

ЗАРЯДОВЫЙ d -ВОЛНОВОЙ ТОПОЛОГИЧЕСКИЙ ДИЭЛЕКТРИК

Ю. В. Конаев, В. В. Капаев, В. И. Белявский*

Физический институт им. П. Н. Лебедева Российской академии наук
119991, Москва, Россия

Поступила в редакцию 6 марта 2013 г.

Исследовано образование конденсата синглетных электрон-дырочных пар в двумерной решетке металла с нестингом контура Ферми. Численно получено решение уравнения самосогласования для диэлектрического параметра порядка в зависимости от соотношения между константами связи в s - и d -волновых каналах электрон-дырочного спаривания. Найдены решения с чистой орбитальной симметрией s - и d -типов, а также решения со смешанной $s + d$ -симметрией. Показано, что в широком диапазоне значений s - и d -волновых констант связи двумерный диэлектрический порядок с орбитальной симметрией $d_{x^2-y^2}$ может выигрывать конкуренцию с чистыми упорядоченными s - и d_{xy} -состояниями и смешанными $s + d$ -состояниями. Нарушение симметрии по отношению к обращению времени при сформировавшемся вещественном порядке с симметрией $d_{x^2-y^2}$ может приводить к возникновению мнимой компоненты параметра порядка с симметрией d_{xy} и установлению топологически нетривиального $d + id$ -волнового порядка, подобного состоянию квантового эффекта Холла без внешнего магнитного поля.

DOI: 10.7868/S0044451013100143

1. ВВЕДЕНИЕ

Нарушение симметрии по отношению к обращению времени (TR) из-за внутреннего магнитного упорядочения в двумерном (2D) кристалле может приводить к состоянию, в котором возбуждения в объеме отделены от основного состояния запрещенной зоной, а с границей связаны топологически защищенные (устойчивые к рассеянию) краевые токи заряда, как в случае квантового эффекта Холла, но в отсутствие внешнего магнитного поля [1]. В случае квантового спинового эффекта Холла TR-симметрия не нарушается, и вместо краевых токов заряда могут возникать топологически защищенные краевые токи спина [2, 3]. В отличие от таких спиновых топологических диэлектриков (STI), структуры, в которых в отсутствие внешнего магнитного поля мог бы реализоваться обычный квантовый эффект Холла, естественно назвать зарядовыми топологическими диэлектриками (CTI).

Запрещенная зона в CTI может возникать благодаря экситонному эффекту в результате конденсации электрон-дырочных пар (ЕНП) при фазовом

переходе металл–диэлектрик [4]. Переход в состояние экситонного диэлектрика возможен уже в пределе слабой связи [4], если электронный спектр однозонного металла удовлетворяет условию нестинга $\varepsilon(\mathbf{p}) = -\varepsilon(\mathbf{p} + \mathbf{Q})$ хотя бы на части поверхности Ферми. Аналогичное условие в двухзонном полуметалле может выполняться и при $\mathbf{Q} = 0$ в случае совпадения положений экстремумов электронной и дырочной зон. В металлах и полуметаллах с нестингом поверхности Ферми возникают разнообразные упорядоченные состояния в виде волн плотности заряда (CDW) и спина (SDW), а также волн плотности тока заряда и тока спина [5]. Импульс нестинга \mathbf{Q} определяет пространственную модуляцию волны плотности. В экситонном диэлектрике s -волновому конденсату ЕНП (орбитальный угловой момент пары $l = 0$) при $\mathbf{Q} = 0$ соответствует сегнетоэлектрическое состояние [6]; s -волновые конденсаты синглетных и триплетных ЕНП с $\mathbf{Q} \neq 0$ проявляются соответственно как CDW и SDW. CDW реализуется, например, в слоистых дихалькогенидах переходных металлов [7, 8] и в узкозонных полупроводниках группы A_4B_6 [9], а SDW реализует основное состояние антиферромагнетиков типа хрома и его сплавов [10].

Известно уже довольно много систем, проявля-

*E-mail: vib45@mail.ru

ющих себя как STI [11–16], тогда как об открытии STI до сих пор не сообщалось. Одно из направлений поиска STI связано с возможностью реализации основного состояния системы с орбитальным угловым моментом $l \neq 0$ [17, 18]. Подобное диэлектрическое состояние в виде волны плотности тока заряда с d -волновой ($l = 2$) симметрией (DDW) в квадратной кристаллической решетке связывается, например, с псевдощелью, наблюдаемой в широком интервале температур в слоистых купратных сверхпроводниках при низком уровне легирования [19, 20]. В случае $l \neq 0$ параметр порядка обращается в нуль в отдельных точках контура Ферми (линии, в которую в $2D$ -системе вырождается поверхность Ферми), что соответствует состоянию полуметалла.

При $l = 2$ в $2D$ -кристалле допустимо сосуществование двух состояний с параметрами порядка $D_1(\mathbf{k})$ и $D_2(\mathbf{k})$, которые имеют соответственно орбитальные симметрии $d_{x^2-y^2}$ и d_{xy} . Такое сосуществование может быть результатом последовательных фазовых переходов [21]. В квадратной решетке параметр порядка $D_1(\mathbf{k})$ с симметрией $d_{x^2-y^2}$ имеет нули на диагоналях $2D$ -зоны Бриллюэна, тогда как параметр порядка $D_2(\mathbf{k})$ с симметрией d_{xy} обращается в нуль на линиях, параллельных сторонам зоны Бриллюэна. Орторомбические искажения квадратной решетки исключают повороты на угол $\pi/2$ из числа элементов симметрии, а повороты на π не приводят к изменению знака параметра порядка, который уже не соответствует определенному орбитальному угловому моменту и может быть представлен суперпозицией состояний с разными l .

При нарушении TR-симметрии относительная разность фаз сосуществующих $d_{x^2-y^2}$ - и d_{xy} -состояний составляет $\pi/2$, и абсолютная величина параметра порядка, $D(\mathbf{k}) = \sqrt{D_1^2(\mathbf{k}) + D_2^2(\mathbf{k})}$, нигде на контуре Ферми не обращается в нуль [22]. В такой системе с орбитальной $d + id$ -симметрией могут циркулировать топологически защищенные краевые токи, как и в случае квантового эффекта Холла во внешнем магнитном поле [23, 24].

В настоящей работе в рамках модели экситонного диэлектрика исследован переход электронной $2D$ -системы (двухзонного полуметалла при равных концентрациях электронов и дырок и однозонного металла при половинном заполнении зоны проводимости) с нарушенной TR-симметрией и идеальным нестингом контура Ферми в состояние зарядового топологического диэлектрика с орбитальной симметрией $d + id$.

2. ОРБИТАЛЬНАЯ СТРУКТУРА ДИЭЛЕКТРИЧЕСКОГО СОСТОЯНИЯ

В отличие от сверхпроводящего конденсата пар частиц [25], орбитальная симметрия конденсата ЕНР никак не связана со спиновой структурой диэлектрического параметра порядка. Аномальное среднее, определяющее синглетный диэлектрический порядок волны плотности с импульсом \mathbf{Q} в изотропной среде, имеет вид [18]

$$\langle \hat{c}_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}\alpha}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k}\beta} \rangle = \Phi^{(l)}(\mathbf{k}; \mathbf{Q}) \delta_{\alpha\beta}, \quad (1)$$

где $\hat{c}_{\mathbf{k}\alpha}^\dagger$ ($\hat{c}_{\mathbf{k}\alpha}$) — оператор рождения (уничтожения) частицы с квазиимпульсом \mathbf{k} и проекцией спина α , $\Phi^{(l)}(\mathbf{k}; \mathbf{Q})$ — некоторая базисная функция l -го неприводимого представления группы трехмерных вращений, определяющая орбитальную симметрию параметра порядка: значения орбитального углового момента $l = 0, 1, 2, \dots$ относятся соответственно к s, p, d, \dots орбитальной симметрии.

