

# ПОВЕРХНОСТНЫЕ СОСТОЯНИЯ СИСТЕМЫ ДИРАКОВСКИХ ФЕРМИОНОВ: МИНИМАЛЬНАЯ МОДЕЛЬ

*В. А. Волков\**, *В. В. Еналдиев*

*Институт радиотехники и электроники им. В. А. Котельникова Российской академии наук  
125009, Москва, Россия*

Поступила в редакцию 16 ноября 2015 г.

Приведен краткий обзор теоретических работ по поверхностным состояниям в дираковских материалах. В рамках формализма огибающих волновых функций и граничных условий для них сформулирована минимальная модель, аналитически описывающая поверхностные и краевые состояния разного типа, топологического и нетопологического, в нескольких системах с дираковскими фермионами. Обсуждены условия ее применимости.

*Статья для специального выпуска ЖЭТФ, посвященного 85-летию Л. В. Келдыша*

DOI: 10.7868/S0044451016030202

## 1. МЕТОД ОГИБАЮЩИХ ФУНКЦИЙ. ВВЕДЕНИЕ В ИСТОРИЮ ВОПРОСА

К середине XX века появилась необходимость объяснять и предсказывать электронные свойства полупроводников во внешних полях. Были созданы различные варианты однозонного метода эффективной массы. Очень удобным оказался метод огибающих функций Кона–Латтинжера [1], основанный на обобщении  $k$ - $p$ -подхода. Формализм огибающих функций (ОФ) допускал естественное многозонное обобщение. Такое обобщение сделано Л. В. Келдышем в его теории глубоких примесей [2]. В этой работе было также замечено, что при определенных условиях ОФ в узкощелевом полупроводнике подчиняются эффективному уравнению Дирака (системе четырех дифференциальных уравнений первого порядка). Интересно, что для полупроводников III–V это реализуется при инверсии знака сильного спин-орбитального расщепления валентной зоны. К идее инверсии зон в кристаллах с сильным спин-орбитальным взаимодействием мы еще вернемся. В том же году было показано [3], что спектр электронов и дырок в висмуте вблизи L-точек зоны Бриллюэна должен описываться анизотропным гамилтонианом Дирака.

\* E-mail: volkov.v.a@gmail.com

Висмут, согласно современной терминологии, можно считать дираковским материалом, причем первым дираковским материалом. В их число входят графен, сплавы висмут–сурьма, халькогениды свинца, 2D и 3D топологические изоляторы, полуметаллы Дирака, полуметаллы Вейля и ряд других. Одночастичные возбуждения в них называются безмассовыми (для бесщелевых материалов) или массивными дираковскими фермионами (ДФ).

Энергетический спектр  $E(p)$  свободных ДФ в трехмерном изотропном случае имеет вид, аналогичный спектру релятивистского электрона:

$$E = \pm \sqrt{m^2 c^4 + p^2 c^2}. \quad (1)$$

Здесь  $m$  — эффективная масса электрона, которая обычно на 1–2 порядка меньше массы свободного электрона в вакууме,  $c$  — эффективная скорость света в вакууме, поэтому реальные фермиевские возбуждения на самом деле являются нерелятивистскими. Однако релятивистские поправки, обусловленные спин-орбитальным взаимодействием, могут быть относительно немалыми в кристаллах с близкими зонами, что способствует образованию ДФ. Конечная масса в спектре релятивистских частиц отвечает конечной ширине запрещенной зоны в соответствии со знаменитой формулой  $E_g = 2mc^2$ .

В 1960-е гг. появилась физика 2D электронных систем. Для перехода 3D  $\rightarrow$  2D стали использовать эффект размерного квантования. Обычная тео-

рия этого эффекта использует однозонное приближение эффективной массы с нулевыми граничными условиями для ОФ. Физически это оправдывается непроницаемостью потенциальных барьеров на поверхностях (интерфейсах), ограничивающих область движения электрона. И это приближение неплохо работает в кристаллах с параболическим зонным спектром, например, для электронов в кремнии. Однако ситуация качественно изменяется при попытке корректно описать размерное квантование в системе ДФ.

Возможность реализации эффекта размерного квантования была предсказана [4] в 1962 г. для пленок, изготовленных из узкощелевых полупроводников и родственных им полуметаллов с малой концентрацией носителей. Экспериментальное открытие этого эффекта [5, 6] и его объяснение [7] состоялось через несколько лет именно при исследовании пленок висмута.

Строго говоря, огибающие волновые функции сильно отличаются от настоящих волновых функций электрона в кристалле: первые являются огибающими вторых. Но для качественных рассуждений это обстоятельство на первых порах не было принципиальным. Однако с развитием эксперимента встал вопрос о количественном описании результатов. Неожиданно проблема оказалась очень непростой. Академический, казалось бы, вопрос о простейших граничных условиях для эффективных волновых функций на поверхности узкощелевого материала типа висмута с неизбежностью повлек за собой проблему описания и поверхностных состояний. Оказалось, что простейшие и физически очевидные граничные условия — нулевые граничные условия для всех четырех огибающих в уравнении Дирака — приводят к тривиальному решению (нуль всюду) из-за переопределенности задачи. Так появилась теоретическая проблема вывода корректных граничных условий для метода огибающих функций, особенно актуальная в его многозонном варианте. Важно, что такие граничные условия должны описывать, кроме спектра объемных, и спектр поверхностных состояний (ПС).

Дело в том, что на реальной поверхности любого кристалла, в том числе дираковского, всегда существуют электронные или дырочные ПС, несобственные и/или собственные. Первые обусловлены дефектами и загрязнением поверхности, вторые (только их мы и будем рассматривать) существуют и на идеальной поверхности. Собственные ПС были теоретически рассмотрены на заре зонной теории в разных моделях [8–12]. Работы И. Е. Тамма были пер-

выми, поэтому указанные ПС называют таммовскими. У. Шокли рассмотрел другую популярную модель, и полученные им ПС часто называют шоклиевскими. Однако между таммовскими и шоклиевскими ПС нет принципиальной разницы. Более того, в простейших моделях они переходят друг в друга при изменении параметров модели [12], что может привести к путанице. Поэтому будем называть собственные ПС состояниями Тамма–Шокли, помня, что оба типа ПС обусловлены резким (на атомных масштабах) обрывом кристаллического потенциала на поверхности.

Состояния Тамма–Шокли не только расположены (полностью или частично) в запрещенной зоне объемного кристалла. Очень важно, что они должны формировать поверхностную зону проводящих состояний, делокализованных в плоскости поверхности и обладающих 2D законом дисперсии. Но собственные ПС весьма чувствительны к шероховатостям и загрязнениям поверхности. Поэтому неудивительно, что прошло много лет, прежде чем состояния Тамма–Шокли были надежно обнаружены на опыте. Как правило, они исследуются в сверхвысоком вакууме, обычно зондовыми методиками (STM, ARPES и т. д.). Проблема существования зоны ПС в нормальных условиях требует особого исследования. Так, не вполне ясно, насколько жесткие требования к совершенству поверхности или интерфейса должны предъявляться и от чего это зависит.

В обычных полупроводниках (широкие запрещенные зоны, малое спин-орбитальное взаимодействие) зона состояний Тамма–Шокли возникает далеко не всегда, а их волновые функции обычно не перемешиваются с волновыми функциями размерноквантованных состояний. Сами условия их существования сильно зависят от строения поверхности или границы раздела на атомных масштабах, и поэтому общие закономерности их поведения исследованы, несмотря на 80-летнюю историю вопроса, довольно фрагментарно, особенно экспериментально. Ситуация стала изменяться в последние годы, с появлением топологических материалов, описываемых модифицированным уравнением Дирака. Теория топологических изоляторов предсказывает, что в них по топологическим причинам должны существовать «топологические» ПС, защищенные от рассеяния назад. Сам факт их существования не зависит от деталей строения поверхностной области.

Возникает более общий вопрос: смягчаются ли требования к совершенству поверхности (интерфейса) для проявлений ПС на поверхности любого дираковского кристалла, не обязательно топологичес-

кого изолятора? Теоретический ответ в простейшей дираковской модели [13] положителен. Тем не менее, спектр ПС для дираковских материалов зависит, как и ожидалось для состояний Тамма – Шокли, от свойств поверхности, хотя и не вполне очевидным образом.

