)) при $\zeta = 0$ уровень энергии ПСС совпадает с уровнем энергии атома в подрешетке a:

$$\varepsilon_0^{\mathrm{I}} = \varepsilon_a. \tag{20}$$

Верхний индекс I в (20) указывает на то, что мы рассматриваем топологически нетривиальный в отсутствие потенциала ζ материал. Можно показать, что нигде в допустимом интервале изменения декремента параметр $\nu(\kappa)$ в топологическом материале не имеет особенностей. С ростом $\zeta > 0$ уровень энергии ПСС, который описывается ВВ закона дисперсии (2), в соответствии с (19) смещается (выталкивается) вверх и достигает края зоны проводимости ($\kappa = 0$) при значении поверхностного потенциала ζ:

$$\zeta_1^{\mathrm{I}} = t_+ \frac{\sqrt{\delta^2 + \left(t_+ - \tilde{t}_-\right)^2} - \delta}{t_+ - \tilde{t}_-}. \tag{21}$$

В случае $\zeta < 0$ уровень энергии ПСС, который по-прежнему описывается ВВ закона дисперсии (2), смещается вниз и достигает середины запрещенной зоны ($\varepsilon_c^{\mathrm{I}} = \overline{\varepsilon}$) при значении поверхностного потенциала, определяемого соотношением (19) при $\kappa = \kappa_c$ ($\triangle = 0$). В этой точке происходит переход с ВВ на НВ закона дисперсии. При дальнейшем уменьшении ζ декремент уменьшается от своего максимального значения $\kappa = \kappa_c$, и уровень ПСС, отвечающий НВ закона дисперсии смещается вниз. При $\kappa = \kappa_0$ энергия ПСС равна ε_b, а при

$$\zeta_{c2}^{\mathrm{I}} = -t_+ \frac{\sqrt{\delta^2 + \left(t_+ - \tilde{t}_-\right)^2} + \delta}{t_+ - \tilde{t}_-} \tag{22}$$

входит в непрерывный спектр валентной зоны ($\kappa = 0$). Таким образом, критические значения узельной компоненты поверхностного потенциала, при которых происходит "сильное" нарушение соответствия объем–поверхность (21), (22), для компонент поверхностного потенциала имеют разный знак и, в отличие от модели СШХ (11), не равны друг другу по модулю.

В топологически тривиальном материале II ($t_2 = t_-$) функция $\nu(\kappa)$ при $\kappa = \kappa_0$ на НВ закона дисперсии обращается в $\pm\infty$, т.е. ее поведение существенно иное, чем в материале I. Пусть, как и выше, $\varepsilon_a > \varepsilon_b$ ($\delta > 0$). В модели РМ в нетопологическом материале типа II при малых значениях поверхностного потенциала ПСС ζ отсутствуют, и появляются только при конечных значениях ζ. При $\zeta < 0$ для критического значения, обеспечивающего отщепление ПСС от зоны проводимости (при $\kappa = 0$), имеем

$$\zeta_1^{\mathrm{II}} = -\tilde{t}_- \frac{\sqrt{\delta^2 + \left(t_+ - \tilde{t}_-\right)^2} - \delta}{t_+ - \tilde{t}_-}, \tag{23}$$

а от валентной зоны ПСС отщепляется при $\zeta > \zeta_2^{\mathrm{II}}$, где:

$$\zeta_{c2}^{\mathrm{II}} = \tilde{t}_- \frac{\sqrt{\delta^2 + \left(t_+ - \tilde{t}_-\right)^2} + \delta}{t_+ - \tilde{t}_-}. \tag{24}$$

При $\kappa = \kappa_0$ (при $\varepsilon = \varepsilon_b$ на НВ закона дисперсии) ПСС существует только при $\zeta \to \pm\infty$. Таким образом в топологически тривиальном полубесконечном материале абсолютная величина узельного поверхностного потенциала, выше которой существует ПСС (граница "слабого" нарушения соответствия объем—поверхность), также зависит от знака ζ. Заметим, что, как следует из (21), (22) и (23), (24), в области положительных значений ζ при достаточно большой разности энергий подрешеток δ область "слабого" нарушения соответствия объем–поверхность может исчезнуть.