При произвольных импульсах частицы и дырки, \mathbf{k} и \mathbf{k}' , среднее от произведения фермиевских операторов может быть записано как

$$\langle \hat{c}_{\mathbf{k}'\alpha}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k}\beta} \rangle = \frac{1}{2} f(\mathbf{k}) (\delta_{\mathbf{k}', \mathbf{k}+\mathbf{Q}} + \delta_{\mathbf{k}', \mathbf{k}-\mathbf{Q}}) \delta_{\alpha\beta}, \quad (2)$$

где функция $f(\mathbf{k})$ определяет орбитальную симметрию ЕНР (так, при $l = 0$ можно выбрать $f(\mathbf{k}) = \text{const}$; симметрии $d_{x^2-y^2}$ соответствует, например, $f(\mathbf{k}) = \cos k_x - \cos k_y$, где k_x, k_y — компоненты квазиволнового $2D$ -вектора в единицах обратного межатомного расстояния a^{-1}). Сумма дельта-символов приводит к стоячей одномерной волне плотности в реальном пространстве (суперпозиции двух бегущих в противоположных направлениях волн с эквивалентными волновыми векторами $\pm \mathbf{Q}$):

$$\langle \hat{c}_{\mathbf{n}'\alpha}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{n}\beta} \rangle = f(\mathbf{n}', \mathbf{n}) \cdot \cos(\mathbf{Q} \cdot \mathbf{n}') \delta_{\alpha\beta}. \quad (3)$$

Здесь \mathbf{n}' и \mathbf{n} — векторы, задающие положения узлов кристаллической решетки, а функция

$$f(\mathbf{n}', \mathbf{n}) = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} f(\mathbf{k}) \exp[i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{n} - \mathbf{n}')], \quad (4)$$

где N — число элементарных ячеек решетки, отражает орбитальную симметрию упорядочения в реальном пространстве. Подобно (3) могут быть построены суперпозиции волн и с другими волновыми векторами, эквивалентными вектору \mathbf{Q} , который характеризует движение центра масс ЕНР [26], при той же самой амплитудной функции (4), отражающей особенности относительного движения частиц, составляющих ЕНР.

В кристалле упорядоченные состояния классифицируются по неприводимым представлениям группы точечной симметрии, поэтому ЕНР, вообще говоря, не имеет определенного значения орбитального углового момента. Однако базисные функции неприводимых представлений группы точечной симметрии могут быть представлены линейными комбинациями сферических гармоник с разными l .

Множителем $f(\mathbf{k})$ определяется комплексный параметр порядка $D(\mathbf{k}) = D_1(\mathbf{k}) + iD_2(\mathbf{k})$, который находится из уравнения самосогласования

$$D(\mathbf{k}) = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}'} \frac{U(\mathbf{k}, \mathbf{k}')D(\mathbf{k}')}{\sqrt{\epsilon_-^2(\mathbf{k}') + |D(\mathbf{k}')|^2}}, \quad (5)$$

где $U(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$ — энергия межэлектронного взаимодействия, а

$$2\epsilon_-(\mathbf{k}) = [\epsilon(\mathbf{k}) - \epsilon(\mathbf{k} + \mathbf{Q})] \quad (6)$$

есть кинетическая энергия ЕНР. Здесь $\epsilon(\mathbf{k})$ — энергия электрона в зоне проводимости родительского металла, отсчитанная от химического потенциала. В случае двухзонного полуметалла

$$2\epsilon_-(\mathbf{k}) = [\epsilon_1(\mathbf{k}) - \epsilon_2(\mathbf{k} + \mathbf{Q})], \quad (7)$$

где $\epsilon_1(\mathbf{k})$ и $\epsilon_2(\mathbf{k})$ — энергии электрона соответственно в зоне проводимости и валентной зоне. Суммирование в (5) выполняется при условиях $\epsilon_1(\mathbf{k}') > \mu$, $\epsilon_2(\mathbf{k}' + \mathbf{Q}) < \mu$, отражающих то обстоятельство, что спаривающиеся электрон и дырка находятся, соответственно, выше и ниже уровня Ферми (в случае однозонного металла индексы зон в неравенствах должны быть опущены).

Для вещественной и мнимой компонент параметра порядка из формулы (5) получается система двух связанных уравнений, решение которой определяется особенностями взаимодействия между электронами и формой контура Ферми. В общем случае импульс нестинга \mathbf{Q} , которому соответствуют макроскопические аномальные средние $\langle \hat{c}_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}\alpha}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k}\beta} \rangle$, должен определяться из условия минимума свободной энергии. При идеальном нестинге \mathbf{Q} соединяет параллельные друг другу прямолинейные сегменты контура Ферми. Отклонение закона дисперсии от идеального нестинга характеризуется функцией

$$2\epsilon_+(\mathbf{k}) = [\epsilon(\mathbf{k}) + \epsilon(\mathbf{k} + \mathbf{Q})]. \quad (8)$$

Две ветви ($\nu = 1, 2$) спектра квазичастиц записываются как

$$E_\nu(\mathbf{k}) = \epsilon_+(\mathbf{k}) + (-1)^\nu \sqrt{\epsilon_-^2(\mathbf{k}) + D^2(\mathbf{k})}, \quad (9)$$

где $D^2(\mathbf{k}) = D_1^2(\mathbf{k}) + D_2^2(\mathbf{k})$. Энергетическая щель на линии, определяемой уравнением $\epsilon_-(\mathbf{k}) = 0$, равна

$$E_2(\mathbf{k}) - E_1(\mathbf{k}) = 2D(\mathbf{k}), \quad (10)$$

и при идеальном нестинге, когда $\epsilon_+(\mathbf{k}) = 0$, является прямой. Щель остается отличной от нуля при

$$\max \epsilon_+(\mathbf{k}) < \min D(\mathbf{k}). \quad (11)$$

В противном случае кристалл диэлектриком не является, поскольку переход из основного состояния в возбужденное оказывается возможным без изменения энергии электрона. Если компоненты параметра порядка, $D_1(\mathbf{k})$ и $D_2(\mathbf{k})$, соответствующие, например, d -волновой симметрии, относятся к разным неприводимым представлениям с $l = 2$, то $\min D(\mathbf{k})$ отличен от нуля при любых \mathbf{k} , принадлежащих контуру Ферми.

Базисные функции неприводимых представлений с $l = 2$ могут быть выбраны, например, в виде линейных комбинаций сферических гармоник. Суперпозиция сферических гармоник,

$$Y_{22}(\mathbf{n}) + Y_{2-2}(\mathbf{n}) \sim (n_x^2 - n_y^2) = \cos 2\varphi, \quad (12)$$

которая меняет знак при поворотах на угол $\pi/2$ вокруг оси, перпендикулярной плоскости k_x, k_y , соответствует симметрии $d_{x^2-y^2}$. Здесь $n_x = k_x/k$ и $n_y = k_y/k$ — компоненты единичного вектора \mathbf{n} в импульсном $2D$ -пространстве, φ — полярный угол вектора \mathbf{k} . Другая суперпозиция,

$$Y_{22}(\mathbf{n}) - Y_{2-2}(\mathbf{n}) \sim 2n_x n_y = \sin 2\varphi, \quad (13)$$

соответствующая симметрии d_{xy} , также меняет знак при поворотах на угол $\pi/2$ в плоскости k_x, k_y . В случае нарушенной TR-симметрии относительный сдвиг фазы между базисными функциями (12) и (13) составляет $\pi/2$, что соответствует $d + id$ -состоянию [22].