Для решения этой проблемы пришлось вывести граничные условия общего вида, инвариантные к обращению времени и описывающие ДФ вблизи непроницаемой стенки. В результате решения настоящего (а не модифицированного, как позже будет сделано в теории топологических изоляторов) уравнения Дирака на полупространстве с этими граничными условиями оказалось, что ПС должны появляться на любой поверхности (точнее, для любых параметров граничных условий) и быть предельно сильно расщепленными по спину в результате спин-орбитального взаимодействия с поверхностью (это взаимодействие часто называют взаимодействием Рашбы). Эти ПС имеют конический закон дисперсии, но существуют не при всех импульсах. «Сила» поверхностного спин-орбитального взаимодействия параметризуется величиной вещественного феноменологического параметра  $a_0$ , входящего в граничные условия. В зависимости от знака  $a_0$  существуют два класса поверхностей. Для поверхностей одного из классов коническая («дираковская») точка в спектре находится в запрещенной зоне объемного материала, т. е. ПС в этом случае обладают 2D спектром невырожденных по спину безмассовых ДФ, как в топологическом изоляторе. Физический смысл знака  $a_0$  оставался неясным.

В 1985 г. в знаменитой работе [14] рассмотрена другая дираковская модель — модель инверсного гетероконтакта. Она описывается уравнением Дирака, масса ДФ в котором плавно (на атомных масштабах) и симметрично по отношению к преобразованию электрон–дырка ( $e-h$ ) изменяется в пространстве. Интерфейс определяется положением плоскости, на которой происходит инверсия знака массы (зоны проводимости и валентная зона меняются местами). Именно в этом случае образуется зона однократно вырожденных гетероинтерфейсных состояний, обладающих коническим 2D спектром безмассовых ДФ. Замечательно, что этот вывод не зависит от деталей интерфейсного потенциала, необходима лишь инверсия зон. Дело в том, что в указанном режиме уравнение для ДФ в инверсном контакте приобретает вид, характерный для суперсимметричной квантовой механики с нулевой модой, соответствующей интерфейсным состояниям. Этот нетривиальный результат активно используется в совре-

менной физике топологических изоляторов. Дираковская точка в этой симметричной модели находится точно в центре щели.

Причина некоторого рассогласования между результатами работ [14] и [13] и физический смысл знака  $a_0$  были прояснены в обзоре [15]. В модель резкого гетероконтакта (но по-прежнему плавного на атомных масштабах) была введена существенная  $e-h$ -асимметрия. При увеличении последней дираковская точка все больше смещалась из центра щели и пропадала. При большом разрыве зон на гетеропереходе спектр интерфейсных состояний полностью соответствовал спектру ПС из работы [13]. Из сравнения результатов получено модельное выражение для граничного параметра  $a_0$ . Знак этого параметра коррелировал, вообще говоря, с инверсией знака щели на интерфейсе.

К сожалению, зачаточное состояние технологии получения образцов не дало возможности проверить эти выводы на опыте 30–20 лет назад. Работы [13–15] приобрели актуальность в связи с открытием топологических изоляторов, а также в связи с недавним обнаружением проводящих краевых состояний нетопологического типа в наноперфорированном графене [16, 17].

В данной работе обсуждены затронутые выше проблемы и в рамках формализма ОФ сформулирована минимальная модель, аналитически описывающая ПС разного типа, топологического и нетопологического, в ряде дираковских материалов. Статья организована следующим образом. В разд. 2 дан краткий обзор работ по ПС типа Тамма – Шокли в рамках формализма ОФ. В разд. 3 рассмотрены топологические ПС, а в разд. 4 — краевые состояния Тамма – Шокли в графене. В разд. 5 сформулированы выводы.

## 2. ПОВЕРХНОСТНЫЕ СОСТОЯНИЯ ТИПА ТАММА – ШОКЛИ

Для описания поведения электронов в многослойных полупроводниковых структурах широко используется метод эффективных волновых функций — огибающих функций. Метод ОФ применим для описания только плавных (на атомарных масштабах) полей и не годится для реального случая атомарно резких границ раздела. Информацию о микроскопическом строении интерфейса можно учесть с помощью соответствующих граничных условий для ОФ.

Проблема граничных условий в ограниченных кристаллах имеет долгую историю. Теоретические работы по граничным условиям в полупроводниковых структурах можно разбить на две группы. Работы первой группы, наиболее многочисленной, посвящены выводу «двухсторонних» граничных условий, связывающих ОФ и их производные слева и справа от интерфейса. Они содержат разные подходы к решению математических проблем, связанных, в частности, с возможным сингулярным поведением ОФ на гетерогранице [18–24].

Нас будут интересовать только работы второй группы, посвященные выводу «односторонних» граничных условий на интерфейсе кристалл–высокий барьер (в частности, на границе кристалл–вакуум). Задачи этого типа возникают при описании поверхностных (интерфейсных) состояний Тамма–Шокли.

В пренебрежении спин-орбитальным взаимодействием микроскопический вывод граничных условий для ОФ на скачкообразной границе полупроводник ( $z > 0$ )–вакуум ( $z < 0$ ), видимо, впервые был представлен еще в работах [25, 26]. Выведенные там граничные условия содержат граничные параметры, аналитически (но сложным образом) выражающиеся через полную бесконечно-зонную структуру полупроводника, аналитически продолженную в область комплексных квазиимпульсов. Численное определение этих параметров остается нерешенной проблемой.

### 2.1. Мелкие состояния Тамма–Шокли в однозонном приближении

В однозонном пределе граничное условие представляет собой линейную связь между огибающей функцией и ее нормальной производной с единственным граничным параметром размерности длины, которая ниже обозначена буквой  $R$ . Эта длина характеризует строение интерфейса полупроводник ( $z > 0$ )–непроницаемый барьер ( $z < 0$ ) на атомных масштабах и имеет смысл глубины локализации мелкого состояния Тамма–Шокли, когда оно существует (для этого необходимо выполнение условия  $R > 0$ ). Кроме того, длина  $R$  зависит от параметров объемной зонной структуры.

В работе [27] представлен намного более простой вывод этого же граничного условия из условия эрмитовости эффективного гамильтониана для ОФ на полупространстве, ограниченном непроницаемым барьером. В рамках такого феноменологического подхода параметр  $R$  должен определяться из

эксперимента. Модель высокого барьера применима, когда интерфейсная длина  $R$  велика по сравнению с длиной проникновения под барьер. Влияние спин-орбитального взаимодействия на однозонные граничные условия и спиновое расщепление мелких состояний Тамма–Шокли в зоне проводимости центроинверсного полупроводника было рассмотрено в работе [28]. В использованной там модели спиновое расщепление контролируется произведением длины  $R$  и параметра объемного спин-орбитального взаимодействия. Непараболическое обобщение граничных условий [28] в асимметричной квантовой яме с бесконечными барьерами представлено в работе [29].

Начнем с анализа однозонного граничного условия применительно к гетероструктурам на основе полупроводников типа III–V с ориентацией гетероинтерфейса (001). В работах [30, 31] рассмотрено влияние атомарно резкой гетерограницы на эффективный однозонный гамильтониан квантовой ямы и спиновое расщепление в зоне проводимости симметрии  $\Gamma_{6c}$  в нецентроинверсных кристаллах. Разрыв зон на гетерогранице считается большим, а гетеробарьер — непроницаемым. Последний характеризуется определенным граничным условием для ОФ.

Динамика электрона проводимости при  $z > 0$  описывается в рамках многозонного метода ОФ системой  $k$  $p$ -уравнений Кона–Латтинжера:

$$\left\{ \left[ E_n(0) + \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m_0} + V(z) \right] \delta_{nn'} + \frac{\hat{\mathbf{p}} \cdot \mathbf{p}_{nn'}}{m_0} + \frac{\hbar}{4m_0^2 c^2} (\mathbf{p} \cdot [\boldsymbol{\sigma} \times \nabla V_0])_{nn'} \right\} \Phi_{n'} = E \Phi_n, \quad (2)$$

где  $n$  — номер зоны,  $E_n(0)$  — энергия экстремума  $n$ -й зоны,  $\Phi_n$  — набор огибающих функций,  $\mathbf{p}_{nn'}$  — матричный элемент оператора импульса  $\hat{\mathbf{p}}$  на блоховских функциях центра зоны Бриллюэна,  $m_0$  — масса свободного электрона, последний член в фигурных скобках является матричным элементом оператора объемного спин-орбитального взаимодействия на блоховских функциях,  $\sigma_i$  — матрицы Паули,  $i = x, y, z$ .