4. Поперечная дисперсия. Для описания поперечной дисперсии необходимо задать трехмерную кристаллическую структуру и набор орбиталей, образующих базис. Модели СШХ и РМ имеют непосредственное отношение соответственно к полупроводникам IV группы со структурой алмаза и соединениям A3B5 со структурой цинковой обманки, описываемым в приближении сильной связи [16–18] с учетом валентных s- и p-орбиталей. Изначально все три орбитали $|X\rangle$, $|Y\rangle$ и $|Z\rangle$ вырождены. Для ПСС с декрементом в направлении [100] гибридизация орбиталей $|S\rangle$ и $|Z\rangle$ имеет конечную величину (и не мала в масштабе интегралов перекрытий), и вырождение орбитали $|Z\rangle$ и орбиталей $|X\rangle$, $|Y\rangle$ снимается. Таким образом, в направлении кристаллографической оси [001] в пренебрежении поперечной дисперсией орбитали $|S\rangle$, $|Z\rangle$ и $|X\rangle$, $|Y\rangle$ расцепляются [18], и, как показано в [19], состояния валентной зоны $|\triangle_{3,4}\rangle = |X\rangle \pm |Y\rangle$ описываются моделью РМ. Модель СШХ, соответственно, получается, если считать узельные энергии ε_a и ε_b равными. Интегралы перескока вы-

ражаются через матричные элементы, связывающие орбитали $|X\rangle$, $|Y\rangle$ атома одной подрешетки, расположенного в центре тетраэдра, с орбиталями $|X\rangle$, $|Y\rangle$ атомов другой подрешетки в вершинах тетраэдра: $t_\pm = V_{xx} \pm V_{xy}$. Соотношение между параметрами $t_{1,2}$ и $t_\pm$ для состояний $|\triangle_3\rangle$ и состояний $|\triangle_4\rangle$ носит обратный характер (с заменой V_{xy} на $-V_{xy}$). Если, например, состояния $|\triangle_3\rangle$ отвечают топологически нетривиальной ситуации, то состояния $|\triangle_4\rangle$, обладающие той же энергией в объеме материала, описывают уже топологически тривиальную конфигурацию орбиталей. Величины матричных элементов V_{xx} и V_{xy} таковы [17], что

$$t_- = -\tilde{t}_- < 0, \tag{25}$$

т.е. $t_1 t_2 < 0$ в (2). Следовательно, экстремумы зон (2) расположены в точке Γ в центре зоны Бриллюэна. Волновой вектор ПСС при этом, в отличие от (3), равен:

$$k = i\kappa. \tag{26}$$

При анализе поперечной дисперсии при малых поперечных векторах $\mathbf{k} = (k_x, k_y)$ (меньших по абсолютной величине, чем декремент ПСС) также можно ограничиться рассмотрением четырех-орбитальной модели с двумя одинаковыми атомами в элементарной ячейке, каждый из которых представлен двумя орбиталями p_x ($|X\rangle$) и p_y ($|Y\rangle$), ориентированными параллельно поверхности, пренебрегая взаимодействием с орбиталями s и z. Аналогичная модель, но для тетрагональной решетки, использовалась при описании кристаллического топологического изолятора в работе Фу [20]. В отличие от [20], мы рассматриваем решетку типа алмаза.

Объемные уравнения для амплитуд записываются аналогично (4), и с учетом поперечной дисперсии и спин-орбитального взаимодействия имеют вид:

$$\begin{aligned} [(\varepsilon - \varepsilon_a)\widehat{\sigma}_0 - \hat{h}_a(\mathbf{p})]\hat{c}_{a\mathbf{p}\kappa} &= \tau(\mathbf{p},\kappa)\,\hat{c}_{b\mathbf{p}\kappa}, \\ \left[(\varepsilon - \varepsilon_b)\,\widehat{\sigma}_0 - \hat{h}_b(\mathbf{p})\right]\hat{c}_{b\mathbf{p}\kappa} &= \tau(\mathbf{p},-\kappa)\,\hat{c}_{a\mathbf{p}\kappa}. \end{aligned} \tag{27}$$

Здесь $\hat{c}_{a,b\mathbf{p}\kappa}$ – спиноры в базисе $\uparrow,\downarrow$; $\tau(\mathbf{p},\pm\kappa) = (t_1(\mathbf{p}) - t_2(\mathbf{p})e^{\pm\kappa})$, где, например, для состояний $|\triangle_4\rangle$ имеем:

$$\begin{aligned} t_1(\mathbf{p}) &= \tilde{t}_-(\mathbf{p}) = (V_{xy} - V_{xx})\,f_1(\mathbf{p}), \\ t_2(\mathbf{p}) &= t_+(\mathbf{p}) = (V_{xy} + V_{xx})\,f_2(\mathbf{p}). \end{aligned} \tag{28}$$