При наличии орторомбических искажений решетки параметр порядка можно представить, например, как $s + d$ -состояние с d -волновой компонентой (12),

$$D_1(k_x, k_y) = s_1 + d_1(n_x^2 - n_y^2), \quad (14)$$

где s_1 и d_1 — константы. Можно составить аналогичную линейную комбинацию с константами s_2 и d_2 , соответствующую d -волновой компоненте (13),

$$D_2(k_x, k_y) = s_2 + 2d_2 n_x n_y, \quad (15)$$

также представляющую параметр порядка $s + d$ -состояния. Формально выражения (14) и (15) можно рассматривать как сдвинутые по фазе на $\pi/2$

по отношению друг к другу вещественную и мнимую компоненты комплексного параметра порядка $D(\mathbf{k}) = D_1(\mathbf{k}) + iD_2(\mathbf{k})$. Наоборот, вещественную и мнимую компоненты параметра порядка можно представить также соответственно выражениями (15) и (14). Вообще, в качестве базисных функций неприводимых представлений, соответствующих $l = 0$ и $l = 2$, в формулах (14) и (15) можно использовать любые функции импульса, которые при преобразованиях точечной группы кристалла ведут себя как Y_{00} и линейные комбинации соответственно (12), (13).

Модель сверхпроводника с компонентами сверхпроводящего параметра порядка вида (14) и (15), рассмотренная в работе Воловика [27], формально эквивалентна двухзонной модели $2D$ -полуметалла, в которой зоны электронных состояний имеют вид

$$\varepsilon_1(\mathbf{k}) = \frac{k^2}{2m} - \mu, \quad \varepsilon_2(\mathbf{k}) = -\frac{(\mathbf{k}-\mathbf{Q})^2}{2m} + E_g - \mu, \quad (16)$$

где μ — химический потенциал. Здесь вектор \mathbf{Q} соединяет положения экстремумов электронной и дырочной зон (соответственно индексы 1 и 2), E_g — расстояние (по энергии) между этими экстремумами, энергии электрона в зонах отсчитываются от уровня химического потенциала. Эффективные массы в обеих зонах предполагаются одинаковыми.

Идеальный нестинг, $\varepsilon_1(\mathbf{k}) = -\varepsilon_2(\mathbf{k} + \mathbf{Q})$, имеет место при $\mu = E_g/2$, что соответствует равным концентрациям электронов и дырок. В этом случае $\varepsilon_+(\mathbf{k}) = 0$. Обозначим $\mu = k_F^2/2m$ и запишем кинетическую энергию ЭНР как

$$\varepsilon_-(\mathbf{k}) = (k^2 - k_F^2)/2m \quad (17)$$

или, при $|k - k_F| \ll k_F$, как $\varepsilon_-(\mathbf{k}) \approx v_F q$. Здесь фермиевская скорость $v_F = k_F/m$, а $q = k - k_F$.

Симметрия и топологические свойства сверхпроводящего параметра порядка с компонентами (14) и (15) исследованы Воловиком [27]: при нарушенной TR-симметрии \mathcal{T} коэффициенты $s_2 \neq 0$, $d_2 = 0$ в системе, симметричной относительно $2D$ -инверсии \mathcal{I} , и $s_2 = 0$, $d_2 \neq 0$ в системе, симметричной относительно комбинированного преобразования $\mathcal{T}\mathcal{I}$. Таким образом, мнимая компонента параметра порядка имеет либо чистую s -волновую, либо чистую d -волновую симметрию. Вещественная компонента параметра порядка, в принципе, может иметь как чисто s -волновую и d -волновую симметрии, так и смешанную $s + d$ -симметрию.

Прямая энергетическая щель $2D(\mathbf{k})$ в модели [27] открывается на контуре Ферми $k = k_F$ и может обращаться в нуль в нескольких его точках, если

$$(s_1/d_1)^2 + (s_2/d_2)^2 = 1. \quad (18)$$

В пространстве параметров s_1 , s_2 , d_1 , d_2 поверхность (18) разделяет топологически различные диэлектрические состояния: топологически тривиальное при

$$(s_1/d_1)^2 + (s_2/d_2)^2 > 1 \quad (19)$$

и нетривиальное при

$$(s_1/d_1)^2 + (s_2/d_2)^2 < 1. \quad (20)$$

Отсюда следует, что система, инвариантная относительно пространственной инверсии, заведомо не может переходить в топологически нетривиальное состояние, которое, однако, может возникать, если $s_2 = 0$, но $d_2 \neq 0$. Второе слагаемое в левой части (20) в таком случае выпадает, и условие возникновения топологически нетривиального состояния принимает вид

$$|s_1| < |d_1| \quad (21)$$

при любом $d_2 \neq 0$.

Формально, при условии, что $d_2 \neq 0$, непрерывное уменьшение величины отношения s_1/d_1 при уменьшении орторомбической деформации должно приводить к топологическому фазовому переходу в СТИ-состояние при $|s_1| = |d_1|$. Это условие аналогично условию инверсии зон [28], которая необходима для возникновения состояния СТИ в структурах с квантовыми ямами в соединениях на основе HgTe.

3. СИСТЕМА УРАВНЕНИЙ САМОСОГЛАСОВАНИЯ

В окрестности фазового перехода в топологически нетривиальное состояние величины s_1 и d_1 (одна из них или обе) малы, вообще говоря, не являются. Поэтому в случае $s_2 \equiv 0$ при определении топологически нетривиального параметра порядка из уравнения (5) можно ограничиться случаем $|d_2| \ll |s_1|$ и (или) $|d_2| \ll |d_1|$, что позволяет в нулевом приближении в уравнении самосогласования для вещественной компоненты параметра порядка $D_1(\mathbf{k})$ пренебречь мнимой компонентой $D_2(\mathbf{k})$, т. е. положить $d_2 = 0$:

$$D_1(\mathbf{k}) = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}'} \frac{U(\mathbf{k}, \mathbf{k}') D_1(\mathbf{k}')}{\sqrt{\varepsilon_-^2(\mathbf{k}') + |D_1(\mathbf{k}')|^2}}. \quad (22)$$

Для определенности будем искать решение уравнения (22), соответствующее орбитальной $s + d$ -симметрии, в множестве функций вида (14), которое

включает и случаи чистой s - и d -симметрии (соответственно при $d_1 = 0$ и $s_1 = 0$). Представим параметр порядка в виде линейной комбинации сферических гармоник с $l = 0$ и $l = 2$,

$$D_1(\mathbf{k}) = d(k) Y_{00} + \sum_{m=-2}^2 d^{(m)}(k) Y_{2m}(\vartheta, \varphi). \quad (23)$$

Здесь ϑ и φ — сферические углы импульса \mathbf{k} , $d(k)$ и $d^{(m)}(k)$ — зависящие только от модуля импульса коэффициенты. Энергию взаимодействия также разложим по сферическим гармоникам,

$$U(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = \sum_{l=0}^{\infty} V_l(k, k') \times \sum_{m=-l}^l Y_{lm}(\vartheta, \varphi) Y_{lm}^*(\vartheta', \varphi'), \quad (24)$$

где ϑ' и φ' — сферические углы импульса \mathbf{k}' , $V_l(k, k')$ — зависящие от модулей импульсов коэффициенты разложения. Величины этих коэффициентов могут варьироваться в зависимости от степени анизотропии энергии взаимодействия. Умножив уравнение (22) последовательно на Y_{00}^* и Y_{2m}^* и проинтегрировав оба полученных равенства по угловым переменным, проведем переход к $2D$ -импульсу, заданному в плоскости k_x, k_y , т. е. при значении зенитного угла $\vartheta = \pi/2$. В этом случае слагаемые с $m = \pm 1$ отсутствуют, так что, положив $d^{(2)} = \pm d^{(-2)}$, получаем выражения для параметра порядка в виде (14) и (15) соответственно при знаках плюс и минус.

