

Краевые состояния экситонного диэлектрика со спин-орбитальным взаимодействием

В. В. Вальков¹⁾

Институт физики им. Л. В. Киренского Сибирского отделения РАН, 660036 Красноярск, Россия

Поступила в редакцию 21 апреля 2020 г.

После переработки 27 апреля 2020 г.

Принята к публикации 27 апреля 2020 г.

На примере инвертированной двухзонной структуры квантовой ямы HgTe рассмотрено влияние спин-орбитального и кулоновского взаимодействий на симметричные и топологические свойства s -, p -, d - и $s + d$ -фаз экситонного диэлектрика. Установлено, что только p -фаза обладает нетривиальной топологией, однако является метастабильной. Показано, что обменное взаимодействие фермионов индуцирует основное состояние с $s + d$ -симметрией экситонного параметра порядка. В такой фазе экситонного диэлектрика число Черна имеет нулевое значение, тем не менее при открытых границах реализуются краевые состояния.

DOI: 10.31857/S1234567820110099

1. Введение. В первых работах по экситонному диэлектрику (ЭД) было показано, что в полупроводнике кулоновское взаимодействие фермионов может индуцировать спонтанное возникновение экситонного параметра порядка (ЭПП) с генерацией диэлектрической щели при ненулевом значении квазиимпульса [1, 2, 3]. Важнейшим условием реализации ЭД являлось наличие инвертированности зонной структуры, при которой имело место перекрытие по энергии валентной зоны и зоны проводимости. Существенно, что в фазе ЭД возникала эффективная гибридизация состояний отмеченных зон.

С другой стороны, инвертированность зонной структуры и спин-орбитальное взаимодействие являются необходимыми атрибутами для реализации топологически нетривиальной фазы в модели Bernevig–Hughes–Zhang (BHZ) [4], описывающей энергетическую структуру квантовой ямы HgTe (см. также [5, 6]). Нетривиальная топология основного состояния проявляется, в частности, в том, что в геометрии открытых границ в такой системе реализуются краевые состояния.

В связи со сказанным представляется актуальным следующий вопрос. Если индуцирование ЭПП приводит к перемешиванию состояний, формально такому же, как и перемешивание, обусловленное затравочным параметром межзонной гибридизации модели BHZ, то возможно ли появление топологически нетривиальных фаз и краевых состояний в ЭД со спин-орбитальным взаимодействием?

Ниже впервые показано, что при решении этой задачи особое значение приобретает зависящее от спиновых степеней свободы обменное взаимодействие. Оказалось, что оно, нарушая классификацию экситонных фаз, индуцируемых взаимодействием типа плотность–плотность, приводит к основному состоянию системы, в котором появляются краевые состояния.

Заметим, что вопрос о роли кулоновского взаимодействия в проблеме реализации топологических фаз и краевых состояний в твердотельных системах не является новым. С ним связана как классификация топологических материалов [7], так и проблематика реализации майорановских связанных состояний [8, 9], а также развитие ренормгрупповых методов для матрицы плотности [10] с целью рассмотрения режима сильных корреляций.

2. Экситонный диэлектрик со спин-орбитальным взаимодействием. Рассмотрение фаз ЭД, индуцированных кулоновским взаимодействием фермионов в системе со спин-орбитальным взаимодействием, проведем на основе модели BHZ [4].

Как показано в [6], эффекты кристаллического поля, релятивистские поправки и спин-орбитальное взаимодействие приводят к тому, что из шести $5p$ -спин-орбиталей Te важную роль в формировании зонной структуры играют только две: $|l_z = 1, \sigma = +1/2\rangle$ и $|l_z = -1, \sigma = -1/2\rangle$, где $|l_z$ – проекция орбитального момента, σ – проекция спина. Эти состояния образуют актуальный базис для описания валентной зоны и ее перестройки под влиянием других полей.

¹⁾e-mail: vvv@iph.krasn.ru

Зона проводимости формируется из $6s$ -состояний атомов Hg, которые по симметричным причинам остаются без изменений.

