Письма в ЖЭТФ, том 114, вып. 12, с. 812 – 817 © 2021 г. 25 декабря

Расщепление спектра фермиевских возбуждений топологического изолятора зарядовыми флуктуациями

В. В. Вальков[1)]

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

Поступила в редакцию 8 ноября 2021 г.
После переработки 10 ноября 2021 г.
Принята к публикации 10 ноября 2021 г.

Показано, что в топологическом изоляторе (ТИ) межузельное кулоновское взаимодействие (МКВ) электронов приводит к расщеплению исходной энергетической структуры и индуцированию двух зон флуктуационных состояний (ЗФС). В результате полный спектр фермиевских возбуждений ТИ имеет четырехполосную структуру. При этом диэлектрическая щель определяется энергетическим интервалом между дном ЗФС электронов проводимости и потолком валентной ЗФС. Уменьшенная ширина ЗФС приводит к появлению квазичастиц с различными эффективными массами.

DOI: 10.31857/S1234567821240058

1. Введение. Свойства топологических изоляторов (ТИ) и условия реализации краевых состояний в начале рассматривались для систем, описываемых квадратичными формами гамильтонианов [1–3], для структур с аномально сильной спин-орбитальной связью [4], а также в рамках модели, выведенной на основе формализма огибающих волновых функций и граничных условий [5]. В последнее время стали исследоваться свойства двухподрешеточных ТИ [6].

В реальных материалах часто реализуется режим, когда взаимодействие между фермионами не может считаться малым. Это инициирует работы, в которых спектр возбуждений ТИ и топологическая классификация проводится при учете межузельных кулоновских взаимодействий (МКВ) [7–10].

Включение МКВ не позволяет использовать классические методы вычисления спектра фермиевских возбуждений (ТИ), а простые линеаризованные схемы, типа обобщенного приближения Хартри–Фока, не являются корректными, как только параметры кулоновского взаимодействия становятся сравнимыми с параметрами, определяющими затравочную энергетическую структуру ТИ. Эти факторы определяют актуальность развития теории отмеченных материалов на основе современных квантово-статистических методов.

Проблема корректного описания МКВ усугубляется, если имеет место перекрытие затравочных зон. Тогда кулоновское взаимодействие, как известно [11–13], может существенно повлиять на систему и сформировать фазу экситонного диэлектрика. При этом обменная часть МКВ способна индуцировать в экситонном диэлектрике краевые состояния [14].

Ранее для ансамбля хаббардовских фермионов было показано, что МКВ могут привести к расщеплению спектра фермиевских возбуждений и образованию зоны флуктуационных состояний (ЗФС) [15, 16]. Название объяснялось тем, что вычеты электронной функции Грина (ФГ) в окрестностях индуцированных полюсов были пропорциональны среднеквадратичной флуктуации электронной плотности.

Этот результат был получен как на основе расширенного набора базисных операторов [15], так и в рамках диаграммной техники в атомном представлении [16]. Во втором методе при нахождении массового оператора для фермионной функции Грина существенную роль сыграло точное суммирование подпоследовательности диаграмм, описывающих вклады от одноузельных зарядовых флуктуаций (ЗФ).

Принимая во внимание этот результат, можно ожидать, что в условиях инвертированной зонной структуры, имеющей место в ТИ, включение МКВ может приводить к более заметному качественному изменению энергетической структуры. Это следует из того, что возникновение дополнительных подзон как для электронов проводимости, так и для электронов валентной зоны, между которыми располагается спектр краевых состояний, может кардинально сказаться как на структуре спектра ТИ, так и на поведении плотности фермионных состояний.

В данной работе в рамках наиболее популярной модели ТИ, предложенной в работе Bernevig–Hughes–Zhang (модель BHZ) [1], описывающей энергетическую структуру квантовой ямы HgTe (см. так-

[1)]e-mail: vvv@iph.krasn.ru

же [2, 3]), на основе расширенного набора базисных операторов при учете МКВ решена задача о спектре фермиевских возбуждений.