Отличие в знаках в правых частях (4) и (27) связано с тем, что в силу $V_{xy} > V_{xx}$ экстремум в рассматриваемой в данном разделе модели находится не на грани зоны Бриллюэна, как в (3), а в точке Γ (26). Факторы $f_1(\mathbf{p})$ и $f_2(\mathbf{p})$ – комплексные величины:

$$f_1(\mathbf{p}) = \frac{1}{2}(1+e^{-i\frac{1}{2}(k_x+k_y)}),\ f_2(\mathbf{p}) = \frac{1}{2}(e^{-i\frac{1}{2}k_x}+e^{-i\frac{1}{2}k_y}),$$

но их отношение

$$z(\mathbf{p}) = \frac{f_1(\mathbf{p})}{f_2(\mathbf{p})} = \frac{\cos(\frac{k_x+k_y}{4})}{\cos(\frac{k_x-k_y}{4})} \tag{29}$$

есть величина действительная. Уравнения для состояний $|\triangle_3\rangle$ получаются из (28) заменой $V_{xy} \to -V_{xy}$, при этом в формуле (29) для $z(\mathbf{p})$ числитель и знаменатель меняются местами.

Члены $\hat{h}_{a,b}(\mathbf{p})$ описывают внутриподрешеточный вклад неближайших соседей, включая спин-орбитальное взаимодействие. Именно внутриподрешеточное спин-орбитальное взаимодействие отвечает в рассматриваемой модели за характерный для топологических материалов дираковский закон дисперсии ПСС [9]. При малых значениях поперечного квазиимпульса, т.е. когда справедливо "расцепление" состояний $|\triangle_{3,4}\rangle$ и $|S\rangle$, $|Z\rangle$, независящий от спина вклад вторых соседей, следующих за ближайшими, можно считать константой и включить в $\varepsilon_{a,b}$. Если в системе присутствуют полярные искажения, вызванные, например, внешним электрическим полем в направлении нормали к поверхности, или же расстояния между подрешетками в направлении [001] внутри элементарной ячейки и между ячейками не равны вследствие тетрагональных искажений решетки, а также если действуют оба эти фактора, плоскость подрешетки, перпендикулярная направлению [100], утрачивает зеркальную симметрию, и возникает спин-орбитальное взаимодействие Рашбы:

$$\hat{h}_{a,b} = \lambda_{Ra,b}\mathbf{n}\cdot\sigma\times\sigma = \lambda_{Ra,b}p\begin{pmatrix} 0 & e^{-i\varphi} \\ e^{i\varphi} & 0 \end{pmatrix}. \tag{30}$$

Здесь $\mathbf{n}$ – единичный вектор в направлении [001], выбранном за ось z, $p = |\mathbf{p}|$, $\tan\varphi = k_y/k_x$. Из (27) можно получить выражение для закона дисперсии, обобщающее (2) для задачи со спином, которое содержит четыре ветви:

$$\varepsilon = \overline{\varepsilon} \pm \lambda_+ \pm \sqrt{[\delta \pm \lambda_-]^2 + \Delta^2(p,\kappa)}. \tag{31}$$

Здесь $\lambda_\pm = (\lambda_{Ra} \pm \lambda_{Rb})\,p/2$, $\Delta(p,\kappa)$ – параметр $\Delta(k)$ (2), в котором учтены соотношение (26) и зависимость интегралов перескока от поперечного импульса (28), знаки + и – перед квадратным корнем отве-

чают, соответственно, ВВ и НВ закона дисперсии. Заметим, что, если $\lambda_{Ra} = -\lambda_{Rb}$, как это было принято в работе [9], в законе дисперсии сохраняются параболические минимумы. Для того, чтобы применить использованную выше методику получения граничных условий, трансформируем уравнения (27), выполнив унитарное преобразование спинорных амплитуд:

$$\begin{pmatrix} c_{a,b}^{(+)} \\ c_{a,b}^{(-)} \end{pmatrix} = \hat{U} \begin{pmatrix} c_{a,b\uparrow} \\ c_{a,b\downarrow} \end{pmatrix}, \; \hat{U} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ e^{-i\varphi} & -e^{-i\varphi} \end{pmatrix}. \tag{32}$$

В результате этого преобразования система четырех связанных уравнений (27) разбивается на две пары несвязанных уравнений:

$$\begin{aligned} [(\varepsilon - \varepsilon_a) \mp \lambda_{Ra} p]\, c_a^{(\pm)} &= \tau\,(\mathbf{p}, \kappa)\, c_b^{(\pm)}, \\ [(\varepsilon - \varepsilon_b) \mp \lambda_{Rb} p]\, c_b^{(\pm)} &= \tau\,(\mathbf{p}, -\kappa)\, c_a^{(\pm)}, \end{aligned} \tag{33}$$

имеющих вид уравнений стандартной бесспиновой модели РМ (1) в импульсном представлении и с переопределенными коэффициентами. Верхний и нижний знаки перед спин-орбитальными членами в (33) соответствуют таковым в законе дисперсии (31). При фиксированном знаке перед спин-орбитальными членами из (33) получаем ВВ и НВ закона дисперсии (31).