Основной вклад в (22) дает относительно небольшая область импульсного пространства в виде полос, с обеих сторон прилегающих к линии, на которой $\epsilon_-(\mathbf{k}) = 0$. Поэтому коэффициенты $V_0(k, k')$ и $V_2(k, k')$, остающиеся в формуле (24), можно приближенно заменить константами g_0 и g_2 , включив в их определения нормировочные множители от соответствующих сферических гармоник. Какие-либо общие ограничения на соотношение между константами g_0 и g_2 отсутствуют.

Для коэффициентов s_1 и d_1 , определяющих вещественную компоненту параметра порядка (14), получаем систему нелинейных уравнений

$$s_1 = g_0 f_0(s_1, d_1) s_1 + g_0 f_1(s_1, d_1) d_1, \quad (25)$$

$$d_1 = g_2 f_1(s_1, d_1) s_1 + g_2 f_2(s_1, d_1) d_1,$$

где (при $n = 0, 1, 2$)

$$f_n(s_1, d_1) = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} \frac{(n_x^2 - n_y^2)^n}{\sqrt{\epsilon_-^2(\mathbf{k}) + [s_1 + d_1(n_x^2 - n_y^2)]^2}}. \quad (26)$$

Система уравнений (25) является точной на множестве решений вида (14). Аналогичная система уравнений для вещественной компоненты параметра порядка (с заменой $n_x^2 - n_y^2 \rightarrow 2n_x n_y$) может быть выписана для множества решений вида (15). Из (25) следует

$$g_0 d_1^2 (1 - b_2) = g_2 s_1^2 (1 - b_0), \quad (27)$$

где (при $n = 0$ или $n = 2$)

$$b_n(s_1, d_1) = \frac{g_n}{2} \sum_{\mathbf{k}} \frac{\cos^n 2\varphi}{\sqrt{\epsilon_-^2(\mathbf{k}) + (s_1 + d_1 \cos 2\varphi)^2}}. \quad (28)$$

Если $\epsilon_-^2(\mathbf{k})$ обращается в нуль на линии в импульсном $2D$ -пространстве, то чисто d -волновое решение ($s_1 \equiv 0$) возникает при любом значении константы связи g_2 . Аналогично, чисто s -волновое решение ($d_1 \equiv 0$) имеет место при любом g_0 . Напротив, решение системы уравнений (25) с $s_1 \neq 0$ и $d_1 \neq 0$ существует в некоторой области плоскости параметров g_0, g_2 . В этой области такое решение конкурирует с чисто s -волновым и d -волновым решениями. Основное состояние системы определяется минимумом свободной энергии. Поскольку плотность (в импульсном пространстве) энергии конденсации ЕНР при $d_2 \rightarrow 0$, что предполагалось при выводе системы уравнений (25), пропорциональна $D_1^2(\mathbf{k})$, при оценках можно сравнивать средние значения квадратов соответствующих параметров порядка. Из приведенных ниже примеров решения системы уравнений (25) следует, что при заданных значениях констант связи g_0 и g_2 , свободная энергия смешанного $s + d$ -состояния не может быть ниже свободной энергии, соответствующей чистому s - или d -состоянию.

Формально можно рассмотреть случай $s_1 = d_1 \equiv s$, т. е. решение $D_1 = 2s \cos^2 \varphi$, которое в соответствии с (21) могло бы соответствовать точке топологического фазового перехода. Уравнение, которому удовлетворяет параметр s , может быть записано как $f(s) = g_0^{-1} - g_2^{-1}$, где

$$f(s) \equiv 2 \sum_{\mathbf{k}} \frac{\sin^2 \varphi \cos^2 \varphi}{\sqrt{\epsilon_-^2(\mathbf{k}) + 4s^2 \cos^4 \varphi}}. \quad (29)$$

Так как $f(s) > 0$, реализация решения со смешанной $s + d$ -симметрией при $s_1 = d_1$ оказывается возможной в случае $g_2 > g_0$; кроме того, необходимо, чтобы $g_0 f(s) < 1$.

Как показывает исследование системы уравнений (25), ее решения весьма чувствительны к закону дисперсии электронов и соотношению между константами связи g_0 и g_2 , а также к форме базисной функции d -волнового неприводимого представления (как уже отмечалось, вместо функций (12) и (13) в качестве пробных решений системы (25) могут быть выбраны любые функции с орбитальной симметрией соответственно $d_{x^2-y^2}$ и d_{xy}). Ниже приведены решения системы (25) для $2D$ -кристаллов с идеальным нестингом контура Ферми.

4. ПАРАМЕТР ПОРЯДКА ДИЭЛЕКТРИЧЕСКОГО СОСТОЯНИЯ

Рассмотрим установление диэлектрического порядка в виде волны плотности в квадратной решетке $2D$ -металла, закон дисперсии электрона в зоне проводимости которого в приближении сильной связи можно представить как

$$\epsilon(\mathbf{k}) = -2t(\cos k_x + \cos k_y) - 4t' \cos k_x \cos k_y - \mu, \quad (30)$$

где t и t' — интегралы перескока соответственно между первыми и вторыми соседними узлами кристаллической решетки.

Импульс нестинга выберем в виде $\mathbf{Q} = (\pi, \pi)$, что соответствует удвоению элементарной ячейки $2D$ -кристалла при переходе в диэлектрическую фазу. Тогда

$$\begin{aligned} \epsilon_-(\mathbf{k}) &= -2t(\cos k_x + \cos k_y), \\ \epsilon_+(\mathbf{k}) &= -4t' \cos k_x \cos k_y - \mu. \end{aligned} \quad (31)$$

Условие $\epsilon_-(\mathbf{k}) = 0$ удовлетворяется на прямых линиях $k_y = \pm(\pi \pm k_x)$, ограничивающих квадрат, площадь которого составляет половину площади $2D$ -зоны Бриллюэна. Этим прямым соответствует сингулярность в уравнении (5), поэтому их окрестности вносят основной вклад в формирование параметра порядка. В случае закона дисперсии, учитывающего перескоки только между ближайшими соседними узлами $2D$ -решетки, т. е. при $t' = 0$ в формуле (30), прямые $k_y = \pm(\pi \pm k_x)$ являются контуром Ферми родительского металла при половинном заполнении. Такой контур Ферми обладает идеальным нестингом как раз при векторе нестинга $\mathbf{Q} = (\pi, \pi)$. Диэлектрическому упорядочению соответствует понижение трансляционной симметрии (удвоение элементарной ячейки) и возникновение запрещенной зоны $2|D(\mathbf{k})|$ во всех, вообще говоря, точках контура Ферми, который теперь является границей магнитной зоны Бриллюэна, вдвое меньшей кристаллографической зоны Бриллюэна.