Показано, что ЗФ качественно меняют энергетическую структуру ТИ: спектр возбуждений состоит не только из зоны проводимости и валентной зоны, но и из двух ЗФС, а краевые состояния располагаются между верхней и нижней ЗФС, для которых имеет место возрастание эффективных масс.

2. Гамильтониан модели BHZ + *V*. Напомним основные особенности, определяющие характеристики фермионного ансамбля со спин-орбитальным взаимодействием, описываемого моделью BHZ.

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 [3]. Эти состояния образуют актуальный базис для описания валентной зоны.

Зона проводимости формируется из $6s$-состояний атомов Hg, которые по симметрийным причинам не испытывают существенных изменений.

В квазиимпульсном представлении $\hat{H}_{\mathrm{BHZ}}$ может быть записан следующим образом:

$$\hat{H}_{\mathrm{BHZ}} = \sum_{k\sigma} \left[\varepsilon_{ak} a^{+}_{k\sigma} a_{k\sigma} + \varepsilon_{bk} b^{+}_{k\sigma} b_{k\sigma}\right] + \\ + \sum_{k\sigma} (\Gamma_{k\sigma} a^{+}_{k\sigma} b_{k\sigma} + \Gamma^{*}_{k\sigma} b^{+}_{k\sigma} a_{k\sigma} \mathrm{h.c.}), \qquad (1)$$

где $a_{k\sigma}$ и $b_{k\sigma}$ – операторы вторичного квантования, используемые для описания зоны проводимости и валентной зоны соответственно. Затравочные спектры фермиевских состояний определяются выражениями

$$\varepsilon_{ak} = \varepsilon_a + t_{ak}, \quad \varepsilon_{bk} = \varepsilon_b + t_{bk}, \qquad (2)$$

где ε_a и ε_b задают центры зоны проводимости и валентной зоны соответственно. Квазиимпульсная зависимость спектра соответствует учету перескоков в пределах первой координационной сферы

$$t_{ak} = 2t_a(\cos(k_x) + \cos(k_y)), \\ t_{bk} = 2t_b(\cos(k_x) + \cos(k_y)), \qquad (3)$$

t_a и t_b – параметры перескоков для зоны проводимости и валентной зоны соответственно.

Ковалентное смешивание состояний ионов Hg и Te определяется функцией

$$\Gamma_{k\sigma} = -2t_{sp}\left\{\eta_\sigma \sin\frac{k_1 + k_2}{2} - i \sin\frac{k_1 - k_2}{2}\right\}, \qquad (4)$$

в которой интенсивность гибридизации задается параметром t_{sp}. При записи (4) учитывались фазы атомных спин-орбиталей [3].

Эффекты ЗФ связаны с добавлением оператора

$$\hat{V} = \sum_{f\in F,\delta} V \Delta\hat{n}_f \cdot \Delta\hat{n}_{f+\delta}, \qquad (5)$$

где V – параметр, определяющий энергию взаимодействия электронов, находящихся на ближайших ионах Hg и Te, соединяемых вектором δ. Среднеполевые вклады учтены в ε_a и ε_b.

Принято, что ионы Hg находятся в узлах F-подрешетки, нумеруемые посредством f. Узлы ионов Te образуют G-подрешетку и обозначаются буквой g.

В (5) операторы флуктуации электронной плотности на узле определяются выражениями

$$\Delta\hat{n}_f = \hat{n}_f - \langle\hat{n}_f\rangle, \quad \hat{n}_f = \sum_\sigma a^{+}_{f\sigma} a_{f\sigma}, \\ \Delta\hat{n}_g = \hat{n}_g - \langle\hat{n}_g\rangle, \quad \hat{n}_g = \sum_\sigma b^{+}_{f\sigma} b_{f\sigma}, \qquad (6)$$

в которых использовано представление Ванье

$$a_{f\sigma} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k e^{ikf} a_{k\sigma}, \ b_{g\sigma} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k e^{ikg} b_{k\sigma}, \qquad (7)$$

где N – число элементарных ячеек, а $\langle\hat{n}_{f(g)}\rangle$ – равновесное число электронов на узле в $F(G)$-подрешетке.