В представлении вторичного квантования затравочный гамильтониан записывается в виде

$$H_0 = \sum_{g\sigma} (\varepsilon^b - \mu) b_{g\sigma}^+ b_{g\sigma} + \sum_{gg'\sigma} t_{gg'}^b b_{g\sigma}^+ b_{g'\sigma} + \sum_{f\sigma} (\varepsilon^a - \mu) a_{f\sigma}^+ a_{f\sigma} + \sum_{ff'\sigma} t_{ff'}^a a_{f\sigma}^+ a_{f'\sigma}, \quad (1)$$

где оператор $a_{f\sigma}$ ($b_{g\sigma}$) уничтожает электрон с проекцией спина σ , находящийся на узле f (g). На узлах f (g), принадлежащих подрешетке F (G), расположены атомы Hg (Te). Энергия одноузельного состояния зоны проводимости (валентной зоны) обозначена посредством ε^a (ε^b), $t_{ff'}^a$ ($t_{gg'}^b$) – параметры перескоков электронов между узлами f' и f (g' и g), μ – химпотенциал системы.

Ковалентное смешивание электронных s - и p -состояний атомов Hg и Te описывается оператором

$$\hat{T}_{sp} = \sum_{g\delta\sigma} t_{sp}^\sigma(\delta) a_{g+\delta,\sigma}^+ b_{g\sigma} + \text{h.c.} \quad (2)$$

Зависимость матричного элемента $t_{sp}^\sigma(\delta)$ от σ и вектора δ , соединяющего атом Hg с одним из четырех ближайших атомов Te, представима в виде

$$t_{sp}^\sigma(\delta_l) = -t_{sp}(i\eta_\sigma)^l, \quad \eta_\sigma = 2\sigma, \quad l = 1, 2, 3, 4. \quad (3)$$

При записи этой формулы принимались во внимание фазы атомных орбиталей и спин-орбитальное взаимодействие [6]. Существенная особенность $t_{sp}^\sigma(\delta)$ связана с тем, что при преобразованиях из точечной группы D_4 эти величины преобразуются по ее двумерному неприводимому представлению.

Оператор, соответствующий междуузельному кулоновскому взаимодействию электронов, находящихся на соседних атомах Te и Hg, задается выражением

$$\hat{V} = \sum_{g\delta\sigma\sigma'} V a_{g+\delta,\sigma}^+ b_{g\sigma}^+ b_{g\sigma'} a_{g+\delta,\sigma'} + \sum_{g\delta\sigma\sigma'} J_{\sigma\sigma'}(\delta) a_{g+\delta,\sigma}^+ b_{g\sigma}^+ a_{g+\delta,\sigma'} b_{g\sigma'}, \quad (4)$$

в котором первое слагаемое соответствует взаимодействию типа плотность-плотность с параметром

$$V = \int d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 |\psi_s(r_{1x})|^2 \cdot v_{12} \cdot u_1^\dagger |R_p(r_2)|^2, \quad (5)$$

где $r_{1x} = \sqrt{(x_1 - 1/2)^2 + y_1^2 + z_1^2}$,

$$v_{12} = \frac{e^2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|}, \quad u_1^\dagger = \frac{x_1^2 + y_1^2}{r_1^2}, \quad r_i = |\mathbf{r}_i|,$$

ψ_s – $6s$ -орбиталь атома Hg, а R_p – радиальная часть $5p$ -орбитали Te.

Второе слагаемое в (4) обусловлено обменным вкладом. Для дальнейшего важна специфическая зависимость обменного параметра от направления связи δ и спиновых переменных σ и σ'

$$J_{\sigma\sigma'}(\delta) = \begin{cases} \eta_\sigma \eta_{\sigma'} J_1 + J_2, & \delta = \delta_1, \delta_3, \\ \eta_\sigma \eta_{\sigma'} J_2 + J_1, & \delta = \delta_2, \delta_4. \end{cases} \quad (6)$$

Величины J_1 и J_2 выражаются через интегралы

$$J_1 = \int d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 u_s(1_x, 2_x) \cdot v_{12} \cdot \frac{x_1 x_2}{r_1 r_2} u_p(1, 2), \\ J_2 = \int d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 u_s(1_x, 2_x) \cdot v_{12} \cdot \frac{y_1 y_2}{r_1 r_2} u_p(1, 2), \quad (7)$$

где

$$u_s(1_x, 2_x) = \psi_s(r_{1x}) \psi_s(r_{2x}), \quad u_p(1, 2) = R_p(r_1) R_p(r_2).$$

3. Уравнение самосогласования для экситонного параметра порядка. При рассмотрении свойств ЭД со спин-орбитальным взаимодействием положим $t_{sp} = 0$ и воспользуемся теорией, изложенной в оригинальных работах [1, 2] (см. также [11]).