Требование эрмитовости гамильтониана (2) на полупространстве  $z > 0$  сводится после интегрирования по частям к приравнению нулю поверхностного вклада. Это эквивалентно приравнению нулю на границе матричного элемента нормальной компоненты оператора тока между любой парой состояний:

$$(\Phi_\lambda^\dagger \hat{v}_z \Phi_\nu) \Big|_{z=0} = 0, \quad (3)$$

где  $\hat{v}_z$  — недиагональная матрица скорости  $(\hat{v}_z)_{nn'} = \partial_{p_z}(H_{nn'})$ .

Поскольку в многокомпонентной функции  $\Phi$  велик лишь спинор, отвечающий зоне проводимости  $\Gamma_{6c}$ , сделаем унитарное преобразование  $\Phi = e^S \varphi$  [32] (с учетом  $kp$ -членов до третьего порядка включительно), сводящее гамильтониан к однозонному с эффективной массой  $m^*$  и плавным потенциалом  $V(z)$ . Теперь 3D гамильтониан зоны проводимости содержит вклады  $\hat{H}_{BIA}$  и  $\hat{H}_{SIA}$ , описывающие спиновое расщепление за счет нецентроинверсности кристалла и асимметрии ямы:

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m^*} + V(z) + \hat{H}_{BIA} + \hat{H}_{SIA}, \quad (4)$$

$$\hat{H}_{BIA} = \frac{\gamma_c}{\hbar^3} [\sigma_x p_x (p_y^2 - \hat{p}_z^2) + \sigma_y p_y (\hat{p}_z^2 - p_x^2) + \sigma_z p_z (p_x^2 - p_y^2)], \quad (5)$$

$$\hat{H}_{SIA} = a_{SO}(\sigma_x p_y - \sigma_y p_x) \partial_z V(z). \quad (6)$$

Условие (3) тем же преобразованием сводится к некоторому ограничению для двухкомпонентной ОФ. Далее потребуем инвариантности этого ограничения по отношению к операции обращения времени

$$\hat{T} = i\sigma_y \hat{K}, \quad (7)$$

где  $\hat{K}$  — оператор комплексного сопряжения. Получим T-инвариантные граничные условия, учитывающие спин-орбитальное взаимодействие в объеме и на интерфейсе симметрии  $C_{2v}$ , а также отсутствие центра инверсии в объемном кристалле:

$$\left[ \sigma_0 - i\frac{R\hat{p}_z}{\hbar} - i\frac{2m^*\gamma_c R}{\hbar^4}(\sigma_y p_y - \sigma_x p_x)\hat{p}_z - i\frac{m^*\gamma_c R}{\hbar^4}\sigma_z(p_x^2 - p_y^2) + \frac{(\chi + \chi^{int})R}{\hbar}(\sigma_x p_y - \sigma_y p_x) - \frac{2m^*\gamma_c^{int}}{\hbar^3}(\sigma_y p_y - \sigma_x p_x) \right] \phi \Big|_{z=0} = 0. \quad (8)$$

Здесь  $\sigma_0$  — единичная матрица. Вещественная величина  $R$ , имеющая размерность длины, зависит от микроскопического строения границы. Константы  $\gamma_c$  и  $\chi$  определяются объемными параметрами, причем для GaAs  $|\gamma_c| = 24.4 \text{ эВ} \cdot \text{А}^3$  и  $\chi = 0.082$ . Константы  $\gamma_c^{int}$  и  $\chi^{int}$  характеризуют спин-орбитальное взаимодействие с интерфейсным кристаллическим потенциалом и определяются из сравнения с экспериментом [31].

Таммовская задача на полупространстве  $z > 0$  в данном случае отвечает решению однозонного уравнения эффективной массы с гамильтонианом (4) и

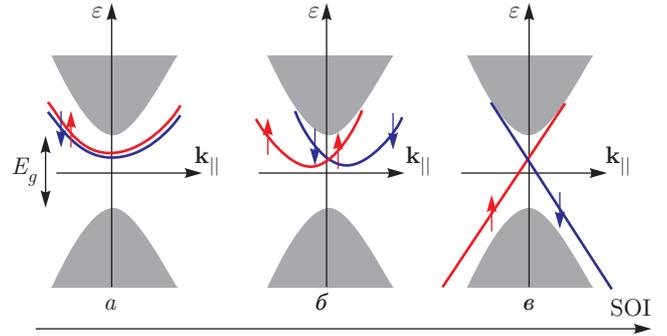


Рис. 1. Эволюция 2D спектра поверхностных состояний Тамма–Шокли при увеличении интерфейсного спин-орбитального взаимодействия: от вырожденных по спину мелких ПС (а) через слабое спин-орбитальное расщепление (б) до конического спектра ПС топологического типа (в). Серым цветом закрашены объемные состояния

граничными условиями (8). Важно отметить, что такой подход приводит к разрывности однозонных ОФ на интерфейсе. Причиной этого является непертурбативное влияние интерфейсного потенциала. Именно поэтому использованный подход позволяет описать, например, мелкие состояния Тамма–Шокли, если они существуют, даже в однозонном приближении [25–27]. К сожалению, для электронов зоны проводимости на гетеропереходе (001) GaAs/AlGaAs эта ситуация не реализуется, поскольку  $R < 0$ . Так, из количественного сравнения с прецизионными измерениями электронного спинового резонанса, чувствительными к параметрам граничных условий, следует [31], что  $R = -2.2 \text{ нм}$ .

На поверхности или интерфейсе, для которых  $R > 0$ , образуется зона мелких ПС [27], описываемых в пренебрежении спин-орбитальным взаимодействием первыми двумя слагаемыми в граничных условиях (8), рис. 1а. Такие ПС «подвешены» под дном зоны проводимости, и их глубина локализации равна длине  $R$ . Объемные и интерфейсные вклады в спин-орбитальное взаимодействие, описываемые остальными слагаемыми в (8), анизотропным образом расщепляют зону ПС по спину (точнее, по киральности — проекции спина на направление, связанное с импульсом), рис. 1б. Это расщепление было впервые введено в работе [28] в простейшей изотропной модели. При увеличении интерфейсного спин-орбитального взаимодействия расщепление увеличивается, сравнивается с шириной запрещенной зоны  $E_g$ , рис. 1в, и однозонное приближение становится несправедливым.

### 2.2. Состояния Тамма – Шокли в двухзонном приближении

Минимальной многозонной моделью является двухзонная модель. Для дираковских материалов типа висмута, халькогенидов свинца и ряда др. таммовская задача в простейших приближениях сводится к решению уравнения Дирака на полупространстве  $z > 0$ :

$$\begin{pmatrix} mc^2 & c\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{k} \\ c\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{k} & -mc^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Psi_c \\ \Psi_v \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} \Psi_c \\ \Psi_v \end{pmatrix}, \quad (9)$$

с граничными условиями [13]

$$[\Psi_v - ia_0\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n}\Psi_c]_S = 0. \quad (10)$$

Здесь двухкомпонентные огибающие функции  $\Psi_c, \Psi_v$  описывают зону проводимости и валентную зону,  $a_0$  — феноменологический действительный параметр, описывающий мелкомасштабную структуру поверхности,  $\mathbf{n}$  — нормаль к поверхности кристалла  $S$ , объемная щель  $E_g = 2mc^2$ . Граничные условия (10) следуют из эрмитовости (самосопряженности) гамильтониана Дирака на полупространстве и симметрии задачи по отношению к инверсии времени.

Пертурбативный учет далеких зон приводит к появлению квадратичных по импульсу диагональных поправок к гамильтониану Дирака в (10). Соответствующая зонная модель, называемая иногда моделью Диммока, используется в теории топологических изоляторов, см. ниже. В данном разделе вкладом далеких зон пренебрегается.

В результате сильного спин-орбитального взаимодействия таммовская задача для ДФ всегда приводит к появлению однократно вырожденного спектра ПС, заполняющего часть поверхности конуса, рис. 2. Интересно сравнить этот ответ с теорией топологических изоляторов и полуметаллов. Результат качественно зависит от знака граничного параметра  $a_0$ .

Для поверхности, обладающей положительным значением  $a_0$ , коническая («дираковская») точка в спектре находится в запрещенной зоне объемного однодолинного материала, т.е. ПС в этом случае обладают 2D спектром безмассовых ДФ, рис. 1в и рис. 2а. Из сравнения с топологической теорией следует, что этот случай является аналогом топологически нетривиальной фазы. Рисунок 2б отвечает аналогу топологически тривиальной фазы. Для нее параметр  $a_0$  отрицателен. В безмассовом пределе получаем ПС для однодолинного 3D полуметалла Дирака, рис. 2в,г.