Добавление оператора $\hat{V}$ к гамильтониану $\hat{H}_{\mathrm{BHZ}}$ приводит к рассматриваемой модели $\mathrm{BHZ} + V$:

$$\hat{H}_{\mathrm{BHZ}+V} = \hat{H}_{\mathrm{BHZ}} + \hat{V}. \qquad (8)$$

3. Флуктуационная ренормировка локализованных уровней и расщепление зон. При учете корреляционных эффектов первые точные уравнения движения записываются в виде:

$$\left(i\frac{d}{dt} - \varepsilon_a - t_{ak}\right) a_{k\sigma} = \Gamma_{k\sigma} b_{k\sigma} + V A_{k\sigma}, \\ \left(i\frac{d}{dt} - \varepsilon_b - t_{bk}\right) b_{k\sigma} = \Gamma^{*}_{k\sigma} a_{k\sigma} + V B_{k\sigma}, \qquad (9)$$

где операторы

$$A_{k\sigma} = \frac{1}{N} \sum_{f\in F, q\delta} e^{if(q-k)} a_{q\sigma} \Delta\hat{n}_{f+\delta}, \qquad (10)$$

$$B_{k\sigma} = \frac{1}{N} \sum_{g\in G, q\delta} e^{ig(q-k)} b_{q\sigma} \Delta\hat{n}_{g+\delta}, \qquad (11)$$

отражают связь фермионов с ЗФ.

Из (9) видно, что V играет роль константы связи между фермионами и флуктуациями электронных плотностей. Если этот параметр не мал, то необходимо корректное описание отмеченной связи.

Решение такой задачи осуществим посредством расширения набора базисных операторов:

$$\{a_{k\sigma},\ b_{k\sigma}\} \longrightarrow \{a_{k\sigma},\ b_{k\sigma},\ A_{k\sigma},\ B_{k\sigma}\}. \tag{12}$$

Записывая уравнения для $A_{k\sigma}$ и $B_{k\sigma}$ и применяя метод Цванцинга–Мори [17, 18], получим

$$\left(i\frac{d}{dt} - \tilde{\varepsilon}_a - t_{ak}/2\right) A_{k\sigma} = M^*_{k\sigma} a_{k\sigma} + L_{k\sigma} b_{k\sigma},$$
$$\left(i\frac{d}{dt} - \tilde{\varepsilon}_b - t_{bk}/2\right) B_{k\sigma} = P_{k\sigma} a_{k\sigma} + M_{k\sigma} b_{k\sigma}. \tag{13}$$

В правых частях этих уравнений сохранены только главные вклады. При этом квазиимпульсные зависимости коэффициентов определяются выражениями:

$$M_{k\sigma} = 2h(2-h)V - \Gamma_{k\sigma}\frac{1}{N}\sum_q \Phi_{kq}\langle b^+_{q\sigma} a_{q\sigma}\rangle,$$
$$L_{k\sigma} = \frac{1}{N}\sum_q \Phi_{kq}[(t_{bq} - t_{aq} - t_{bk})\langle b^+_{q\sigma} a_{q\sigma}\rangle + \Gamma^{ab}_{q\sigma}],$$
$$P_{k\sigma} = \frac{1}{N}\sum_q \Phi_{kq}[(t_{aq} - t_{bq} - t_{ak})\langle a^+_{q\sigma} b_{q\sigma}\rangle + (\Gamma^{ba}_{q\sigma})^*],$$
$$\Phi_{kq} = 4\cos((k_x - q_x)/2)\cos((k_y - q_y)/2),$$
$$\Gamma^{ab}_{q\sigma} = \Gamma_{q\sigma}(n^a_{q\sigma} - n^b_{q\sigma}). \tag{14}$$