Опуская детали, запишем интегральное уравнение самосогласования для ЭПП

$$\Delta_\sigma(k) = \frac{2\tilde{V}}{N} \sum_q \Phi(k, q) \frac{\Delta_\sigma(q)}{\nu_q} L_q(T) - \frac{2J}{N} \sum_q \Psi(k, q) \frac{\Delta_{\bar{\sigma}}(q)}{\nu_q} L_q(T), \quad (8)$$

где ядра и параметры определяются выражениями

$$\Phi(k, q) = \cos \frac{k_1 - q_1}{2} \cos \frac{k_2 - q_2}{2}, \quad \tilde{V} = V - J_1 - J_2, \\ \Psi(k, q) = \sin \frac{k_1 - q_1}{2} \sin \frac{k_2 - q_2}{2}, \quad J = J_1 - J_2. \quad (9)$$

При выводе уравнения самосогласования учтено, что

$$\Delta_\sigma(k) = \sum_\delta \Delta_\sigma(\delta) \exp(-ik\delta),$$

$$\Delta_\sigma(\delta) = \tilde{V} \langle b_{g\sigma}^+ a_{g+\delta,\sigma} \rangle - J_{\sigma\bar{\sigma}} \langle b_{g\bar{\sigma}}^+ a_{g+\delta,\bar{\sigma}} \rangle. \quad (10)$$

$L_q(T)$ выражается через функции Ферми–Дирака и энергетический спектр

$$L_q(T) = f(E_q^-/T) - f(E_q^+/T), \quad f(x) = (\exp(x) + 1)^{-1}, \\ E_q^\pm = \frac{\varepsilon_q^a + \varepsilon_q^b}{2} \pm \nu_q, \quad \nu_q = \sqrt{(\varepsilon_q^a - \varepsilon_q^b)^2/4 + |\Delta_\sigma(q)|^2}, \\ \varepsilon_q^{a,b} = \varepsilon^{a,b} + 2t_{a,b}(\cos q_1 + \cos q_2).$$

Из уравнения (8) следует, что обменный вклад приводит к связыванию параметров $\Delta_\uparrow(k)$ и $\Delta_\downarrow(k)$. При

этом их зависимость от проекции спина σ такова, что $|\Delta_\sigma(k)|$ не зависит от σ . Как будет показано ниже, важность обменного взаимодействия связана с индуцированием особого состояния ЭД, когда в открытой геометрии системы реализуются краевые состояния.

В дальнейшем удобно классифицировать экситонные фазы по их симметричным свойствам для случая $J_1 = J_2$ ($J = 0$).

4. Симметрия фаз ЭД при $J = 0$. При построении квазиимпульсной зависимости $\Delta_\sigma(k)$ воспользуемся свойствами симметрии квадратной решетки, аналогично тому, как это делалось в [12, 13] при нахождении кирального параметра порядка для треугольной решетки.

Используя значения характеров неприводимых представлений группы D_4 [14], нетрудно получить, что в случае, когда кулоновское взаимодействие учитывается только между электронами, находящимися на ближайших узлах, имеются три типа базисных функций (БФ):

$$\begin{aligned} \varphi_s(k) &= \cos(k_1/2) \cos(k_2/2), \\ \varphi_d(k) &= \sin(k_1/2) \sin(k_2/2), \\ \varphi_{p\sigma}(k) &= \eta_\sigma \sin \frac{k_1 + k_2}{2} - i \sin \frac{k_1 - k_2}{2}, \quad \sigma = \pm 1/2. \end{aligned} \quad (11)$$

Первая из этих функций соответствует единичному представлению и характеризует s -тип симметрии. В этом случае

$$\Delta_s(k) = \Delta_s \varphi_s(k), \quad (12)$$

а амплитуда Δ_s находится из решения уравнения

$$1 = \frac{V - 2J_1}{2N} \sum_k \frac{1 + 2 \cos k_1 + \cos k_1 \cos k_2}{\nu_{sk}} L_{sk}(T). \quad (13)$$

Здесь и ниже появление дополнительных индексов s, d, p у функций ν_k и $L_k(T)$ связано с тем, что входящий в эти функции ЭПП берется в форме, соответствующей s -, d -, p -типу симметрии.