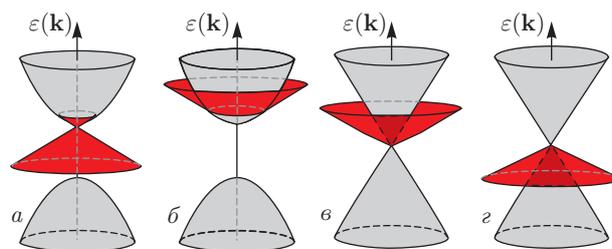


Рис. 2. (В цвете онлайн.) Энергетический спектр 3D уравнения Дирака на полупространстве. Красным цветом показана зона однократно вырожденных состояний Тамма – Шокли, светло-серым цветом отмечены объемные состояния. Существуют два класса поверхностей, нумеруемых знаком граничного параметра  $a_0$ . а) Аналог топологически нетривиального спектра. Для поверхности с положительным  $a_0$  ПС заполняют основную часть конуса с дираковской точкой в щели объемного материала, как в топологическом изоляторе. б) Аналог топологически тривиального спектра. При изменении знака  $a_0$  ПС выталкиваются из объемной щели и заполняют периферийную часть конуса. в,г) Спектр однодолинного полуметалла Дирака получается из спектра уравнения Дирака при нулевой массе. Безмассовый предел таммовской задачи для двух классов поверхностей показан на рис. г,в, причем рис. а и б переходят соответственно в рис. г и в

Аналитически спектр ПС для уравнения Дирака на полупространстве имеет вид

$$E_s(\mathbf{k}_{\parallel}) = s \frac{2a_0c}{1 + a_0^2} |\mathbf{k}_{\parallel}| + E_0. \quad (11)$$

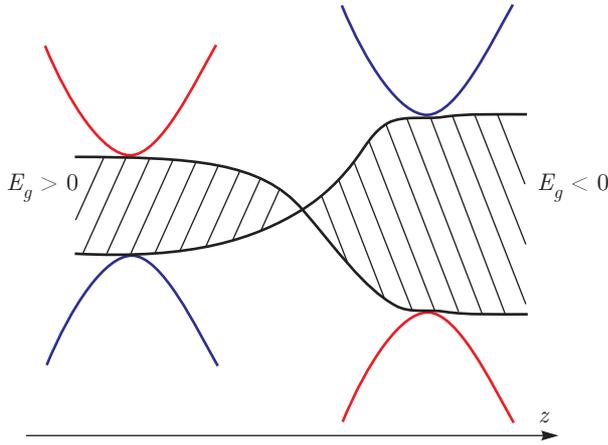
Здесь квантовое число  $s = \pm 1$  описывает киральность,  $\mathbf{k}_{\parallel} = (k_x, k_y, 0)$ . Энергия конической точки отсчитывается от центра запрещенной зоны и имеет вид

$$E_0 = mc^2 \frac{1 - a_0^2}{1 + a_0^2}. \quad (12)$$

Разные по киральности ветви спектра (11) реализуются при выполнении условия

$$\frac{2a_0}{1 + a_0^2} \frac{mc}{\hbar} - s|\mathbf{k}_{\parallel}| \geq 0.$$

Другой подход к теории ПС связан с формулировкой моделей, зонные параметры которых плавно (на атомных масштабах) изменяются вблизи интерфейса («гетероконтакта»). Многозонный метод ОФ в этом случае применим во всем пространстве, и проблемы граничных условий не возникает. В работе [14] рассмотрены интерфейсные состояния ДФ в модели симметричного инверсного гетероконтакта. Они описываются уравнением Дирака, масса ДФ



**Рис. 3.** Дираковская модель симметричного гетероконтакта [14] в случае инверсии знака межзонной щели описывается уравнениями суперсимметричной квантовой механики, нулевая мода которой соответствует интерфейсным состояниям с коническим спектром (рис. 1а), устойчивым к возмущениям

в котором инвертируется в пространстве, при этом зоны проводимости и валентная зона меняются местами, рис. 3.

Вблизи точки инверсии возникает 2D зона ПС. Уравнение для ДФ в инверсном контакте приобретает вид, характерный для суперсимметричной (SUSY) квантовой механики:

$$\begin{pmatrix} 0 & i\frac{E_g(z)}{2} + c\sigma \cdot \mathbf{k} \\ -i\frac{E_g(z)}{2} + c\sigma \cdot \mathbf{k} & 0 \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} \Psi_c \\ \Psi_v \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} \Psi_c \\ \Psi_v \end{pmatrix}. \quad (13)$$

Нулевая мода этого уравнения описывает интерфейсные состояния:

$$\Psi_{\pm} = \begin{pmatrix} 0 \\ e^{i\theta/2} \\ \pm e^{-i\theta/2} \\ 0 \end{pmatrix} \times \exp \left\{ \int_0^z \frac{E_g(z)}{2\hbar c} dz + i\mathbf{k}_{\parallel} \cdot \mathbf{r}_{\parallel} \right\}, \quad (14)$$

где  $e^{i\theta} = (k_x + ik_y)/|k_{\parallel}|$ . Решение (14) устойчиво к возмущениям функции  $E_g(z)$  в силу SUSY. Дираковская точка в этой симметричной модели находится точно в центре щели, а спектр ПС факти-

чески описывается формулами (11), (12), в которых  $a_0 = 1$ .

Более реалистична модель несимметричного контакта, рассмотренная в обзоре [15], см. рис. 4. Асимметрия зон задается скалярным потенциалом  $\varphi(z)$ , имеющим смысл интерфейсного изгиба зон.

При большом разрыве зон спектр интерфейсных состояний имеет вид

$$E = -\frac{E_{g1}\varphi_0}{E_{g0}} \pm |k_{\parallel}| \sqrt{1 - \left(\frac{2\varphi_0}{E_{g0}}\right)^2}, \quad (15)$$

где  $\varphi = \varphi_0 f(z)$ ,  $E_g(z) = E_{g0} f(z) + E_{g1}$ , модельная функция  $f(z)$  описывает согласованное изменение ширины запрещенной зоны и изгиба зон на гетероинтерфейсе.

Имеет смысл сравнить результаты работ [13] и [15]. Гетероинтерфейсный спектр (15) переходит в спектр ПС (11) при замене

$$a_0 = -\text{sign}(E_{g0}) \sqrt{\frac{E_{g0} - \varphi_0}{E_{g0} + \varphi_0}}. \quad (16)$$

Отсюда виден физический смысл граничного параметра  $a_0$ : его знак коррелирует со знаком щели, а отличие его амплитуды от 1 есть мера  $e-\hbar$ -асимметрии. Аналог топологически нетривиальной фазы на рис. 2а отвечает инверсии зон. Важное следствие из (15): инверсии зон недостаточно, вообще говоря, для появления суперсимметричных интерфейсных состояний. При большой  $e-\hbar$ -асимметрии, когда  $\varphi_0/E_{g0} > 1$ , эти состояния перестают существовать.

В принципе, условиями появления SUSY-состояний можно управлять с помощью внешних полей. Так, рассмотрим [33] решение уравнения Дирака (9) с граничными условиями (10) для цилиндрической нанопроволоки радиуса  $R_0$  в продольном магнитном поле  $B$ . Спектр ПС управляется магнитным потоком  $\Phi = \pi R_0^2 B$  через сечение проволоки. При положительном знаке граничного параметра  $a_0$  в сильном поле квазиклассический спектр ПС имеет вид

$$E = \pm \frac{2a_0 c \hbar}{1 + a_0^2} \sqrt{k_z^2 + \frac{(j + \Phi/\Phi_0)^2}{R_0^2}} + E_0, \quad (17)$$

где  $k_z$  — проекция квазиимпульса на ось проволоки,  $j$  — полуцелые числа,  $\Phi_0 = hc/e$  — квант потока. Когда магнитный поток полукратен кванту потока, спектр (17) становится бесщелевым. При любом знаке  $a_0$  вклад ПС в полную плотность состояний осциллирует как функция магнитного потока с периодом  $\Phi_0$ . Это приводит к осцилляциям сопротивления проволоки типа Ааронова–Бома.