Кроме того, учитывалось, что узельная концентрация электронов валентной зоны незначительно отличается от 2 и описывается через концентрацию дырок h:

$$n_G = \frac{1}{N}\sum_g \langle \hat{n}_g\rangle = \frac{1}{N}\sum_{g\sigma}\langle b^+_{g\sigma} b_{g\sigma}\rangle = 2 - h. \tag{15}$$

Из условия равенства концентрации электронов проводимости и дырок следует уравнение для вычисления химпотенциала

$$n_F = \frac{1}{N}\sum_f \langle \hat{n}_f\rangle = \frac{1}{N}\sum_{f\sigma}\langle a^+_{f\sigma} a_{f\sigma}\rangle = h. \tag{16}$$

Из (13) следует, что зарядовые флуктуации сдвигают центры зон, связанных с композиционными операторами $A_{k\sigma}$ и $B_{k\sigma}$, поскольку в уравнения входят не затравочные величины ε_a и ε_b, а ренормированные: $\tilde{\varepsilon}_a$ и $\tilde{\varepsilon}_b$. Существенно, что флуктуационная ренормировка реализуется по различным сценариям:

$$\varepsilon_a \longrightarrow \tilde{\varepsilon}_a = \varepsilon_a - (1-h)V, \tag{17}$$
$$\varepsilon_b \longrightarrow \tilde{\varepsilon}_b = \varepsilon_b + (1-h)V. \tag{18}$$

В результате ЗФС, индуцируемая композиционным оператором $A_{k\sigma}$, смещается в направлении валентной зоны на величину $(1-h)V$. Подчеркнем, что эта ЗФС, как видно из (10), обусловлена когерентной суперпозицией состояний, каждое из которых комбинируется из фермионов зоны проводимости и связанных с ними флуктуациями электронной плотности в валентной зоне. Существенно, что ЗФС в энергетической шкале расположена ниже затравочной зоны проводимости. Поэтому в перестроенной энергетической структуре ТИ ЗФС играет роль ренормированной зоны проводимости.

Иное смещение имеет место для валентной ЗФС, генерируемой оператором $B_{k\sigma}$, когда происходит движение навстречу зоны проводимости на ту же самую величину $(1-h)V$. В этом случае ЗФС формируется посредством связывания фермионов валентной зоны с флуктуациями электронной плотности из зоны проводимости. Важно, что данная ЗФС смещена в сторону больших энергий и по этой причине в ренормированном спектре ТИ выдвигается на роль валентной зоны.

Причина различия связана со значениями квадрата флуктуации электронной плотности для валентной зоны и для зоны проводимости. В первом случае флуктуации происходят на фоне почти полного заполнения электронных уровней, и тогда:

$$(\Delta\hat{n}_g)^2 = h(2-h)/2 - (1-h)\Delta\hat{n}_g. \tag{19}$$

Для зоны проводимости флуктуации электронной плотности происходят при незначительном заполнении уровней. Поэтому оператор квадрата флуктуации электронной плотности имеет иное выражение

$$(\Delta\hat{n}_f)^2 = h(2-h)/2 + (1-h)\Delta\hat{n}_f. \tag{20}$$

Различие в знаках перед вторыми слагаемыми в правых частях этих равенств и приводит к различному смещению флуктуационных зон, поскольку электрон проводимости благодаря МКВ "зацепляется" за флуктуации плотности электронной плотности валентной зоны, тогда как электрон валентной зоны через МКВ связывается с флуктуациями электронной плотности в зоне проводимости.