Нетрудно видеть, что уравнения для фурье-амплитуд $c_{a,b}^{(\pm)}$ (32), (33), аналогичные соотношениям (4), можно переписать в виде уравнений в узельном представлении, аналогичным (1), для которых может быть применена использованная выше методика описания ПСС на базе граничных условий, полученных в узельном представлении (9), (14).

Исследуем влияние поперечной дисперсии на условие образования ПСС при наличии поверхностного потенциала, действующего одинаковым образом на все атомы граничного слоя. Заметим, что нетривиальные примеры топологических состояний в трехмерных нетопологических материалах, генерируемых дислокациями и дефектами упаковки, рассмотрены в работах [21, 22], а влияние точечных дефектов и одномерных дефектов (доменных стенок) на ПСС в ТИ также исследовалось в [23] и [24] соответственно. Граничное условие в случае потенциала, локализованного на граничных атомах, имеет в точности вид (19) с заменой $c_{a,b\kappa} \to c_{a,b\kappa}^{(\pm)}$ и $\nu\,(\kappa) \to \nu^{(\pm)}(\kappa)$, $t_2 \to t_2\,(\mathbf{p})$, где знаки $\pm$ относятся к амплитудам, определяемым системой уравнений (33). Спин-орбитальное взаимодействие не фигурирует непосредственно в соотношении для граничного условия, но присутствует в выражении для $\nu^{(\pm)}(\kappa)$, которое определяется объемными уравнениями (33).

В отсутствие поверхностного потенциала из граничного условия (9) непосредственно следует, что узельные амплитуды в подрешетке b равны нулю. Данное условие требует обращения в нуль выражения в правой части второго уравнения в (33), что, в свою очередь, дает дисперсионное уравнение для зависящего от поперечной дисперсии декремента ПСС:

$$e^{-\kappa} = z(\mathbf{p}) \frac{V_{xy} - V_{xx}}{V_{xy} + V_{xx}}, \tag{34}$$

обобщающее соотношение (6). Здесь $z\,(\mathbf{p})$ определено в (29) и $z\,(\mathbf{p} = 0) = 1$. При этом в отсутствие спин-орбитального взаимодействия даже при наличии поперечной дисперсии энергия ПСС не зависит от поперечного квазиимпульса. В модели СШХ энергия ПСС равна ε_0, а в модели РМ – равна ε_a. Декремент ПСС при учете поперечной дисперсии становится функцией поперечного квазиимпульса: $\kappa = \kappa\,(\mathbf{p})$. В области малых значений поперечного квазиимпульса, где наше рассмотрение (пренебрежение взаимодействием с $\mid S\rangle$ и $\mid Z\rangle$ орбиталями) имеет непосредственное отношение к реальным полупроводникам со структурой алмаза и цинковой обманки, фактор $z\,(\mathbf{p})$ слабо зависит от $\mathbf{p}$ и его можно считать равным единице. Однако если аналогично [20, 25] формально рассмотреть поперечный закон дисперсии для нашей модели во всей зоне Бриллюэна, то отличный от нуля декремент для состояний (31) существует, только если

$$0 < z\,(\mathbf{p}) < z_c = \frac{V_{xx} + V_{xy}}{V_{xx} - V_{xy}}. \tag{35}$$

При $z\,(\mathbf{p}) = z_c$ декремент ПСС обращается в нуль.

Нетривиальный эффект в рассматриваемой модели, обусловленный поперечной дисперсией, связан с появлением ПСС в материале, который в отсутствие поперечной дисперсии описывается топологически тривиальной моделью, при выполнении условия (см. рис. 2):

$$z\,(\mathbf{p}) > z_c. \tag{36}$$

Однако важно, что формулировка условия топологичности на языке числа оборотов вокруг начала координат вектора на комплексной плоскости, составленного из компонент обобщенного комплексного интеграла перескока $\tau\,(\mathbf{p}, k) = t_1\,(\mathbf{p}) - t_2(\mathbf{p}) e^{ik}$, также должна быть модифицирована с учетом поперечной дисперсии. В результате оказывается, что условие (36) есть ничто иное, как условие ненулевого числа оборотов такого вектора, достигаемое только при конечном p. Таким образом, условие топологичности зависит от поперечной дисперсии. Аналогичный вывод содержится в работе [9], где была рассмотрена