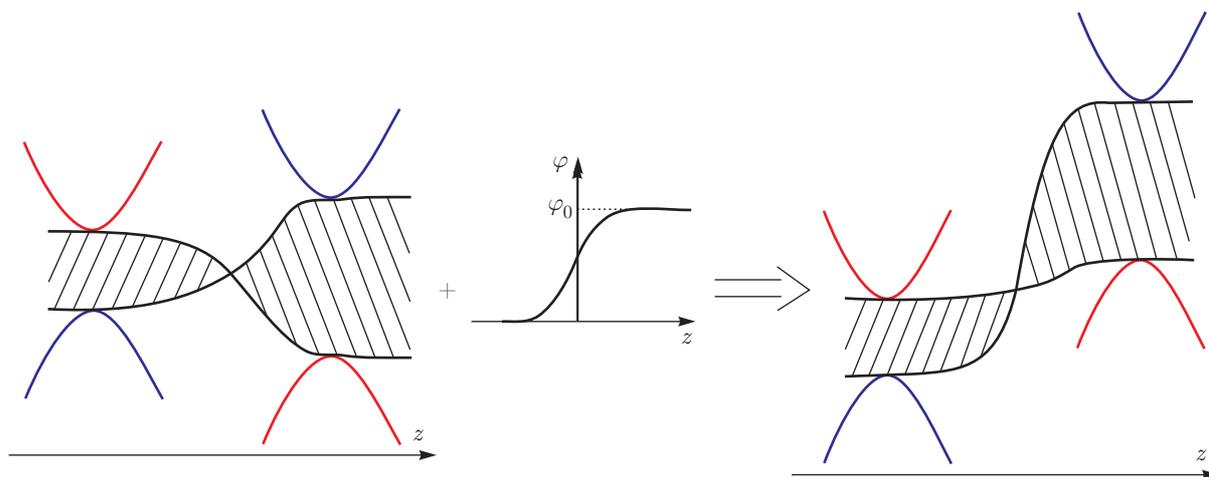


Рис. 4. Модель несимметричного инверсного гетероконтакта [15]. При большой асимметрии интерфейсные состояния перестают существовать, несмотря на инверсию зон

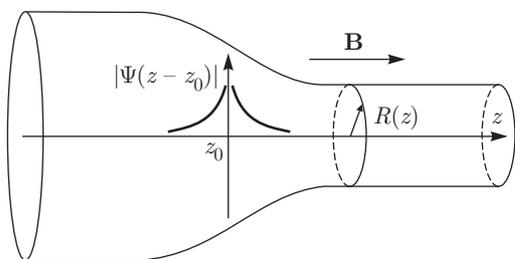


Рис. 5. Проволока с неоднородным сечением в продольном магнитном поле. Схематически показана амплитуда суперсимметричного ПС, которое реализуется при полуцелых значениях локального магнитного потока (в единицах кванта потока), проходящего через сечение проволоки  $z = z_0$

Более интересен случай проволоки с неоднородным сечением в однородном продольном магнитном поле. Магнитный поток через сечение проволоки неоднороден и возможно образование локальных SUSY-состояний, показанных на рис. 5.

В работе [33] найдено, что такое SUSY-решение с энергией  $E_0$  имеет вид

$$\Psi \propto \exp\left(\frac{1}{\hbar v} \int_{z_0}^z \Delta(z) dz\right), \quad (18)$$

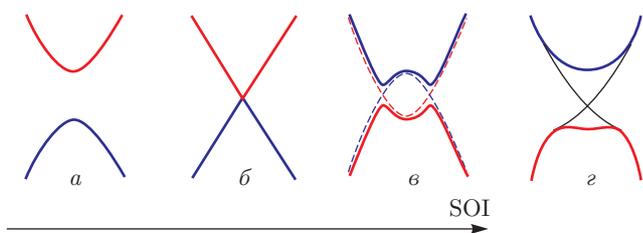
где скорость поверхностных состояний  $v = 2a_0c/(1 + a_0^2)$ . Эффективная локальная щель  $\Delta(z) = \hbar v(j + \Phi(z)/\Phi_0)/R_0(z)$  инвертируется в точке  $z = z_0$ , поэтому решение (18) локализовано именно здесь.

### 3. ТОПОЛОГИЧЕСКИЕ ПОВЕРХНОСТНЫЕ СОСТОЯНИЯ

Теория зонной структуры полупроводников, использующая топологические соображения, впервые введенные в теории квантового эффекта Холла [34], привела к появлению нового физического понятия — топологический изолятор (ТИ) [35, 36]. В топологических изоляторах, для которых присуще сильное спин-орбитальное взаимодействие, особенности объемной зонной структуры таковы, что на их поверхности обязана существовать (по топологическим соображениям) зона проводящих поверхностных (или краевых) состояний типа показанных на рис. 1в и 2а. Это наиболее фундаментальное предсказание топологической теории. Поверхностные ДФ однократно вырождены по спиновому квантовому числу (киральности) и имеют конический закон дисперсии, что приводит к ослаблению их рассеяния на немагнитных примесях. Доказывается, что это свойство является особенностью именно топологических поверхностных или краевых состояний.

Обычно для реализации фазы ТИ необходимо выполнить три качественных условия для параметров объемной зонной структуры: симметрия по отношению к инверсии времени (Т-симметрия), сильное спин-орбитальное взаимодействие и инверсия зон. В результате в объемной щели появляются «топологические» ПС, сам факт образования которых, согласно топологической теории, не зависит от деталей строения приповерхностной области. Возможность реализации фаз 2D ТИ [37] и 3D ТИ [38] была предсказана соответственно в 2005 г. и 2007 г.





**Рис. 6.** Схема эволюции объемного спектра узкощелевого кристалла при увеличении объемного спин-орбитального взаимодействия, приводящего к инверсии зон: от фазы тривиального изолятора (а) через бесщелевую фазу (б) до инвертированного спектра в фазе топологического изолятора (в). г — зонная модель полубесконечного топологического изолятора типа  $\text{Bi}_2\text{Se}_3$ . В кривизну спектра объемных зон вносит вклад дисперсия массового члена  $M(k)$ . Состояния в запрещенной зоне изображают спектр топологических ПС

Теоретически было показано, что целый класс соединений с центром инверсии типа  $\text{Bi}_2\text{Se}_3$  должен находиться в фазе ТИ. При этом именно сильное спин-орбитальное взаимодействие приводит к инверсии двух ближайших к уровню Ферми зон с разной четностью, рис. 6. Существование ПС в соединениях  $\text{Bi}_2\text{Se}_3$ ,  $\text{Bi}_2\text{Te}_3$ ,  $\text{Sb}_2\text{Te}_3$  было экспериментально установлено в работах [44, 45]. Для измерений ARPES эталонным 3D ТИ является кристаллическое соединение  $\text{Bi}_2\text{Se}_3$ , в котором запрещенная зона приблизительно 0.3 эВ. Этим методом установлено [44], что на поверхности (111) в запрещенной зоне этого кристалла существуют однократно вырожденные ПС с безмассовым дираковским спектром.

В приближении ОФ указанные соединения описываются вблизи центра зоны Бриллюэна модифицированным уравнением Дирака, которое в пренебрежении анизотропией и  $e-h$ -асимметрией имеет вид

$$\begin{pmatrix} M(\mathbf{k}) & v\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{k} \\ v\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{k} & -M(\mathbf{k}) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Psi_c \\ \Psi_v \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} \Psi_c \\ \Psi_v \end{pmatrix}, \quad (21)$$

где существенно диспергирующий массовый член  $M(\mathbf{k}) = M_0 - B\mathbf{k}^2$  отличает это уравнение от настоящего уравнения Дирака. Топологической фазе отвечает отрицательное значение произведения параметров  $M_0B > 0$ , что является результатом инверсии зон. Нарушение  $e-h$ -симметрии описывается введением дополнительного диагонального вклада в уравнение (21). Будем пренебрегать этой асимметрией.

Для описания ПС в рамках уравнения (21) нужно задать граничные условия, учитывающие мелкомасштабную структуру поверхности. Для этого часто используют тот факт, что указанная модификация уравнения Дирака удваивает порядок системы дифференциальных уравнений. Поэтому проще всего использовать нулевые граничные условия для всех компонент ОФ [46, 47]:  $[\Psi_c = \Psi_v]_S = 0$ . Такие граничные условия, которые часто называют «открытыми», не учитывают деталей микроскопического строения поверхности на атомных масштабах, но гарантируют, тем не менее, существование безмассовых ДФ на плоской поверхности.