Для второго одномерного представления, отвечающего d -типу симметрии, ЭПП

$$\Delta_d(k) = \Delta_d \varphi_d(k), \quad (14)$$

является решением (8), если амплитуда Δ_d удовлетворяет уравнению

$$1 = \frac{V - 2J_1}{2N} \sum_k \frac{1 - 2 \cos k_1 + \cos k_1 \cos k_2}{\nu_{dk}} L_{dk}(T). \quad (15)$$

Решение уравнения (8), соответствующее двумерному представлению группы D_4 с p -типом симметрии, имеет комплексный вид с фазой, зависящей от проекции спина

$$\Delta_{p\sigma}(k) = \Delta_p \cdot \varphi_{p\sigma}(k). \quad (16)$$

При этом амплитуда Δ_p находится из решения уравнения самосогласования

$$1 = \frac{V - 2J_1}{2N} \sum_k \frac{1 - \cos k_1 \cos k_2}{\nu_{pk}} L_{pk}(T). \quad (17)$$

5. Топологическая классификация экситонных фаз и краевые состояния при $J = 0$. Воспользуемся дополнительной классификацией состояний экситонного диэлектрика по значению топологического инварианта – числа Черна [15]:

$$Q^{(\lambda)} = -\frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} dk_1 \int_{-\pi}^{\pi} dk_2 B^{(\lambda)}(k_1, k_2). \quad (18)$$

Входящая в это определение кривизна Берри $B^{(\lambda)}(k_1, k_2)$ для квантового состояния, описываемого волновой функцией Блоха $\psi_{\lambda k}$, выражается хорошо известным образом:

$$B^{(\lambda)}(k_1, k_2) = \frac{\partial A_2^{(\lambda)}(k_1, k_2)}{\partial k_1} - \frac{\partial A_1^{(\lambda)}(k_1, k_2)}{\partial k_2} \quad (19)$$

через средние по этому квантовому состоянию

$$A_j^{(\lambda)}(k_1, k_2) = -i \langle \psi_{\lambda k} | \frac{\partial}{\partial k_j} | \psi_{\lambda k} \rangle, \quad j = 1, 2. \quad (20)$$

Для фаз экситонного диэлектрика с s - и d -типом симметрии ЭПП вычисления показывают, что $Q^{(s)} = 0$ и $Q^{(d)} = 0$ при всех значениях параметров системы. При этом в геометрии открытых границ краевые состояния не возникают.

Иная ситуация имеет место для экситонного диэлектрика с p -типом симметрии параметра порядка. В этом случае вычисление топологического инварианта $Q^{(p)}$ может быть сведено к нахождению интеграла по двумерной зоне Бриллюэна

$$Q^{(p)} = -\frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} dk_1 dk_2 \left(\frac{\eta_\sigma \Delta_p^2}{4\nu_{pk}^3} \right) \Phi_Q^{(p)}(k), \quad (21)$$

где функция

$$\begin{aligned} \Phi_Q^{(p)}(k) &= \left\{ (t_a - t_b)(\sin^2 k_1 + \sin^2 k_2) + \right. \\ &\left. + \frac{\varepsilon_k^a - \varepsilon_k^b}{1 - \cos k_1 \cos k_2} \frac{\cos k_1 \sin^2 k_2 + \cos k_2 \sin^2 k_1}{4} \right\} \quad (22) \end{aligned}$$

получена при использовании квазиимпульсной зависимости ЭПП для p -типа симметрии (16).

В инвертированном режиме, когда реализуется нетривиальное решение для ЭПП, получаем, что $Q^{(p)} = 1$, если $\sigma = +1/2$ и $Q^{(p)} = -1$, если $\sigma = -1/2$.