В случае чистой d -волновой симметрии параметра порядка $D_1(\mathbf{k})$ диэлектрическая щель обращается в нуль в четырех точках пересечения контура Ферми с диагоналями кристаллографической зоны Бриллюэна, что соответствует состоянию полуметалла. Такое состояние возникает и при $s + d$ -смешивании, если амплитуда d -компоненты превышает амплитуду s -компоненты, т. е. при $d_1 \geq s_1$. По мере роста s_1 нули диэлектрической щели смещаются к точкам пересечения контура Ферми с координатными осями. Всюду отличная от нуля диэлектрическая щель возникает при $d_1 \leq s_1$ (тогда при любых d_2 в том числе и при $d_2 = 0$ реализуется топологически тривиальное состояние) или при $d_2 \neq 0$ (тогда в соответствии с (21) при $d_1 \geq s_1$ в том числе и при $s_1 = 0$ может быть реализовано топологически нетривиальное состояние).

При отличных от нуля, но малых $t' \ll t$, контур Ферми при половинном заполнении, которому соответствует некоторое зависящее от t' и не равное нулю значение химического потенциала $\mu = \mu(t')$, уже не совпадает с границей магнитной зоны Бриллюэна, а является гладкой замкнутой кривой, все точки которой достаточно близки к этой границе. Поэтому, несмотря на то что в уравнение (5) функция $\epsilon_+(\mathbf{k})$ явно не входит, решение этого уравнения $D(\mathbf{k})$ оказывается зависящим от t' в силу того, что $\mu = \mu(t')$. Кроме того, прямая запрещенная зона возникает только тогда, когда $\min D(\mathbf{k}) > 4t'$, поскольку в противном случае основному состоянию системы, возникшему в результате перехода, соответствует полуметалл, даже если $D(\mathbf{k})$ не обращается в нуль нигде в окрестности границы магнитной зоны Бриллюэна. Далее приводятся результаты численных расчетов, соответствующие половинному заполнению и $t' = 0$.

В случае квадратной решетки d -волновые компоненты параметра порядка с симметриями $d_{x^2-y^2}$ и d_{xy} удобно выбрать в виде

$$\begin{aligned} \psi_{x^2-y^2}(\mathbf{k}) &= \cos k_x - \cos k_y, \\ \psi_{xy}(\mathbf{k}) &= 2 \sin k_x \sin k_y. \end{aligned} \quad (32)$$

При $k_x \ll 1$, $k_y \ll 1$ эти функции, отражающие трансляционную симметрию решетки, пропорциональны комбинациям сферических гармоник соответственно $(n_x^2 - n_y^2)$ и $2n_x n_y$. Система уравнений (25), описывающая как чистые диэлектрические состояния с орбитальными симметриями s и d , так и смешанные $s + d$ -состояния, решена численно при $s_1 = \text{const}$ и d -волновых базисных функциях (32).

На рис. 1 представлена зависимость параметра порядка от константы связи g_2 при фиксированном

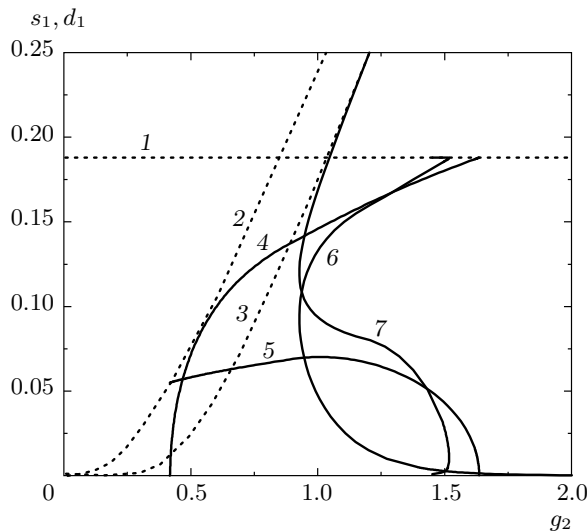


Рис. 1. Компоненты параметра порядка, полученные при численном решении уравнения (5), как функции константы связи g_2 при $g_0 = 1$; интеграл перескока между ближайшими соседями $t = 0.5$. Штриховая линия 1 представляет параметр порядка при чистой s -волновой симметрии. Штриховые линии 2 и 3 представляют параметр порядка соответственно при чистых $d_{x^2-y^2}$ - и d_{xy} -симметриях. Сплошные линии относятся к s_1 - и d_1 -компонентам $s + d$ -параметра порядка, который описывает сосуществование двух диэлектрических состояний. Парты линий 4, 5 и 6, 7 представляют s_1 и d_1 соответственно для симметрий $d_{x^2-y^2}$ и d_{xy}

значении g_0 . В случае чистой s -волновой симметрии, когда $d_1 \equiv 0$, амплитуда параметра порядка равна $s = \text{const}$ при любом g_2 (штриховая линия 1); в случае чистой d -волновой симметрии (при $s_1 \equiv 0$) амплитуда параметра порядка не зависит от g_0 и является монотонно возрастающей функцией $d = d(g_2)$ (кривые 2 и 3, относящиеся соответственно к базисным функциям $\psi_{x^2-y^2}(\mathbf{k})$ и $\psi_{xy}(\mathbf{k})$). Сплошные линии показывают поведение компонент s_1 - и d_1 -параметров порядка, описывающих сосуществование состояний с s -волновой и d -волновой симметриями. Такие решения системы уравнений самосогласования (25) возникают, когда значения константы связи g_2 ограничены снизу. В том случае, когда параметр порядка включает базисную функцию $\psi_{x^2-y^2}(\mathbf{k})$, решение для s - и d -компонент параметра порядка (соответственно кривые 4 и 5) является однозначным и существует в некоторой области значений g_2 , ограниченной снизу и сверху. На левой границе этой области амплитуда s -волны $s_1 \rightarrow 0$, а амплитуда d -волны d_1 остается конечной. На правой

границе области, наоборот, амплитуда s_1 конечна, а амплитуда $d_1 \rightarrow 0$. Когда параметр порядка определяется базисной функцией $\psi_{xy}(\mathbf{k})$, решения системы уравнений (25) существуют в области значений g_2 , ограниченной только снизу, причем в конечной части этой области вблизи нижней границы решения являются двузначными. Одно из решений (кривые 6 и 7, т.е. графики функций соответственно s_1 и d_1) начинается при значении g_2 , соответствующем нижней границе. При $g_2 \rightarrow \infty$ кривые 6 и 7 асимптотически приближаются соответственно к $s_1 = 0$ и к линии $d = d(g_2)$, обозначенной как 3.

Второе решение также начинается в точке, соответствующей нижней границе, при этом s -компонента параметра порядка является возрастающей функцией константы связи g_2 вплоть до точки пересечения ветви $s_1 = s_1(g_2)$ с прямой $s_1 = s$, где эта ветвь и заканчивается (часть кривой 6, возрастающая от нижней границы области определения g_2). В этой же точке заканчивается и нисходящая от нижней границы до нуля ветвь (часть кривой 7) функции $d_1 = d_1(g_2)$. Как и в случае сосуществования диэлектрического и сверхпроводящего упорядоченных состояний [29], второе из рассмотренных здесь решений является нефизическим.