Однако было показано, что и в случае 3D ТИ ненулевые граничные условия могут существенно влиять на спектр ПС [42, 48]. Общие граничные условия для четырехкомпонентной ОФ связывают значения ОФ и ее нормальной производной на границе  $S$ :

$$\left[ \frac{B}{M_0} \partial_n \Psi + Q\Psi \right]_S = 0, \quad (22)$$

где  $4 \times 4$ -матрица  $Q$  должна определяться из дополнительных соображений. Т-симметрия наряду с пространственной симметрией уменьшает число независимых вещественных феноменологических параметров в этой матрице до трех. При достаточно сильном поверхностном спин-орбитальном взаимодействии, описываемом этими параметрами, ПС могут исчезнуть из запрещенной зоны в той окрестности точки  $\Gamma$ , в которой применим метод ОФ [42].

Эксперименты показывают, что свойства ПС чувствительны к возмущениям поверхностного потенциала, что может быть учтено в соответствующем выборе параметров граничных условий. Так, например, легирование поверхности немагнитными и магнитными атомами смещает положение точки Дирака и модифицирует дисперсию ПС [49–52].

Еще одна дираковская система — топологический кристаллический изолятор (ТКИ). В ТКИ защищенность ПС обеспечивается сразу двумя симметриями, Т-симметрией и пространственной симметрией кристалла и его поверхности [53]. Топологическая классификация проводится аналогично рассмотренному выше случаю ТИ, с тем отличием, что матрица  $w_{nm}$  строится на операторе  $\hat{U}\hat{T}$ , где  $\hat{U}$  — оператор пространственной симметрии.

Халькогениды свинца и твердые растворы  $\text{Pb}_{1-x}\text{Sn}_x\text{Te}(\text{Se})$  переходят в фазу ТКИ при определенных значениях концентрации олова, когда происходит инверсия зон разной четности в точках  $L$  [54–57]. Роль пространственной симметрии в указанных соединениях играет зеркальная симмет-

рия, которая работает не при всех ориентациях поверхности. В зоне Бриллюэна этой системы есть четыре неэквивалентных  $L$  долины, в запрещенной зоне каждой из которых появляются безмассовые поверхностные 2D ДФ. На поверхности типа (001) пары дираковских конусов ПС проектируются в одну точку, приводя к вырождению спектров ПС. Атомно резкие возмущения, сохраняющие зеркальную симметрию, снимают это вырождение, раздвигая дираковские точки в обратном пространстве без открытия щели в спектре ПС [54–56]. Однако возмущения, нарушающие зеркальную симметрию поверхности, приводят к образованию щели в спектре ПС [58], тем самым разрушают топологическую защиту. Принципиальные особенности спектра ПС в любой фазе ТКИ на основе халькогенидов свинца могут быть найдены в пренебрежении междолинным взаимодействием из решения анизотропного уравнения Дирака с граничными условиями (10).

#### 4. КРАЕВЫЕ СОСТОЯНИЯ В ГРАФЕНЕ

Состояния Тамма–Шокли возникают далеко не всегда. Принципиальные вопросы: при каких условиях, кроме реализуемых в топологических изоляторах, возникают состояния типа Тамма–Шокли; существуют ли они на реальных поверхностях раздела в нормальных условиях (не в вакууме); имеет ли проводимость по ним зонный характер? Анализ, проведенный выше, говорит о том, что в ряде дираковских материалов такие состояния существуют (в отличие, например, от полупроводников типа GaAs).

Совсем недавно краевые состояния этого типа были экспериментально обнаружены резонансными методами еще в одном дираковском 2D материале, графене. Было установлено [16], что спектр краевых состояний Тамма–Шокли в графене линеен по импульсу, что похоже на сечение конического спектра ПС в ТИ. Кроме того, с помощью прямого транспортного эксперимента доказан зонный характер проводимости по ним в нормальных условиях [17]. Опишем теорию, необходимую для объяснения этих экспериментов.

2D ДФ в графене описываются двухдолинной системой уравнений для двухкомпонентных функций  $\Psi_K, \Psi_{K'}$ , описывающих ОФ в двух долинах,  $K$  и  $K'$ :

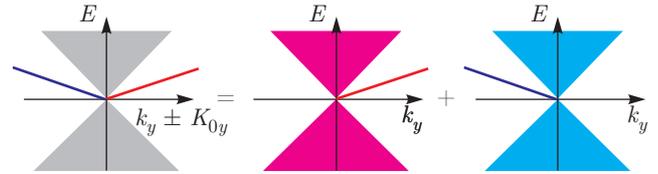


Рис. 7. Краевые состояния на полуплоскости графена в каждой долине (справа от равенства) и на схеме приведенных долин, когда их центры совмещены (слева)

$$\begin{pmatrix} v\boldsymbol{\sigma} \cdot (\mathbf{k} - \mathbf{K}) & 0 \\ 0 & v\boldsymbol{\sigma} \cdot (\mathbf{k} - \mathbf{K}') \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Psi_K \\ \Psi_{K'} \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} \Psi_K \\ \Psi_{K'} \end{pmatrix}, \quad (23)$$

где  $\boldsymbol{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y)$  — матрицы Паули в стандартном представлении,  $v \approx 10^6$  м/с.

Общие граничные условия можно определить, как обычно, из двух требований — эрмитовости гамильтониана (23) и инвариантности граничных условий по отношению к инверсии времени. Они имеют довольно сложный вид [59–64]:

$$[\Psi_K \sin \beta + ie^\varphi (e^{i\gamma\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n}} + \sigma_z \cos \beta) \sigma_z \Psi_{K'}]_\Gamma = 0. \quad (24)$$

Здесь  $\beta, \varphi, \gamma$  — феноменологические вещественные параметры.

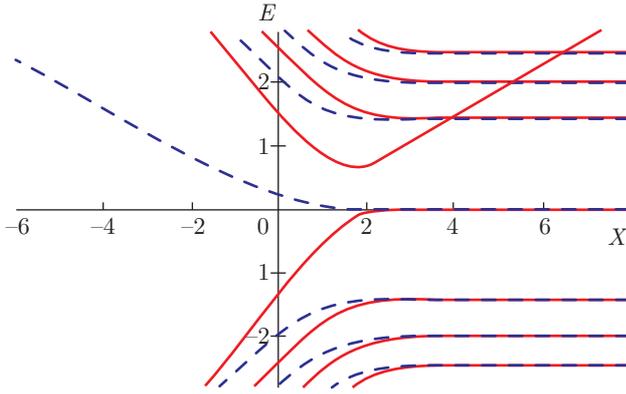
В пренебрежении междолинным рассеянием систему можно описывать парой независимых 2D уравнений Вейля с однопараметрическим граничным условиям [65, 66] для однодолинной функции  $\Psi_{K(K')} = (\psi_{1K(K')}, \psi_{2K(K')})^T$ :

$$\tau v \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p} \psi_\tau = E \psi_\tau, \quad (25)$$

$$[\psi_{1K(K')} + ia^\tau e^{-i\varphi} \psi_{2K(K')}]_\Gamma = 0, \quad (26)$$

где  $a$  — вещественный феноменологический параметр, определяющий свойства края графена на атомных масштабах, индекс  $\tau = \pm 1$  нумерует долины:  $\tau = +1$  ( $\tau = -1$ ) в долине  $K$  ( $K'$ ).

Таммовская задача (25), (26) легко решается. Волновая функция краевых состояний экспоненциально локализована вблизи границы. Типичная длина локализации, определенная из эксперимента [17], составляет 2 нм. Величина  $a$  должна определяться из сравнения с экспериментом, но из сравнения с модельными микроскопическими расчетами [66, 67] следует ожидать, что она мала:  $|a| \ll 1$ .