Это означает, что p -фаза экситонного диэлектрика является топологически нетривиальной. Заметим,

что для этой фазы квазиимпульсная зависимость $\Delta_{p\sigma}(k)$ с точностью до знака совпадает с зависимостью интенсивности ковалентного смешивания для модели ВНЗ

$$t_{sp}(k) = -2t_{sp}\varphi_{p\sigma}(k). \quad (23)$$

Поскольку значение числа Черна соответствует нетривиальной топологии p -фазы, то следует ожидать, что в этой фазе при открытых граничных условиях будут реализовываться краевые состояния. Для проверки этого утверждения был вычислен энергетический спектр фермиевских состояний при $T = 0$ в геометрии цилиндра. Результаты расчета показаны на рис. 1. Параметры выбраны так, чтобы затравоч-

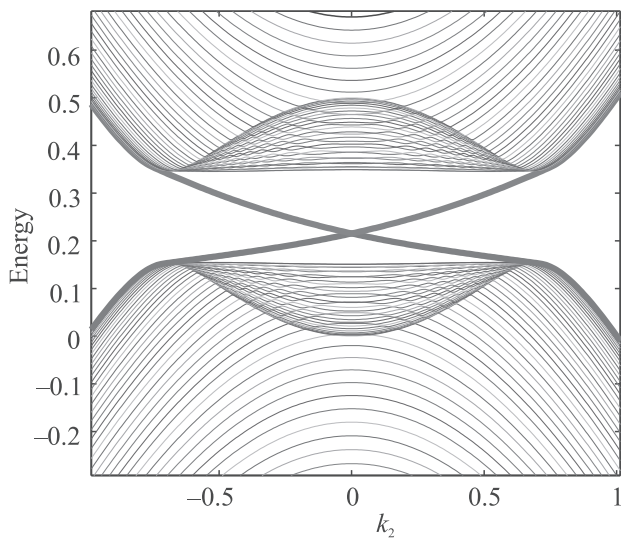


Рис. 1. (Цветной онлайн) Спектр энергий фермиевских состояний ЭД с $p + ip$ -симметрией ЭПП при открытых границах (геометрия цилиндра). Значения параметров: $\tilde{V} = 2.5$, $t_a = -0.5$, $t_b = 0.5$, $\varepsilon_a = -4t_a$, $\varepsilon_b = 0.5 - 4t_b$

ная структура энергетических зон соответствовала инвертированному случаю. Самосогласованное значение амплитуды $\Delta_p = 0.19$.

Из структуры энергетического спектра рис. 1 следует, что в рассматриваемой системе из-за краевых эффектов, кроме обычных объемных состояний появились состояния, энергии которых находятся внутри запрещенной зоны. Среди них состояния со значениями квазиимпульса k_2 , попадающими в окрестность точки пересечения внутрищелевых ветвей, являются краевыми в том смысле, что для них большая часть веса волновой функции находится в пределах трех слоев, примыкающих к границе. Принимая во внимание значение числа Черна, приходим к заключению, что фаза ЭД с p -типом симметрии ЭПП яв-

ляется одновременно и фазой топологического изолятора.

Следует подчеркнуть, что краевые состояния в ЭД реализуются только в том случае, когда ЭПП соответствует двумерному представлению группы D_4 . Если провести расчеты энергетического спектра экситонного диэлектрика с s - и d -типами симметрии ЭПП, то краевых состояний не возникает. Для s -типа симметрии структура энергетического спектра показана на рис. 2. Качественно то же самое реализуется и для d -симметрии ЭПП. Это полностью коррелирует с полученными значениями числа Черна для этих фаз.