Диэлектрическая щель возникает на изолинии $\epsilon_-(\mathbf{k}) = 0$, ограничивающей магнитную зону Бриллюэна структуры с удвоенной элементарной ячейкой. Сравнение средних квадратов параметров порядка показывает, что при малых g_2 минимуму свободной энергии соответствует чистое s -волновое состояние. Когда константа связи g_2 превышает значение, которое соответствует точке пересечения линий 1 и 2 (или 1 и 3), доминирующим становится d -волновое состояние, описываемое параметрами порядка (32). При этом в случае, когда параметр порядка определяется функцией $\psi_{xy}(\mathbf{k})$, во всей области сосуществования s - и d -состояний энергия конденсации, соответствующая чистому d -состоянию (когда $s_1 \equiv 0$), равна энергии конденсации, соответствующей сосуществующим s - и d -состояниям. Остаточное взаимодействие в (24), не учтенное при выводе системы уравнений (25), снимает подобное вырождение, так что в этом случае d -волновое состояние всегда имеет примесь s -волны, уменьшающуюся до нуля по мере роста g_2 .

В случае закона дисперсии вида (30) параметр порядка, соответствующий импульсу нестинга $\mathbf{Q} = (\pi, \pi)$, существенно зависит от интеграла перескока t между ближайшими соседними узлами. Вариация t может повлиять как на амплитуды компонент параметра порядка, так и на область сосуществова-

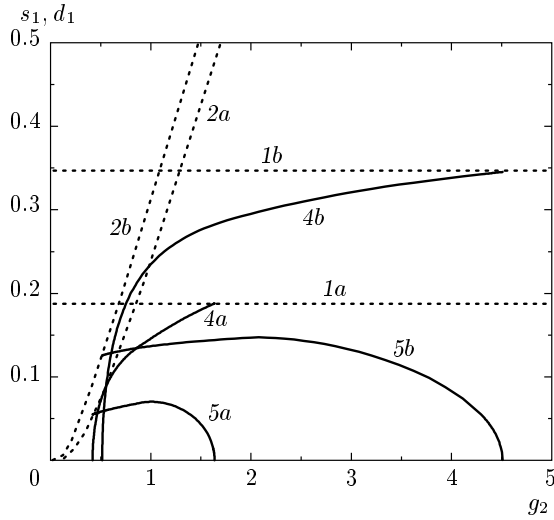


Рис. 2. Зависимость компонент $s + d$ -параметра порядка от константы связи g_2 . Компонента d_1 относится к симметрии $d_{x^2-y^2}$. Цифры в обозначениях линий соответствуют принятым на рис. 1, буквы a и b относятся соответственно к случаям $t = 0.5$ и $t = 0.25$

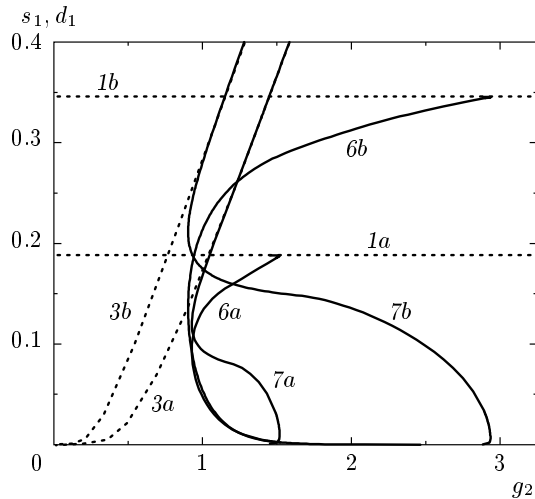


Рис. 3. Зависимость компонент $s + d$ -параметра порядка от константы связи g_2 . Компонента d_1 относится к симметрии d_{xy} . Цифры в обозначениях линий соответствуют принятым на рис. 1, буквы a и b относятся соответственно к случаям $t = 0.5$ и $t = 0.25$

ния s - и d -состояний. Рисунки 2 и 3 иллюстрируют, соответственно, зависимости параметров порядка с $d_{x^2-y^2}$ - и d_{xy} -симметриями от t , т. е. от ширины зоны проводимости (равной $8t$) родительского металла. Нумерация кривых на этих рисунках соответствует

принятой на рис. 1, номера кривых с буквами a и b относятся соответственно к $t = 0.5$ и $t = 0.25$.

Сопоставление представленных на рис. 1–3 данных позволяет заключить, что доминирующему d -волновому упорядочению соответствует орбитальная симметрия $d_{x^2-y^2}$, которая обеспечивает большее (по сравнению с d_{xy}) понижение свободной энергии при диэлектрическом фазовом переходе. Поэтому предположим, что в системе установилось упорядочение с вещественным d -волновым параметром порядка

$$D_1(\mathbf{k}) = d_1(\cos k_x - \cos k_y), \quad (33)$$

где $d_1 = \text{const}$. Следствием нарушения симметрии по отношению к обращению времени является появление мнимой компоненты параметра порядка $D_2(\mathbf{k})$, которая, в соответствии с приближением, которое было сделано при переходе от (5) к (22), что $\max |D_2(\mathbf{k})| \ll \max |D_1(\mathbf{k})|$, находится как решение уравнения самосогласования

$$D_2(\mathbf{k}) = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}'} \frac{U(\mathbf{k}, \mathbf{k}') D_2(\mathbf{k}')}{\sqrt{\epsilon_-^2(\mathbf{k}') + D_1^2(\mathbf{k}') + D_2^2(\mathbf{k}')}}. \quad (34)$$

Здесь $D_1(\mathbf{k})$ — приближенное d -волновое решение (33) уравнения самосогласования (22), найденное для вещественной части параметра порядка.

Обе компоненты (вещественная и мнимая) параметра порядка определяются одной и той же энергией взаимодействия $U(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$, поэтому, если $D_1(\mathbf{k})$ имеет d -волновую симметрию, то естественно считать, что и $D_2(\mathbf{k})$ также имеет d -волновую симметрию. Можно привести аргументы в пользу того, что в случае, если вещественная компонента $D_1(\mathbf{k})$ имеет симметрию $d_{x^2-y^2}$, мнимая компонента $D_2(\mathbf{k})$ должна относиться к симметрии d_{xy} . Действительно, особенность в уравнении самосогласования (34) формируется в окрестностях точек, в которых одновременно $\epsilon_-(\mathbf{k}) = 0$ и $D_1(\mathbf{k}) = 0$. Первое условие выполняется на линиях $k_y = \pm(\pi \pm k_x)$, т. е. на границе магнитной зоны Бриллюэна, а второе — на линиях $k_y = \pm k_x$, т. е. на диагоналях кристаллографической зоны Бриллюэна (рис. 4). Поэтому в окрестностях точек пересечения этих линий (жирные точки на рис. 4) $|D_2(\mathbf{k})|$ достигает наибольших значений. При повороте на $\pi/2$ параметр порядка $D_2(\mathbf{k})$ должен менять знак, т. е. $D_2(\mathbf{k})$ имеет разные знаки в соседних (повернутых на $\pm\pi/2$) окрестностях особых точек. Следовательно, значения $D_2(\mathbf{k})$ в соседних окрестностях должны разделять линии нулей, которые в данном случае совпадают с координатными осями