введенная в работе [25] для описания топологических состояний модель сильной связи для $|S\rangle$ орбиталей в решетке типа алмаза и цинковой обманки с направлением нормали к поверхности [1,1,1]. Однако, следует заметить, что обобщенный интеграл перескока в (33) $\tau(\mathbf{p}, k)$ для действительного k в пространстве волновых векторов может обращаться в нуль только в двух точках k: 0 и π. Таким образом, непрерывные "вихревые линии" $\tau(\mathbf{p}, k) = 0$ в пространстве волновых векторов, использованные в работе [9] для интерпретации условий образования топологических ПСС в трехмерных системах, с учетом данного обстоятельства отсутствуют.

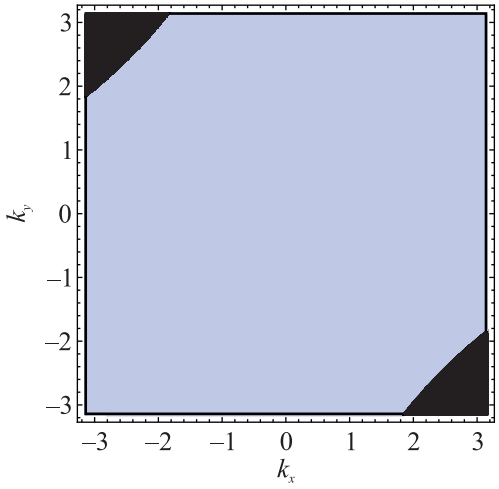

Рис. 2. (Цветной онлайн) Области существования нетопологических и топологических ПСС в нашей модели. Топологически тривиальным ПСС соответствует серая (светлая) область. Топологически нетривиальным ПСС – черная (темная) область. По осям отложены k_x и k_y (зона Бриллюэна), $z_c = 3$

Отличительным признаком топологического материала служит дираковский конус на поверхности материала, за образование которого отвечает спин-орбитальное взаимодействие. Рассмотрим модель СШХ ($\varepsilon_a = \varepsilon_b = \varepsilon_0$ и $\delta = 0$) с поперечной дисперсией и без поверхностного потенциала. Заметим, что спин-орбитальные члены $\lambda_{Ra,b}p$ входят в уравнения модели в виде, аналогичном узельным энергиям $\varepsilon_{a,b}$ в модели РМ, которые и определяют уровень ПСС в модели РМ. Уровень ПСС при этом в зависимости от соотношения λ_{Ra} и λ_{Rb} с учетом их знаков в (33), определяется либо ВВ, либо НВ закона дисперсии (33). В результате получаем для поперечного закона дисперсии в модели СШХ ожидаемое [9] выражение в виде конуса Дирака:

$$\varepsilon = \varepsilon_0 \pm \lambda_{Ra}p. \tag{37}$$

Здесь разные знаки $\pm$ (т.е. ВВ и НВ поверхностного закона дисперсии (37)) соответствуют верхним (спиновым) индексам системы (33). В случае наличия поверхностного потенциала задача усложняется из-за необходимости учитывать зависимость декремента от поперечного импульса $\mathbf{p}$. Рассмотрим узельную компоненту поверхностного потенциала, которая, как и выше в (8), вводится в уравнения (33) сдвигом $\varepsilon \to \varepsilon + \zeta$. Зависимость декремента от $\mathbf{p}$ определяется граничным условием (19), в котором функция $\nu(\kappa, \mathbf{p})$ зависит уже не только от декремента, но и от поперечного импульса $\mathbf{p}$, и находится из уравнений (33). Для идентификации наличия дираковского конуса достаточно считать спин-орбитальный вклад $\lambda_{Ra,b}p$ в закон дисперсии самым малым параметром модели и пренебрегать квадратичными по p поправками. Поэтому ниже будем считать $t_{1,2}(\mathbf{p}) \approx \approx t_{1,2}(0) = t_{1,2}$.