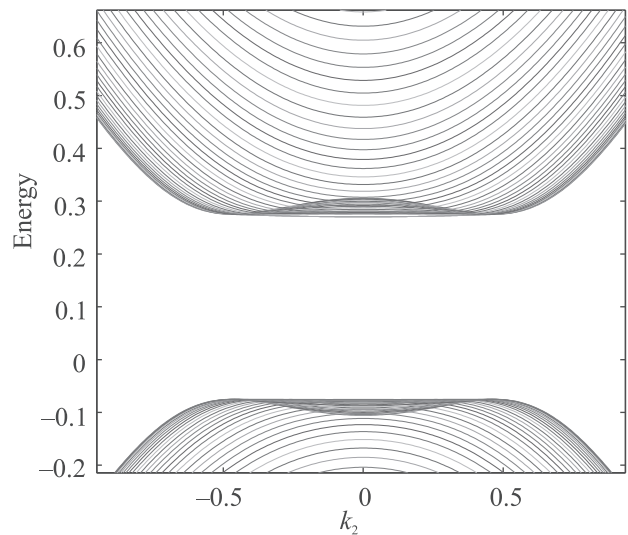


Рис. 2. (Цветной онлайн) Спектр энергий фермиевских состояний ЭД с s -симметрией ЭПП при открытых границах (геометрия цилиндра) $V = 1$, остальные параметры те же, что и на рис. 1

Для ответа на вопрос, будет ли экситонный диэлектрик одновременно и топологическим изолятором, определим, какая фаза является стабильной, а какие две другие метастабильными. С этой целью проведем вычисление зависимостей амплитуд параметров порядка от интенсивности эффективного параметра кулоновского взаимодействия. Результаты показаны на рис. 3.

Видно, что из трех возможных фаз наибольшим значением амплитуды ЭПП обладает s -фаза. Поскольку энергия конденсации экситонной фазы тем больше, чем больше эта амплитуда (прямые расчеты подтверждают это правило), то s -фаза является стабильной, а две другие – метастабильны. Следовательно, при $J = 0$ переход системы в экситонную фазу не будет приводить к формированию краевых состояний в геометрии открытых границ.

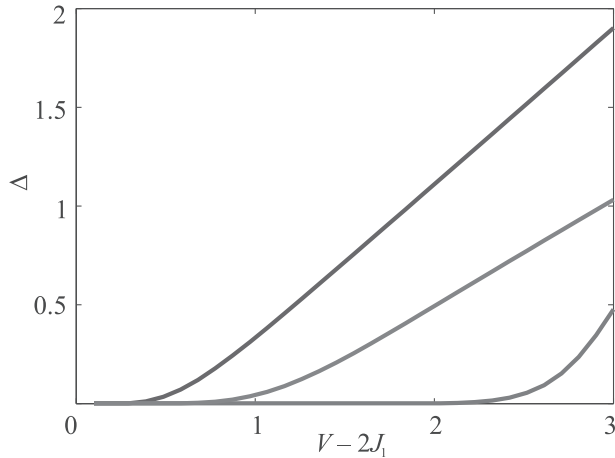


Рис. 3. (Цветной онлайн) Зависимости амплитуд $\Delta_s, \Delta_p, \Delta_d$ экситонных параметров порядка от $\tilde{V} = V - 2J_1$ (при $J_1 = J_2$). Верхняя кривая соответствует s -типу симметрии, средняя – p -симметрии, нижняя – d -симметрии

6. Краевые состояния ЭД для $J_1 \neq J_2$. При $J_1 \neq J_2$ обменное слагаемое в уравнении самосогласования для ЭПП качественно меняет характер основного состояния рассматриваемого двухзонного полупроводника со спин-орбитальным взаимодействием. Остановимся на этом важном вопросе.

Прежде всего отметим, что p -фаза ЭД, по-прежнему, остается решением уравнения (8). Теми же уравнениями (16) и (17) определяются ЭПП $\Delta_{p\sigma}(k)$ и его амплитуда Δ_p .

Иначе обстоит дело с s - и d -фазами ЭД. При $J_1 \neq J_2$ каждая из этих фаз по отдельности перестает быть решением.

В рассматриваемом случае качественно новый тип решения уравнения (8) имеет вид суперпозиции

$$\Delta_{sd,\sigma}(k) = \Delta_s(i + \eta_\sigma)\varphi_s(k) + \Delta_d(i - \eta_\sigma)\varphi_d(k). \quad (24)$$

Амплитуды Δ_s и Δ_d удовлетворяют системе уравнений

$$\begin{aligned} (1 - \tilde{V}C_s)\Delta_s + JC_d\Delta_d &= 0, \\ JC_s\Delta_s + (1 - \tilde{V}C_d)\Delta_d &= 0, \end{aligned} \quad (25)$$

в которой

$$\begin{aligned} C_s &= \frac{1}{2N} \sum_k \frac{1 + 2 \cos k_1 + \cos k_1 \cos k_2}{\nu_{sd}(k)} L_{sd}(k), \\ C_d &= \frac{1}{2N} \sum_k \frac{1 - 2 \cos k_1 + \cos k_1 \cos k_2}{\nu_{sd}(k)} L_{sd}(k). \end{aligned} \quad (26)$$

Решение этих уравнений позволяет определить характеристики ЭД с комбинированной $s + d$ -симметрией ЭПП. Отметим важные свойства такого ЭД.