4. Спектр возбуждений и плотность электронных состояний в модели BHZ + *V*. Из (9) и (13) следует, что спектр возбуждений ТИ определяется решениями дисперсионного уравнения

$$[(\omega - \varepsilon_{ak})(\omega - \varepsilon_{bk}) - |\Gamma_{k\sigma}|^2](\omega - \tilde{\varepsilon}_{ak})(\omega - \tilde{\varepsilon}_{bk}) -$$
$$- V[M_{k\sigma}(\omega - \varepsilon_{ak}) + \Gamma_{k\sigma}P_{k\sigma}](\omega - \tilde{\varepsilon}_{ak}) -$$
$$- V[M^*_{k\sigma}(\omega - \varepsilon_{bk}) + \Gamma^*_{k\sigma}L_{k\sigma}](\omega - \tilde{\varepsilon}_{bk}) +$$
$$+ V^2(|M_{k\sigma}|^2 - P_{k\sigma}L_{k\sigma}) = 0, \tag{21}$$

где

$$\tilde{\varepsilon}_{ak} = \tilde{\varepsilon}_a + t_{ak}/2, \quad \tilde{\varepsilon}_{bk} = \tilde{\varepsilon}_b + t_{bk}/2. \tag{22}$$

Коэффициенты уравнения являются функциями квазиимпульса, зависящими самосогласованным образом от термодинамических средних $\langle a^+_{q\sigma} b_{q\sigma}\rangle$, $\langle a^+_{q\sigma} a_{q\sigma}\rangle$, $\langle b^+_{q\sigma} b_{q\sigma}\rangle$.

Для их вычисления воспользуемся методом двухвременных функций Грина (ФГ). Применим матричный способ описания и введем оператор поля:

$$\hat{\Psi}_{k\sigma} = (a_{k\sigma},\ b_{k\sigma},\ A_{k\sigma},\ B_{k\sigma})^T.$$

С его помощью определим 16-ти компонентную матричную функцию Грина (ФГ) $\hat{G}_{k\sigma}(t-t')$:

$$\hat{G}_{k\sigma}(t-t') = -i\theta(t-t')\langle\{\hat{\Psi}_{k\sigma}(t), \hat{\Psi}^+_{k\sigma}(t')\}_+\rangle, \quad (23)$$

где $\theta(t-t')$ – единичная функция Хевисайда по временным аргументам t и t'. Под знаком термодинамического среднего стоит антикоммутатор от операторов поля, взятых в моменты времени t и t'.

Уравнение движения для ФГ запишется в виде:

$$[\omega\hat{I} - \hat{M}_{k\sigma}]\hat{G}_{k\sigma}(\omega) = \hat{S}_{k\sigma}, \quad (24)$$

где I – единичная матрица, а элементы матрицы $\hat{M}$ определяются из соответствия уравнений (9) и (13) с уравнением (24), ω – частота.

В правой части (24) стоит матрица $\hat{S}_{k\sigma}$:

$$\hat{S}_{k\sigma} = \langle\{\hat{\Psi}_{k\sigma}, \hat{\Psi}^+_{k\sigma}\}_+\rangle. \quad (25)$$

Уравнения самосогласования для термодинамических средних нетрудно получить из решения системы (24). При их анализе использовалась симметрийная классификация допустимых фаз [14, 19–21].

Опуская промежуточные вычисления, приведем результаты, связанные с влиянием ЗФ.

На рисунке 1 показан спектр фермиевских возбуждений. Видно, что при фиксированном значении одной из проекций квазиимпульса (в данном случае k_x) возникают четыре полосы значений энергии, в каждой из которых энергия фермиевского состояния меняется при изменении второй проекции квазиимпульса (k_y). При этом относительно узкие ЗФС примыкают к диэлектрической щели.

Приведенные результаты показывают, что ЗФ инициируют появление фермионов с увеличенной массой. В этой связи отметим, что аргумент о существовании в квантовой яме HgTe легких и тяжелых дырок использовался в работе [22] при интерпретации полученных экспериментальных данных по магнитным свойствам двумерных фермионов.