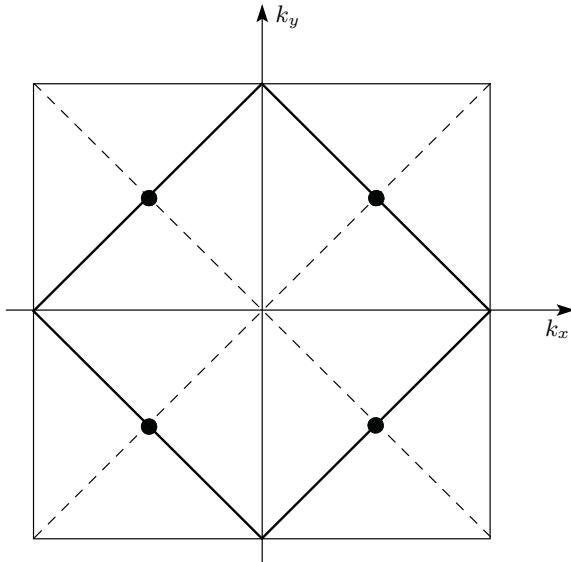


Рис. 4. Зона Бриллюэна родительского металла, диагонали которой $k_y = \pm k_x$ являются линиями нулей параметра порядка с симметрией $d_{x^2-y^2}$. Линиями нулей параметра порядка с симметрией d_{xy} являются координатные оси $k_y = 0$ и $k_x = 0$. Жирные линии, ограничивающие магнитную зону Бриллюэна, формируют сингулярность уравнения самосогласования (22) для вещественной компоненты параметра порядка $D_1(\mathbf{k})$. Жирные точки на границе магнитной зоны Бриллюэна формируют сингулярность уравнения самосогласования (34) для мнимой компоненты параметра порядка $D_2(\mathbf{k})$

(диагоналями магнитной зоны Бриллюэна), как показано на рис. 4. Такому распределению линий нулей соответствует симметрия d_{xy} .

Поскольку особенность, формирующая $D_1(\mathbf{k})$, распределена в окрестностях линий $k_y = \pm(\pi \pm k_x)$, которые составляют контур Ферми, а особенность, приводящая к $D_2(\mathbf{k})$, приходится на окрестности точек пересечения контура Ферми и линий нулей функции $D_1(\mathbf{k})$, при одной и той же энергии взаимодействия (одной и той же константе связи g_2) действительно должно выполняться неравенство $\max |D_2(\mathbf{k})| \ll \max |D_1(\mathbf{k})|$, позволяющее приближенно представить систему уравнений самосогласования для вещественной и мнимой компонент параметра порядка в виде двух независимых уравнений (22) и (34). Формальное отличие этих уравнений друг от друга заключается в том, что вместо кинетической энергии ЕНР $\epsilon_-(\mathbf{k})$ в первом уравнении, обращающейся в нуль на контуре Ферми, во второе уравнение входит функция $\tilde{\epsilon}_-(\mathbf{k}) = \sqrt{\epsilon_-^2(\mathbf{k}) + D_1^2(\mathbf{k})}$,

имеющая смысл некоторого эффективного закона дисперсии, для которого условие идеального нестинга, выполняющееся на контуре Ферми для $\epsilon_-(\mathbf{k})$, оказывается нарушенным.

Если в уравнении (34) принять $D_1(\mathbf{k}) = 0$, то его решение, соответствующее симметрии d_{xy} , как функция константы связи g_2 изображается кривой 3 на рис. 1. Непрерывное увеличение (от нуля) амплитуды функции $D_1(\mathbf{k})$ в уравнении (34) приводит к непрерывному уменьшению амплитуды и, возможно, усложнению топологии линии нулей [30] решения $D_2(\mathbf{k})$. Качественная оценка мнимой компоненты параметра порядка может быть получена, если учесть, что $|D_1(\mathbf{k})|$ в (34) имеет смысл характерного энергетического масштаба отклонения закона дисперсии $\tilde{\epsilon}_-(\mathbf{k})$ от идеального нестинга [31]. Тогда решение уравнения (34) приближенно может быть представлено как $D_2(\mathbf{k}) = \sqrt{D_2'(\mathbf{k})[D_2'(\mathbf{k}) - 2D_1(\mathbf{k})]}$, где $D_2'(\mathbf{k})$ — решение уравнения (34) при $D_1(\mathbf{k}) = 0$ (именно этому решению соответствует кривая 3 на рис. 1). Таким образом, наибольшее значение мнимой компоненты параметра порядка, равное $D_2'(\mathbf{k})$, достигается на линии нулей вещественной компоненты. Следовательно, диэлектрическая щель отлична от нуля на всем контуре Ферми.

Диэлектрическое состояние с $d + id$ -симметрией параметра порядка, возможно, реализуется в слаболегированных купратных соединениях выше температуры сверхпроводящего перехода. Предполагается [19], что волна плотности тока заряда $iD_1(\mathbf{k})$ с симметрией $id_{x^2-y^2}$ (DDW) приводит к псевдощелевому состоянию купратов при низких концентрациях носителей в плоскостях CuO_2 . Малая примесь вещественной компоненты параметра порядка $D_2(\mathbf{k})$ с симметрией d_{xy} делает неэквивалентными противоположные направления распространения орбитальных токов, формирующих DDW [23].

В работе [22] рассмотрена SDW с $d + id$ -симметрией, образующаяся при триплетном ЕНР-спаривании. Показано, что в случае спиновой плотности, описываемой комплексным параметром порядка $D = D_1 + iD_2$, в котором зависимости от импульса компонент $D_1(\mathbf{k})$ и $D_2(\mathbf{k})$ определяются функциями вида (32), числа Черна для каждой из зон квазичастиц (9) различаются знаком для разных проекций спина. Таким образом, сумма по спинам $\sigma = \pm 1$ чисел Черна $N_{\sigma\nu}$ для каждой квазичастичной зоны равна нулю, $N = \sum_{\sigma} N_{\sigma\nu} = 0$, что соответствует компенсации краевых зарядовых токов, но удвоению краевых спиновых токов. Следовательно, в случае триплетного ЕНР-спаривания возникающему $d + id$ -состоянию соответствует STI [22].

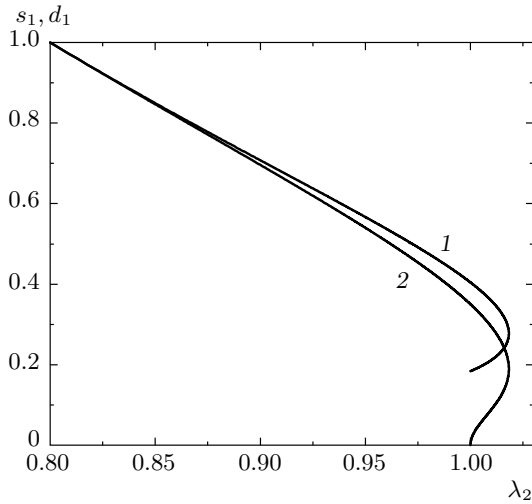


Рис. 5. Компоненты параметра порядка s_1 и d_1 (соответственно линии 1 и 2) в модели полуметалла (25) как функции константы связи λ_2 при $d_1 \leq s_1$. Здесь принято $\lambda_0 = 1, s_0 = 1$

При синглетном ЭНР-спаривании с образованием CDW с симметрией $d + id$ числа Черна не зависят от спина, поэтому их сумма по спинам в нуль не обращается. Следовательно, в соответствии с результатами работы [22] топологический инвариант $N = \sum_{\sigma} N_{\sigma\nu} = -2$ и система должна проявлять себя как СТИ.

Фазовый переход между состояниями полуметалла (16), (17) и экситонного диэлектрика, описываемый системой уравнений (25), может быть исследован аналитически. В этом случае интегралы (26) в приближении слабой связи выражаются через элементарные функции [32].