Число Черна для $s + d$ -фазы экситонного диэлектрика $Q^{(s+d)} = 0$. Это, казалось бы, и не удивительно, поскольку в рассматриваемой фазе ЭПП записывается в виде суперпозиции базисных функций, для которых по отдельности экситонные фазы характеризовались нулевыми значениями чисел Черна.

Нетривиальность ситуации с $s + d$ -фазой ЭД проявляется в том, что расчет энергетического спектра при открытой геометрии границ показывает наличие состояний, энергии которых находятся внутри запрещенной зоны объемного спектра (см. рис. 4). При этом состояния, значения энергии которых располагаются достаточно глубоко в запрещенной зоне являются краевыми (по тому же критерию, что и ранее).

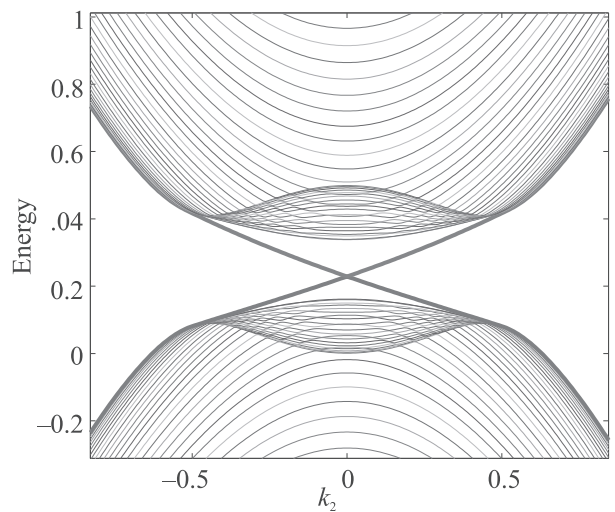


Рис. 4. (Цветной онлайн) Спектр энергий экситонного диэлектрика с комбинированной $s + d$ -симметрией ЭПП при открытых границах (геометрия цилиндра) $J = 1$, $t_a = -0.5$, $t_b = 0.5$, остальные параметры те же, что и на рис. 1

Существенно, что $s + d$ -фаза экситонного диэлектрика является основным состоянием рассматриваемого полупроводника. Это следует из сравнения энергии конденсации $s + d$ -фазы с соответствующей энергией для p -фазы (см. рис. 5). Видно, что при всех значениях параметра J_1 энергия конденсации $s + d$ -фазы значительно превосходит энергию конденсации p -фазы.

Из приведенных результатов следует, что обменное взаимодействие фермионов в двухзонном полупроводнике со спин-орбитальным взаимодействием в условиях инвертированности зонной структуры может индуцировать особое состояние экситонного диэлектрика, в котором при открытой геометрии реализуются краевые состояния, тогда как число Черна для такой фазы имеет нулевое значение.

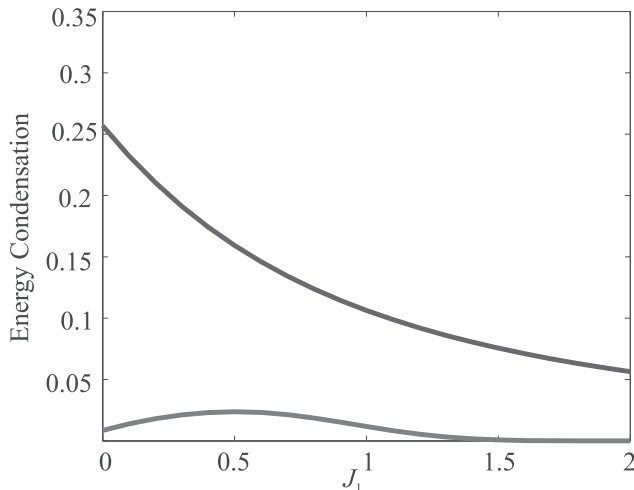


Рис. 5. (Цветной онлайн) Зависимости энергий конденсации $s + d$ -фазы (верхняя кривая) и p -фазы (нижняя кривая) экситонного диэлектрика при разных значениях параметра J_1 . При расчетах выбирались следующие значения параметров модели: $t_a = -0.5$, $t_b = 0.5$, $\epsilon_a = -4$, $\epsilon_b = 1 - 4t_b$, $V = 3.5$, $J_2 = 0.5$