**Рис. 8.** (В цвете онлайн.) Зависимости энергии (в единицах  $\hbar v/\lambda$ ) ДФ от  $X$ -центра осциллятора в полубесконечном графене в магнитном поле 1 Тл при  $a = 0.2$ . Схема приведенных долин. Красными сплошными кривыми отмечены состояния из долины  $K$ , синими штриховыми — из долины  $K'$

Для образца графена в форме полуплоскости спектр этих состояний в отсутствие магнитного поля имеет вид [63–66], рис. 7:

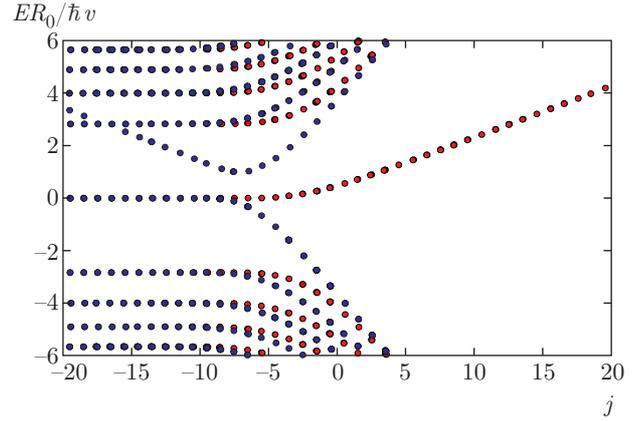
$$E_\tau(k_{\parallel}) = \frac{2a}{1+a^2} \tau v k_{\parallel}, \quad \tau k_{\parallel} \geq 0. \quad (27)$$

Здесь  $k_{\parallel}$  — одномерный импульс электрона вдоль края, отсчитанный от центра долины. Важно, что знак  $k_{\parallel}$  определяется номером долины. Для наглядности разные долины показаны разным цветом. Длина локализации краевого состояния равна  $1/k_{\parallel}$ .

В случае перпендикулярного магнитного поля имеют место два типа краевых состояний, состояния Тамма–Шокли и магнитные краевые состояния, обусловленные скачущими орбитами. Они взаимодействуют между собой, а результат их интерференции зависит от геометрии образца. Для полуплоскости  $x > 0$  итоговый спектр [59] показан на рис. 8.

Краевые состояния существуют и на границе круглого отверстия (антидот радиуса  $R_0$ ) в бесконечном листе графена. Конечность периметра антидота приводит к квантованию компоненты импульса, параллельной границе. Дискретные краевые состояния теперь характеризуются полным угловым моментом  $j = \pm 1/2, \pm 3/2, \pm 5/2, \dots$ , причем разные знаки  $j$  отвечают разным долинам. В рамках квазиклассического подхода спектр таких краевых состояний получается из (4) с помощью замены  $k_{\parallel}$  на величину, кратную  $1/R_0$ . Более точная асимптотика ( $|a| \ll 1$ ) дает комплексный спектр распадного типа:

$$E = \frac{2a\hbar v}{R_0} \left( j - \frac{\tau}{2} \right) - i \frac{2\pi\hbar v|a| (a(j-1/2))^{2j-1}}{R_0 \Gamma^2(j-1/2)}. \quad (28)$$



**Рис. 9.** (В цвете онлайн.) Безразмерная энергия дираковских фермионов в графеновой антиточке в магнитном поле  $B = 4$  Тл как функция сохраняющейся проекции полного углового момента  $j$  в схеме приведенных долин;  $a = 0.1$ . Разными цветами показаны состояния в разных долинах

Здесь  $\tau j > 0$ ;  $\Gamma(z)$  — гамма-функция,  $j = \pm 3/2, \pm 5/2, \dots$ . В особом случае  $j = \pm 1/2$  энергия крайних состояний определяется корнем уравнения

$$ER_0 \ln \left( \frac{|E|R_0}{2} \right) = -a. \quad (29)$$

Хотя эти состояния в отсутствие магнитного поля квазистационарны, время их жизни по отношению к распаду в объемные состояния велико в актуальном случае малых  $a$ . ДФ, захваченные в краевые состояния, совершают циклическое движение по периметру антидота (по часовой стрелке в одной долине или против нее в другой), набирая в магнитном поле дополнительную аарон-бомовскую фазу.

Спектр краевых состояний в антидоте в перпендикулярном магнитном поле управляется магнитным потоком  $\Phi = B\pi R^2$ , проходящим через отверстие антидота:

$$E = \frac{2a\hbar v}{R} \left( j + \frac{\Phi}{\Phi_0} - \frac{\tau}{2} \right). \quad (30)$$

Условия применимости этой асимптотики имеют вид

$$\tau \left( j + \frac{\Phi}{\Phi_0} \right) > 0, \quad |a| \ll 1.$$

Асимптотика (30) обоснована тем более, чем меньше магнитное поле влияет на орбитальную часть волновой функции, т. е. когда длина локализации краевого состояния мала по сравнению с магнитной длиной. В общем случае спектр, рассчитанный численно, показан на рис. 9 [68].

Эти состояния объясняют обнаруженный недавно эффект Ааронова–Бома в сопротивлении наноперфорированного графена. Из сравнения с экспериментом можно извлечь значение граничного параметра:  $a = -0.05$ .

Таким образом, можно сделать вывод, что вокруг каждого антидота в наноперфорированном графене сравнительно медленно вращаются ДФ дырочного типа. Направление вращения определяется номером долины, а их скорость в 10 раз меньше объемной скорости ДФ в графене.

### 5. ВЫВОДЫ. МИНИМАЛЬНАЯ МОДЕЛЬ ПОВЕРХНОСТНЫХ СОСТОЯНИЙ ДЛЯ ДИРАКОВСКИХ ЭЛЕКТРОНОВ

Из обзора литературных данных по дираковским материалам можно сделать качественный вывод: «дираковость» благоприятствует появлению зоны краевых и поверхностных состояний типа Тамма–Шокли. Эта зона, однако, не всегда оказывается в объемной щели, где ее спектр аналогичен спектру топологических состояний. При некоторых значениях граничных параметров она выталкивается из щели и перекрывается по энергии с объемными зонами.

Проведенный анализ позволяет сформулировать минимальную модель, пригодную для аналитического исследования принципиальных особенностей спектра поверхностных или краевых состояний в ряде дираковских систем: анизотропная, вообще говоря, версия 3D уравнения Дирака (9) с граничными условиями (10) и их 2D обобщения.

Такая модель применима в пренебрежении междолинным взаимодействием для описания ПС в следующих дираковских системах.

В 3D системах: халькогениды свинца и твердые растворы на их основе типа  $Pb_{1-x}Sn_xSe(Te)$ , полуметаллы типа висмута и  $Bi_{1-x}Sb_x$  в L-точке, как в инвертированном режиме, так и в обычном, неинвертированном.

В 2D системах: графен и 2D ТИ в квантовых ямах на основе гетеропары  $HgTe-CdTe$ .

Минимальная модель не применима для описания ПС в  $Bi_2Se_3$ ,  $Bi_2Te_3$ ,  $Sb_2Te_3$  из-за существенного вклада удаленных зон, формирующего дисперсию массового члена в модифицированном уравнении Дирака.

Авторы признательны И. В. Загородневу за критические замечания. Работа частично поддержана РФФИ (гранты №№ 14-02-01166, 16-32-00655).

В. В. Е. также благодарен за поддержку фонду «Династия».

### ЛИТЕРАТУРА

1. J. M. Luttinger and W. Kohn, Phys. Rev. **97**, 869 (1955).
2. Л. В. Келдыш, ЖЭТФ **45**, 364 (1964).
3. P. Wolff, J. Phys. Chem. Sol. **25**, 1057 (1964).
4. В. Б. Сандомирский, Радиотехн. и электрон. **7**, 1971 (1962).
5. Ю. Ф. Огрин, В. Н. Луцкий, М. И. Елинсон, Письма в ЖЭТФ **3**, 114 (1966).
6. В. Н. Луцкий, Д. Н. Корнеев, М. И. Елинсон, Письма в ЖЭТФ **4**, 267 (1966).
7. В. Б. Сандомирский, ЖЭТФ **52**, 158 (1967).
8. И. Е. Тамм, Zs. Physik **76**, 849 (1932).
9. И. Е. Тамм, Phys. Z. Sowjet. **1**, 733 (1932).
10. A. W. Maue, Zs. Physik **94**, 717 (1935).
11. W. Shockley, Phys. Rev. **56**, 317 (1939).
12. С. Дэвиссон, Дж. Левин, *Поверхностные (таммовские) состояния*, Мир, Москва (1973).
13. В. А. Волков, Т. Н. Пинскер, ФТТ **23**, 1756 (1981).
14. В. А. Волков, О. А. Панкратов, Письма в ЖЭТФ **42**, 145 (1985).
15. В. А. Волков, Б. Г. Идлис, М. Ш. Усманов, УФН **165**, 799 (1995).
16. Ю. И. Латышев, А. П. Орлов, А. В. Фролов, В. А. Волков, И. В. Загороднев, В. А. Скуратов, Ю. В. Петров, О. Ф. Вывенко, Д. Ю. Иванов, М. Конзиковски, П. Монсеау, Письма в ЖЭТФ **98**, 242 (2013).
17. Yu. I. Latyshev, A. P. Orlov, V. A. Volkov, V. V. Enaldiev, I. V. Zagorodnev, O. F. Vyvenko, Yu. V. Petrov, and P. Monceau, Sci. Rep. **4**, 7578 (2014).
18. E. L. Ivchenko, *Optical Spectroscopy of Semiconductor Nanostructures*, Alpha Sci., Harrow, UK (2005).
19. W. Zawadzki and P. Pfeffer, Semicond. Sci. Technol. **19**, R1 (2004).
20. B. A. Foreman, Phys. Rev. B **72**, 165345 (2005).