Рассмотрим сначала топологический материал I. Без учета поперечной дисперсии и спин-орбитального взаимодействия сдвиг уровня ПСС в меру слабого поверхностного потенциала описывается соотношением (10). Для декремента примем $\kappa \approx \kappa_0 + \kappa_1$, где κ_0 равно декременту нулевой моды модели СШХ (6) и обеспечивает равенство нулю подкоренного выражения в (5), (33) при $p = 0$, а κ_1 – малая добавка (ζ и $\lambda_{Ra,b}p$ считаем малыми). Для κ_1 из граничного условия (19) с функцией $\nu(\kappa, \mathbf{p})$, найденной из уравнений (33), получим:

$$\kappa_1 \approx \zeta^2 \frac{t_+^2 - t_-^2}{t_+^4} \pm 2\delta_\lambda(p)\frac{\zeta}{t_+^2}, \tag{38}$$

где знаки $\pm$ соответствуют верхнему индексу в системе уравнений (33). С учетом (35) для энергии имеем:

$$\varepsilon = \varepsilon_{\mathrm{I}} \pm \lambda_{Ra}p, \tag{39}$$

где ε_{I} – уровень ПСС (10) при наличии поверхностного потенциала в отсутствие поперечной дисперсии. Результат (39) нетривиален потому, что, несмотря на ненулевую амплитуду ПСС в обеих подрешетках при наличии поверхностного потенциала ζ (8), дираковский конус определяется по-прежнему, как и в отсутствие ζ (6), (34), только спин-орбитальным взаимодействием в подрешетке a поверхностных атомов (в приближении малых ζ и $\lambda_{Ra,b}p$). Таким образом, поверхностный потенциал в топологическом материале сдвигает по направлению к одной из разрешенных зон не только уровень ПСС (9), но и связанный с ним дираковский конус поперечного закона дисперсии.

В нетопологическом материале II поверхностный потенциал, формирующий ПСС, уже нельзя считать

малым параметром, но малостью, аналогично ситуации при выводе соотношения (12), обладает величина декремента затухания κ при значении поверхностного потенциала вблизи своей критической величины $|\zeta| \approx t_-$. Для декремента можно получить:

$$\kappa \approx \frac{1}{t_+}\left(\pm\frac{1}{2}\left(\lambda_{Ra}-\lambda_{Rb}\right)p+\zeta'\frac{t_+-t_-}{t_+\tilde{t}_-}\right). \qquad (40)$$

Как и выше, считаем спин-орбитальное взаимодействие самым малым параметром. Поскольку при малой величине декремента энергия зависит от его квадрата, вклад спин-орбитального взаимодействия в величину (40) при вычислении энергии будет превышением точности. Для энергии в пределе малого значения поперечного импульса получаем:

$$\varepsilon \approx \varepsilon_{\mathrm{II}} \pm \frac{1}{2}\left(\lambda_{Ra}+\lambda_{Rb}\right)p, \qquad (41)$$

где $\varepsilon_{\mathrm{II}}$ – выражение для энергии ПСС вблизи порогового значения величины поверхностного потенциала (12). Знаки $\pm$, как и в случае топологически нетривиального материала I (38), (39), относятся к верхним индексам в системе (33). Таким образом, в топологически тривиальном материале поперечный закон дисперсии ПСС также имеет вид дираковского конуса. Но качественное различие законов дисперсии (39) и (41) состоит в том, что в топологически нетривиальном материале параметры поперечного закона дисперсии ПСС при наличии поверхностного потенциала (39) остаются такими же, как и в его отсутствие (37). Эти параметры определяются спин-орбитальным взаимодействием только в подрешетке, атомы которой выходят на поверхность, несмотря на ненулевую узельную амплитуду на атомах другой подрешетки. Вклад подрешетки b в поперечную дисперсию, разумеется, присутствует, но в следующих порядках малости по параметрам ζ и $\lambda_{Ra,b}p$. В топологически тривиальном материале, где ПСС возникает только при наличии поверхностного потенциала, параметры дираковского конуса сразу же определяются обеими подрешетками. При этом, например, при $\lambda_{Ra} = -\lambda_{Rb}$, дираковский конус в законе дисперсии ПСС отсутствует.

5. Заключение. В настоящей работе на примере моделей СШХ и РМ мы исследовали влияние поверхностного потенциала на топологические состояния. Одно из ключевых понятий современной физики ТИ – соответствие объем–граница – связывает существование ПСС с объемными свойствами материала. Однако, поверхность представляет собой сильное возмущение кристаллического потенциала, которое, как хорошо известно, может само по себе приводить к образованию ПСС [26] (таммовские ПСС). Кроме того, в реальных материалах поверхность, как правило, подвержена релаксации и реконструкции, т.е. свойства приповерхностной области отличаются от объема. Поэтому возникает необходимость уточнения границ применимости и степени универсальности соответствия объем–граница, тем более, что ряд экспериментов [12, 13, 26] показывают сохранение ПСС и связанного с ними краевого транспорта при переходе от топологически нетривиальных к топологически тривиальным структурам. Как мы показали в настоящем Письме, поверхностный потенциал может как формировать ПСС в топологически тривиальных материалах, что вполне соответствует общим представлениям о природе таммовских ПСС, так и полностью разрушать топологические ПСС. При этом в топологически нетривиальном материале уже слабый поверхностный потенциал нарушает условие обращения в нуль амплитуды ПСС на атомах одной из подрешеток (неграничной). Фактически наши результаты указывают на необходимость учета при описании ПСС, помимо объемных характеристик (число оборотов) также и граничных условий, что остается, безусловно, справедливым и в континуальном приближении. Заметим, что данное обстоятельство подчеркивалось в работе [27], где был приведен контрпример топологического ПСС в Z_2 тривиальном полубесконечном кристалле.