7. Заключение. Впервые изучены симметричные и топологические свойства ЭД со спин-орбитальным взаимодействием. Теоретическое рассмотрение такого ЭД проведено на примере энергетической структуры квантовой ямы HgTe, описываемой моделью ВNZ.

Показано, что при учете спин-орбитальной связи, кулоновское и обменное взаимодействия фермионов, индуцируя в условиях инвертированности зонной структуры состояние ЭД, по-разному влияют на его характеристики.

На основе неприводимых представлений группы D_4 проведена симметричная классификация фаз ЭД. Для топологической классификации этих фаз использовалось число Черна.

Показано, что без учета обменного взаимодействия решениям интегрального уравнения самосогласования соответствуют три фазы. Для них ЭПП характеризуется s -, d - и p -типом симметрии. В p -фазе ЭПП преобразуется по двумерному представлению группы D_4 , а значение топологического инварианта соответствует нетривиальной топологии. В геометрии открытых границ в такой фазе существуют краевые состояния. Однако, эта фаза являлась метастабильной, а в качестве основного состояния выступала s -фаза с тривиальной топологией.

Показано, что включение обменного взаимодействия приводит к качественному изменению свойств ЭД. В этом случае основным состоянием является смешанная $s + d$ -фаза, для которой ЭПП описывается суперпозицией s - и d -базисных функций с коэффициентами, зависящими от проекции спина. Важная особенность смешанной $s + d$ -фазы заключается в том, что для нее топологический инвариант имеет нулевое значение, тогда как в геометрии открытых границ реализуются краевые состояния.

Автор выражает благодарность А. О. Злотникову, А. Д. Федосееву и М. С. Шустину за полезное обсуждение результатов работы и замечания.

Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант # 19-02-00348).

Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант # 19-02-00348).

1. Л. В. Келдыш, Ю. В. Копяев, ФТТ **6**, 2791 (1964).
2. А. Н. Козлов, Л. А. Максимов, ЖЭТФ **48**, 1184 (1965).
3. J. de Cloiseaux, J. Phys. Chem. Solids **26**, 259 (1965).
4. B. A. Bernevig, T. L. Hughes, and S.-C. Zhang, Science **314**, 1757 (2006).
5. L. Fu and C. L. Kane, Phys. Rev. B **76**, 045302 (2007).
6. X. Dang, J. D. Burton, A. Kalitsov, J. P. Velev, and E. Y. Tsymbal, Phys. Rev. B **90**, 155307 (2014).
7. Ch.-K. Chiu, J. C. Y. Teo, A. P. Snyder, and S. Ryu, Rev. Mod. Phys. **88**, 035005 (2016).
8. В. В. Вальков, В. А. Мицкан, М. С. Шустин, Письма в ЖЭТФ **106**, 762 (2017).
9. В. В. Вальков, А. О. Злотников, Письма в ЖЭТФ **109**, 769 (2019).
10. S. V. Aksenov, A. O. Zlotnikov, and M. S. Shustin, Phys. Rev. B **101**, 125431 (2020).
11. Yu. E. Lozovik and V. I. Yudson, Sov. Phys. JETP **44**, 389 (1976).
12. S. Zhou and Z. Wang, Phys. Rev. Lett. **100**, 217002 (2008).
13. В. В. Вальков, Т. А. Валькова, В. А. Мицкан, Письма в ЖЭТФ **102**, 399 (2015).
14. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Квантовая механика*, Физматлит, М. (2001).
15. D. J. Thouless, M. Kohmoto, M. P. Nightingale, and M. den Nijs, Phys. Rev. Lett. **49**, 405 (1982).