Учитывая этот результат, продемонстрируем, что ЗФ могут инициировать появление тяжелых дырок. С этой целью на рис. 2 показан энергетический спектр для направления $k_x = k_y$. Видно, что при малых концентрациях носителей тока в квантовой

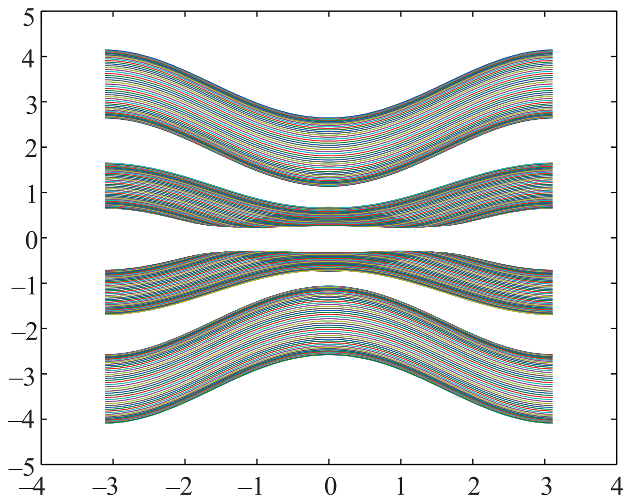

Рис. 1. (Цветной онлайн) Спектр энергий фермиевских состояний ТИ при учете кулоновских корреляций для $V = 1$, $t_a = -0.45$, $t_b = 0.45$, $t_{sp} = 0.2$, $h = 0.25$

яме будут заполняться состояния с тяжелыми дырками. При возрастании концентрации носителей начнут подключаться состояния с легкими дырками.

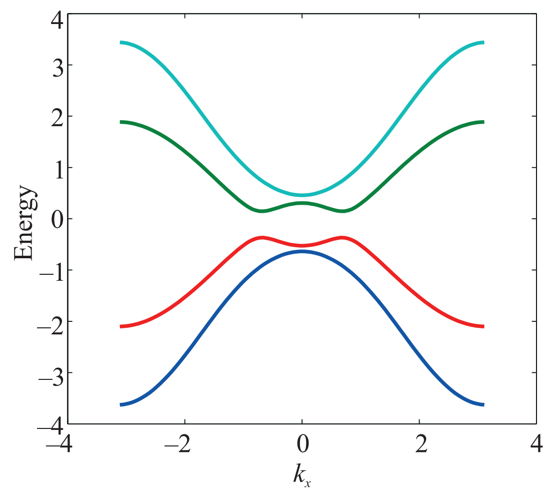

Рис. 2. (Цветной онлайн) Фермионный спектр ТИ для $k_x = k_y$ при $V = 0.5$, $h = 0.2$. Остальные параметры как на рис. 1

Следует подчеркнуть, что такому подключению способствует то, что для тяжелых дырок, соответствующих валентной ЗФС, спектральная интенсивность мала, т.к. она пропорциональна средне-квадратичной флуктуации плотности заряда в зоне проводимости. Это обстоятельство способствует быстрому переходу к режиму заполнения долин с легким дырками [22].

Заметим, что для фермионов Хаббарда ЗФС, располагаясь значительно ниже химпотенциала, приводила лишь к перераспределению заполнения фермионных состояний.

В данном случае ситуация кардинально иная, поскольку ЗФС играет определяющую роль в термодинамических свойствах ТИ.

Поскольку при разных значениях k_x энергетические интервалы полос разные, то происходит перекрытие расщепленных частей зоны проводимости и валентной зоны. В результате полная плотность состояний сохраняет только одну щель в спектре состояния. Такой случай продемонстрирован на рис. 3, где показано поведение плотности фермионных состояний ТИ. Заметим, что при удалении от верхнего края щели плотность состояний сильно уменьшается, но не обращается в нуль, поскольку имеется перекрытие зон.