21. Э. Е. Тахтамиров, В. А. Волков, ЖЭТФ **116**, 1843 (1999).
22. A. V. Rodina, A. Yu. Alekseev, A. L. Efros, M. Rosen, and B. K. Meyer, Phys. Rev. B **65**, 125302 (2002).
23. E. E. Takhtamirov and V. A. Volkov, Semicond. Sci. Technol. **12**, 77 (1997).
24. E. Takhtamirov and R. V. N. Melnik, New J. Phys. **12**, 123006 (2010).
25. В. А. Волков, Т. Н. Пинскер, ЖЭТФ **70**, 2268 (1976).
26. В. А. Волков, Т. Н. Пинскер, ЖЭТФ **72**, 1087 (1977).
27. V. A. Volkov and T. N. Pinsker, Surf. Sci. **81**, 181 (1979).
28. Ф. Т. Васько, Письма в ЖЭТФ **30**, 574 (1979).
29. A. V. Rodina and A. Yu. Alekseev, Phys. Rev. B **73**, 115312 (2006).
30. Ж. А. Девизорова, В. А. Волков, Письма в ЖЭТФ **98**, 110 (2013).
31. Ж. А. Девизорова, А. В. Щепетильников, Ю. А. Нефедов, В. А. Волков, И. В. Кукушкин, Письма в ЖЭТФ **100**, 111 (2014).
32. R. Winkler, *Spin-orbit Coupling Effects in Two-dimensional Electron and Hole Systems*, Springer, Berlin (2003).
33. V. V. Enaldiev and V. A. Volkov, arXiv:1509.07532.
34. D. J. Thouless, M. Kohmoto, M. P. Nightingale, and M. denNijs, Phys. Rev. Lett. **49**, 405 (1982).
35. M. Hasan and C. Kane, Rev. Mod. Phys. **82**, 3045 (2010).
36. X. L. Qi and S.-C. Zhang, Rev. Mod. Phys. **83**, 1057 (2011).
37. C. L. Kane and E. J. Mele, Phys. Rev. Lett. **95**, 146802 (2005).
38. L. Fu and C. L. Kane, Phys. Rev. Lett. **98**, 106803 (2007).
39. B. A. Bernevig, T. L. Hughes, and S. C. Zhang, Science **314**, 1757 (2006).
40. M. König, S. Wiedmann, C. Brüne, A. Roth, H. Buhmann, L. W. Molenkamp, X. L. Qi, and S. C. Zhang, Science **318**, 766 (2007).
41. K. C. Nowack, E. M. Spanton, M. Baenninger, M. König, J. R. Kirtley, B. Kalisky, C. Ames, P. Leubner, C. Brüne, H. Buhmann, L. W. Molenkamp, D. Goldhaber-Gordon, and K. A. Moler, Nature Mat. **12**, 787 (2013).
42. V. V. Enaldiev, I. V. Zagorodnev, and V. A. Volkov, Письма в ЖЭТФ **101**, 94 (2015).
43. L. Fu and C. L. Kane, Phys. Rev. B **76**, 045302 (2007).
44. D. Hsieh, Y. Xia, D. Qian, L. Wray, F. Meier, J. H. Dil, J. Osterwalder, L. Patthey, A. V. Fedorov, H. Lin, A. Bansil, D. Grauer, Y. S. Hor, R. J. Cava, and M. Z. Hasan, Phys. Rev. Lett. **103**, 146401 (2009).
45. D. Hsieh, Y. Xia, D. Qian, J. H. Dil, F. Meier, J. Osterwalder, L. Patthey, J. G. Checkelsky, N. P. Ong, A. V. Fedorov, H. Lin, A. Bansil, D. Grauer, Y. S. Hor, R. J. Cava, and M. Z. Hasan, Nature **460**, 1101 (2009).
46. C. X. Liu, X. L. Qi, H. J. Zhang et al., Phys. Rev. B **82**, 045122 (2010).
47. W. Y. Shan, H. Z. Lu, and S. Q. Shen, New J. Phys. **12**, 043048 (2010).
48. V. N. Men'shov, V. V. Tugushev, and E. V. Chulkov, Письма в ЖЭТФ **98**, 676 (2013).
49. T. Valla, Z. H. Pan, D. Gardner, Y. S. Lee, and S. Chu, Phys. Rev. Lett. **108**, 117601 (2012).
50. M. R. Scholz, J. Sánchez-Barriga, D. Marchenko, A. Varykhalov, A. Volykhov, L. V. Yashina, and O. Rader, Phys. Rev. Lett. **108**, 256810 (2012).
51. M. Bianchi, R. C. Hatch, J. Mi, B. B. Iversen, and P. Hofmann, Phys. Rev. Lett. **107**, 086802 (2011).
52. S. Roy, H. L. Meyerheim, A. Ernst, K. Mohseni, C. Tusche, M. G. Vergniory, T. V. Menshchikova, M. M. Otrokov, A. G. Ryabishchenkova, Z. S. Aliev, M. B. Babanly, K. A. Kokh, O. E. Tereshchenko, E. V. Chulkov, J. Schneider, and J. Kirschner, Phys. Rev. Lett. **113**, 116802 (2014).
53. L. Fu, Phys. Rev. Lett. **106**, 106802 (2011).
54. T. H. Hsieh, H. Lin, J. Liu, W. Duan, A. Bansil, and L. Fu, Nature Comm. **3**, 982 (2012).
55. S. Y. Xu, C. Liu, N. Alidoust, M. Neupane, D. Qian, I. Belopolski, J. D. Denlinger, Y. J. Wang, H. Lin, L. A. Wray, G. Landolt, B. Slomski, J. H. Dil, A. Marcinkova, E. Morosan, Q. Gibson, R. Sankar, F. C. Chou, R. J. Cava, A. Bansil, and M. Z. Hasan, Nature Comm. **3**, 1192 (2012).

56. P. Dziawa, B. J. Kowalski, K. Dybko, R. Buczko, A. Szczerbakow, M. Szot, E. Łusakowska, T. Balasubramanian, B. M. Wojek, M. H. Berntsen, O. Tjernberg, and T. Story, *Nature Mat.* **11**, 1023 (2012).
57. S. G. Egorova, V. I. Chernichkin, L. I. Ryabova, E. P. Skipetrov, L. V. Yashina, S. N. Danilov, S. D. Ganichev, and D. R. Khokhlov, *Sci. Rep.* **5**, 11540 (2015).
58. I. Zeljkovic, Y. Okada, M. Serbyn, R. Sankar, D. Walkup, W. Zhou, J. Liu, G. Chang, Y. J. Wang, M. Z. Hasan, F. Chou, H. Lin, A. Bansil, L. Fu, and V. Madhavan, *Nature Mat.* **14**, 318 (2015).
59. И. В. Загороднев, В. В. Еналдиев, В. А. Волков, *Нелинейный мир* **1**, 29 (2011).
60. E. McCann and V. I. Fal'ko, *J. Phys.: Condens. Matter* **16**, 2371 (2004).
61. I. V. Zagorodnev, Zh. A. Devizorova, and V. V. Enaldiev, *Phys. Rev. B* **92**, 195413 (2015).
62. A. R. Akhmerov and C. W. J. Beenakker, *Phys. Rev. B* **77**, 085423 (2008).
63. D. M. Basko, *Phys. Rev. B* **79**, 205428 (2009).
64. G. Tkachov, *Phys. Rev. B* **79**, 045429 (2009).
65. В. А. Волков, И. В. Загороднев, *ФНТ* **35**, 5 (2009).
66. J. A. M. van Ostaay, A. R. Akhmerov, C. W. J. Beenakker, and M. Wimmer, *Phys. Rev. B* **84**, 195434 (2011).
67. P. Koskinen, S. Malola, and H. Häkkinen, *Phys. Rev. Lett.* **101**, (2008).
68. В. В. Еналдиев, В. А. Волков, *Нелинейный мир* **1**, 27 (2011).