Для чистых s - и d -состояний ($d_1 \equiv 0$ и $s_1 \equiv 0$, соответственно) имеем

$$\begin{aligned} s_1^{(c)} &= 2\hbar\omega_0 \exp(-1/\lambda_0), \\ d_1^{(c)} &= 2\sqrt{2}\hbar\omega_0 \exp(-2/\lambda_2), \end{aligned} \tag{35}$$

где $\lambda_0 = g_0 k_F / 2\pi\hbar v_F$, $\lambda_2 = g_2 k_F / 2\pi\hbar v_F$, $\omega_0 = v_F q_0$ (здесь $q_0 \sim 10^8 \text{ см}^{-1}$ — полуширина полосы эффективного взаимодействия в окрестности контура Ферми).

В случае смешанного $s + d$ -состояния, соответствующего сосуществованию состояний с s - и d -волновой симметриями, зависимости компонент параметра порядка от безразмерной константы связи при $|d_1| \leq |s_1|$ представлены на рис. 5. Линии 1 и 2 соответствуют s_1 - и d_1 -компонентам параметра порядка. Выигрыш в свободной энергии при пе-

реходе в смешанное $s + d$ -состояние не может превзойти выигрыш, соответствующий переходу в чистое d -состояние. При $|d_1| > |s_1|$ и нарушенной TR-симметрии (когда $s_2 \equiv 0$, но $d_2 \neq 0$) возникающему топологически нетривиальному $d + id$ -состоянию СТИ, согласно [27], соответствует топологический инвариант $N = -2$. Таким образом, две рассмотренные здесь модели топологически эквивалентны: непрерывной деформацией в пространстве параметров гамильтониана среднего поля, не обращающей в нуль энергетическую щель, закон дисперсии (30) и компоненты (32) параметра порядка могут быть преобразованы соответственно к (17) и (14), (15).

5. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Надежная информация о наблюдении d -волновых $2D$ -конденсатов синглетных ЭНР пока отсутствует. Рассмотренный здесь фазовый переход из металлического состояния в состояние волны плотности заряда с d -волновой симметрией при соизмеримом волновом векторе \mathbf{Q} может быть реализован при слабом легировании слоистого полупроводникового соединения при условии, что d -волновая константа связи g_2 достаточно велика по сравнению с s -волновой константой g_0 . Такое условие может быть реализовано в сильно анизотропных $2D$ -системах, подобных плоскостям CuO_2 , которые являются основным структурным элементом купратов. По мере увеличения уровня легирования может достигаться критическая концентрация носителей, при которой d -состояния, при сохранении пространственной периодичности, соответствующей вектору \mathbf{Q} , становятся энергетически выгоднее s -состояний.

Действительно, если по каким-либо причинам металл при половинном заполнении переходит не в диэлектрическое состояние с s -волновой щелью, а, например, в состояние d -волнового полуметалла, то при невысоких уровнях легирования избыточные носители могут распределяться в окрестностях нодальных точек вещественного параметра порядка $D_1(\mathbf{k})$ без критического проигрыша в свободной энергии, как это было бы при легировании диэлектрика с конечной запрещенной зоной на всем контуре Ферми. Таким образом, легирование может сделать предпочтительным установление d -волнового упорядочения по сравнению с s -волновым. При этом формирование диэлектрического состояния (возникновение конечной энергетической щели в окрестностях нулей d -волны плотности заряда) должно связываться

со вторым фазовым переходом [21], который сопровождается нарушением TR-симметрии.

С ростом уровня легирования контур Ферми родительского металла, ограничивающий заполненные одноэлектронные состояния, меняет размеры и форму, что приводит к отклонению от приближенного нестинга, стабилизирующего волну плотности с волновым вектором \mathbf{Q} . Это может привести к возникновению новой CDW с некоторым другим, вообще говоря, несоизмеримым волновым вектором \mathbf{Q}' [26, 33].

Работа выполнена при поддержке РФФИ (грант № 11-02-01149-а) и Министерства образования и науки РФ (контракт № 16.513.11.3149).

ЛИТЕРАТУРА

1. F. D. M. Haldane, Phys. Rev. Lett. **61**, 2015 (1988).
2. M. Z. Hasan and C. L. Kane, Rev. Mod. Phys. **82**, 3045 (2010).
3. X.-L. Qi and S.-C. Zhang, Rev. Mod. Phys. **83**, 1057 (2011).
4. Л. В. Келдыш, Ю. В. Копаев, ФТТ **6**, 2791 (1964).
5. B. I. Halperin and T. M. Rice, in *Solid State Physics*, ed. by F. Seitz and E. Henry, Academic Press, New York (1968), Vol. 21, p. 115.
6. В. Ф. Елесин, Ю. В. Копаев, Письма в ЖЭТФ **24**, 78 (1976).
7. S. V. Borisenko, A. A. Kordyuk, V. B. Zabolotnyy et al., Phys. Rev. Lett. **102**, 166402 (2009).
8. J. A. Wilson, F. J. Di Salvo, and S. Mahajan, Adv. Phys. **24**, 117 (1975).
9. Б. А. Волков, О. А. Панкратов, ЖЭТФ **75**, 1362 (1978).
10. E. Fawcett, Rev. Mod. Phys. **60**, 209 (1988).
11. B. A. Bernevig, T. L. Hughes, and S.-C. Zhang, Science **314**, 1757 (2006).
12. M. König, S. Wiedmann, C. Brüne et al., Science **318**, 766 (2007).
13. L. Fu and C. L. Kane, Phys. Rev. B **76**, 045302 (2007).
14. S. Murakami, New J. Phys. **9**, 356 (2007).
15. D. Hsieh, D. Qian, L. Wray et al., Nature **452**, 970 (2008).
16. J. Moore, Nature Phys. **5**, 378 (2009).
17. H. J. Schulz, Phys. Rev. B **39**, 2940 (1989).
18. C. Nayak, Phys. Rev. B **62**, 4880 (2000).
19. S. Chakravarty, R. B. Laughlin, D. K. Morr, and C. Nayak, Phys. Rev. B **63**, 094503 (2001).
20. C. M. Varma, Phys. Rev. B **73**, 155113 (2006).
21. B.-J. Yang and H.-Y. Kee, Phys. Rev. B **82**, 195126 (2010).
22. C.-H. Hsu, S. Raghu, and S. Chakravarty, Phys. Rev. B **84**, 155111 (2011).
23. S. Tewari, C. Zhang, V. M. Yakovenko, and S. Das Sarma, Phys. Rev. Lett. **100**, 217004 (2008).
24. C. Zhang, S. Tewari, and S. Das Sarma, Phys. Rev. B **79**, 245424 (2009).
25. В. П. Минеев, К. В. Самохин, *Введение в теорию необычной сверхпроводимости*, Изд-во МФТИ, Москва (1998).
26. W. L. McMillan, Phys. Rev. B **12**, 1187 (1975).
27. G. E. Volovik, Письма в ЖЭТФ **66**, 492 (1997).
28. B. A. Bernevig, T. L. Hughes, and S.-C. Zhang, Science **314**, 1757 (2006).
29. А. И. Русинов, До Чан Кат, Ю. В. Копаев, ЖЭТФ **65**, 1984 (1973).
30. V. I. Belyavsky, V. V. Караев, and Yu. V. Копаев, JETP Lett. **96**, 724 (2012).
31. V. V. Караев, Yu. V. Копаев, and V. I. Belyavsky, Phys. Lett. A **372**, 6687 (2008).
32. И. С. Градштейн, И. М. Рыжик, *Таблицы интегралов, сумм, рядов и произведений*, Наука, Москва (1971).
33. G. Grüner, *Density Waves in Solids*, Perseus Publishing, Cambridge, MA (1994).