Более неожиданным оказался результат рассмотрения модельной задачи о характере поперечной дисперсии ПСС ($p \neq 0$). Как мы показали, особенности поперечной дисперсии, присущие топологически нетривиальной фазе, а именно, зависимость поперечной дисперсии от параметров только граничной подрешетки, сохраняются и в случае отличного от нуля поверхностного потенциала, перепутывающего состояния на различных подрешетках. При этом поперечная дисперсия существенно влияет на условия формирования ПСС, модифицируя эффективное число оборотов. В результате ПСС в топологически нетривиальном материале (без учета поперечной дисперсии) существует только в ограниченной части 2D зоны Бриллюэна аналогично тому, как это имеет место при описании ПСС в дираковской модели [28] и, в известном смысле, в вейлевский полуметаллах [29, 30]. С другой стороны, в 2D зоне Бриллюэна появляется область, где ПСС существует в топологически тривиальном (без учета поперечной дисперсии) материале.

Вопрос о применимости полученных результатов к реальным материалам потребует выхода за рамки модельного рассмотрения и более корректного описа-

ния эффектов релаксации и реконструкции поверхности на базе *ab initio* вычислений. Наши результаты могут найти применение в молекулярной электронике, где в настоящее время активно обсуждаются перспективы создания проводников на базе топологически нетривиальных молекулярных структур [31, 32].

Финансирование работы. Работа выполнена при частичной поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации, проект # 075-03-2025-266.

Конфликт интересов. Авторы данной работы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