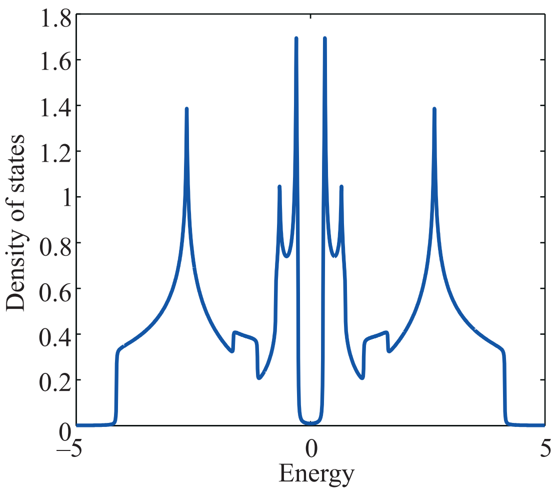

Рис. 3. (Цветной онлайн) Плотность фермионных состояний ТИ в модели BHZ $+\,V$. Параметры те же, что и на рис. 1

Для ТИ с меньшими значениями ширины затравочных зон происходит уменьшение перекрытия энергетических интервалов, и падение плотности состояний проявляется сильнее. При этом в режиме узкозонного ТИ, когда параметры перескоков по абсолютным величинам значительно меньше параметра межузельного кулоновского взаимодействия, происходит полное отщепление ЗФС, сопровождаемое появлением диэлектрических щелей и падением до нуля плотности состояний. Этот случай продемонстрирован рис. 4.

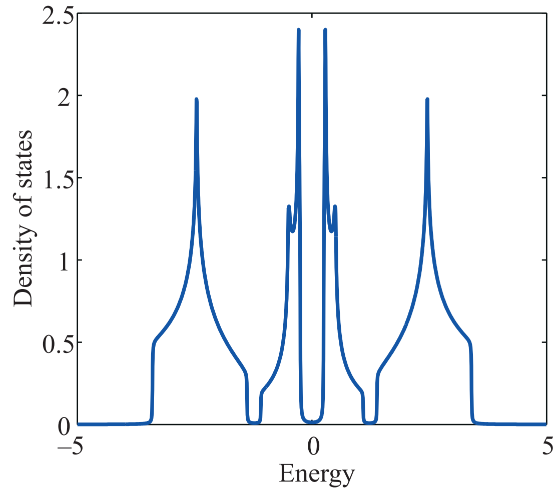

Рис. 4. (Цветной онлайн) Плотность фермионных состояний узкозонного ТИ в модели BHZ $+\,V$. Здесь $t_a = -0.3$, $t_b = 0.3$, остальные параметры те же, что и на рис. 1

5. Спектр краевых состояний в модели BHZ $+\,V$. В условиях расщепленной зонной структуры ТИ актуальным становится вопрос о положении спектра краевых состояний. Для ответа на него приведенная выше система уравнений самосогласования была решена для геометрии цилиндра. Результат вычислений энергетической структуры представлен на рис. 5. Для большей наглядности спектр показан для части зоны Бриллюэна, соответствующей относительно небольшим значениям квазиимпульса в направлении, для которого используются периодические граничные условия. Видно, что энергии краевых состояний расположены между валентной ЗФС и ЗФС электронов проводимости.

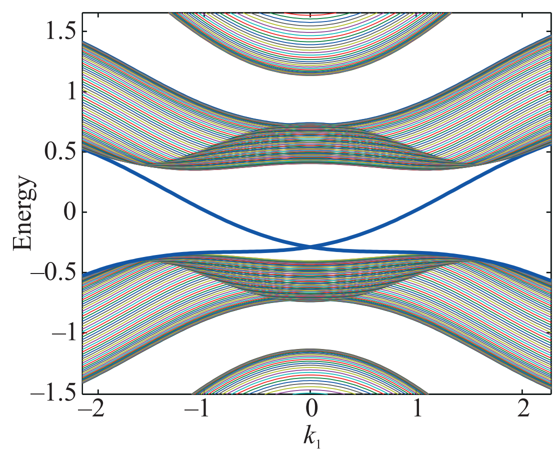

Рис. 5. (Цветной онлайн) Спектр объемных и краевых состояний ТИ в модели BHZ $+\,V$. Параметры те же, что и на рис. 1

Полученный результат означает, что при интерпретации свойств ТИ существенное значение приобретают особенности энергетической структуры, обусловленные ЗФ. Поскольку изменения ожидаются в материалах, для которых параметр МКВ не мал, сделаем несколько замечаний относительно параметра V в квантовой яме CdTe/CdHg/CdTe, описываемой моделью BHZ.