1. Ch. Nayak, S. H. Simon, A. Stern, and M. Freedman, "Non-Abelian anyons and topological quantum computation", Rev. Mod. Phys. **80**, 1084 (2008).
2. X.-L. Qi and Sh.-Ch. Zhang, "Topological insulators and superconductors", Rev. Mod. Phys. **83**, 1058 (2011).
3. T. Zhang, Y. Jiang, Zh. Song, H. Huang, Y. He, Zh. Fang, H. Weng, and Ch. Fang, "Catalogue of topological electronic materials", Nature **566**,475 (2019).
4. B. J. Wieder, B. Bradlyn, J. Cano, Zh. Wang, M. G., L. Elcoro, A. A. Sohiyanov, C. Felser, T. Neupert, and N. Regnault, "Topological materials discovery from crystal symmetry", Nat. Rev. Mater. **7**, 196 (2022).
5. K.-H. Jin, W. Jiang, S. Gurjyot, and F. Liu, "Topological quantum devices: a review", Nanoscale **15**(31), 12787 (2023).
6. M. Z. Hasan and C. L. Kane, "Colloquium: Topological insulators", Rev. Mod. Phys. **82**, 7585 (2010).
7. J. K. Asboth, L. Oroszlany, and A. Palyi, *A Short Course on Topological Insulators, Lecture Notes in Physics* (Springer, Budapest, 2016), v. 119.
8. A. J. Heeger, S. Kivelson, J. R. Schrieffer, and W.-P. Su, "Solitons in conducting polymers", Rev. Mod. Phys. **60**, 782 (1988).
9. S. S. Pershoguba and V. M. Yakovenko, "Shockley model description of surface states in topological insulators", Phys. Rev. B **86**, 075304 (2012).
10. M. J. Rice and E. J. Mele, "Elementary Excitations of a linearly Conjugated Diatomic Polymer", Phys. Rev. Lett. **49**, 1455 (1982).
11. E. Y. Ma, M. R. Calvo, J. Wang et al. (Collaboration), "Unexpected edge conduction in mercury telluride quantum wells under broken time-reversal symmetry", Nat. Commun. **6**, 7252 (2015).
12. L. Du, I. Knez, G. Sullivan, and R.-R. Du, "Robust Helical Edge Transport in Gated InAs/GaSb Bilayers", Phys. Rev. Lett. **114**, 096802 (2015).
13. F. Nichele, H. J. Suominen, M. Kjaergaard et al. (Collaboration), "Edge transport in the trivial phase of InAs/GaSb", New J. Phys. **18**, 083005 (2016).
14. W. Shockley, "On the Surface States Associated with a Periodic Potential", Phys. Rev. **56**, 317 (1939).
15. J. Koutecky, "An interpretation of the conditions for the existence of Shockley surface states", Czech. J. Phys. B **11**, 565 (1961).
16. D. J. Chadi and M. L. Cohen, "Tight-Binding Calculations of the Valence Bands of Diamond and Zincblende Crystals", Phys. Stat. Sol. (b) **68**, 405 (1975).
17. P. Vogl, "A semi-empirical tight-binding theory of the electronic structure of semiconductors", J. Phys. Chem. Solids **44**(5), 365 (1975).
18. P. Y. Yu and M. Cardona, *Fundamentals of Semiconductors: Physics and Materials Properties* (Springer, Heidelberg Dordrecht London N.Y., 2010).
19. A. A. Gorbatsevich and I. V. Tokatly, "Interfacial electronic states in semiconductor heterostructures", JETP Lett. **67**, 416 (1998).
20. L. Fu, "Topological Crystalline Insulators", Phys. Rev. Lett. **106**, 106802 (2011).
21. T. I. Tuegel, V. Chua, and T. L. Hughes, "Embedded Topological Insulators", Phys. Rev. B **100**, 115126 (2019).
22. S. Velury and T. L. Hughes, "Embedded topological semimetals", Phys. Rev. B **105**, 184105 (2022).
23. В. Н. Меньшов, Е. В. Чулков, "Связанные состояния короткодействующего дефекта на поверхности собственного антиферромагнитного топологического изолятора в неколлинеарной фазе", Письма в ЖЭТФ **118**(11), 836 (2023) [V. N. Men'shov and E. V. Chulkov, "Bound States of a Short-Range Defect on the Surface of an Intrinsic Antiferromagnetic Topological Insulator in a Noncollinear Phase", JETP Lett. **118**(11), 837 (2023)].
24. В. Н. Меньшов, И. П. Русинов, Е. В. Чулков, "Особенности поверхностных состояний собственного антиферромагнитного топологического изолятора с неколлинеарной текстурой доменных стенок", Письма в ЖЭТФ **114**(11), 768 (2021) [V. N. Men'shov, I. P. Rusinov, and E. V. Chulkov, "Features of Surface States of an Intrinsic Antiferromagnetic Topological Insulator with a Noncollinear Texture of Domain Walls", JETP Lett. **114**(11), 699 (2021)].
25. Ch. Fu, C. L. Kane, and E. J. Mele, "Topological insulators in three dimentions", Phys. Rev. Lett. **98**, 106803 (2021).
26. S. G. Davison and M. Steshcka, *Basic theory of surface state* (Clarendon Press, Oxford, 1992).
27. С. Н. Молотков, М. И. Рыжкин, "Простой контрпример для Z_2-классификации топологических изоляторов, основанной на соответствии объем–граница", Письма в ЖЭТФ **102**(3), 216 (2015) [S. N. Molotkov and M. I. Ryzhkin, "Simple counterexample for the Z_2 classification of topological insulators based on the bulk-boundary correspondence", JETP Lett. **102**(3), 216 (2015)].

28. O. Shtanko and L. Levitov, "Robustness and universality of surface states in Dirac materials", Proceedings of the National Academy of Sciences **115**(23), 5908 (2018).
29. X. Wan, A. M. Turner, A. Vishwanath, and S. Y. Savrasov, "Topological semimetal and Fermi-arc surface states in the electronic structure of pyrochlore iridates", Phys. Rev. B. **83**, 205101 (2011).
30. A. A. Burkov, "Chiral anomaly and transport in Weyl metals", J. Phys.: Condens. Matter **27**, 113201 (2015).
31. L. Li, J. Low, J. Wilhelm, G. Liao, S. Gunasekaran, C. Prindle, R. Starr, D. Golze, C. Nuckolls, M. Steigerwald, F. Evers, L. Campos, X. Yin, and L. Venkataraman, "Highly Conducting Single-Molecule Topological Insulators Based on Mono- and Di-Radical Cations", Nat. Chem. **14**, 1061 (2022).
32. L. Li, Sh. Louie, A. M. Evans, E. Meirzadeh, C. Nuckolls, and L. Venkataraman, "Topological Radical Pairs Produce Ultrahigh Conductance in Long Molecular Wires", J. Am. Chem. Soc. **145**, 2492 (2023).