В этой модели спин-орбитальное взаимодействие входит в нулевой гамильтониан, на основе которого строится актуальный базис электронных состояний ионов Te [3]. При этом учитываются только две нижние по энергии спин-орбитали, тогда как наличием верхних спин-орбиталей пренебрегается.

Такой подход оправдан, если параметр перескока между спин-орбиталями, принадлежащим соседним ионам Te, не превосходит параметра спин-орбитальной связи. Это условие ограничивает допустимые значения параметра перескока валентной зоны: $|t_b| \lesssim |\lambda|$, λ – константа спин-орбитального взаимодействия. Учитывая реальные значения λ, следует ожидать, что величина кулоновского взаимодействия между электронами, находящимися на соседних ионах Te и Hg, соответствует случаю, когда V не меньше других энергетических параметров модели BHZ и энергетическая структура квантовой ямы для ширины, соответствующей режиму ТИ, должна описываться моделью $\mathrm{BHZ} + V$.

В этом случае, как видно из рис. 5, краевые состояния примыкают к двум ЗФС, для которых имеет место значительная ренормировка эффективных масс. Соответственно этому существенно изменятся и такие характеристики, как электронная теплоемкость, магнитная восприимчивость и т.д.

6. Заключение. В заключение подчеркнем, что для фазы ТИ, когда реализуется инвертированное расположение потолка валентной зоны и дна зоны проводимости, включение МКВ электронов приводит к качественному изменению энергетического спектра и плотности фермионных состояний, как только параметр МКВ не является малым по сравнению с интегралами перескоков.

Главная модификация связана с индуцированием двух ЗФС, при котором полный спектр фермиевских возбуждений ТИ характеризуется четырехполосной энергетической структурой.

Существенно, что в спектральном и термодинамическом отношениях ЗФС играют главную роль, поскольку они находятся в непосредственной близости к щели в спектре объемных состояний и между ними располагается спектр краевых состояний ТИ. При этом потолку валентной зоны и дну зоны проводимости соответствуют квазичастицы из ЗФС с ренормированными эффективными массами (в нашем случае $m^* \gtrsim 2m$). Такое возрастание массы квазичастиц обусловлено коррелированным движением фермионов с окружающими его зарядовыми флуктуациями. Возрастание энергии вблизи дна зоны проводимости сопровождается падением плотности состояний, соответствующим псевдощелевому поведению.

Для режима узкозонного ТИ p-типа, когда параметр межузельного кулоновского взаимодействия превосходит параметры перескоков, плотность состояний уменьшается до нуля и образуется дополнительная энергетическая щель.

Аналогичная картина имеет место для плотности электронных состояний вблизи потолка валентной зоны.

Следует заметить, что предсказанные особенности энергетической структуры, вызванные зарядовыми флуктуациями, будут иметь место не только для рассмотренной модели, но также и для других многозонных моделей полуметаллов.

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

1. B. A. Bernevig, T. L. Hughes, and S.-C. Zhang, Science **314**, 1757 (2006).
2. L. Fu and C. L. Kane, Phys. Rev. B. **76**, 045302 (2007).
3. X. Dang, J. D. Burton, A. Kalitsov, J. P. Velev, and E. Y. Tsymbal, Phys. Rev. B **90**, 155307 (2014).
4. D. V. Khomitsky and A. A. Chubanov, ЖЭТФ **145**, 525 (2014).
5. В. А. Волков, В. В. Еналдиев, ЖЭТФ **149**, 702 (2016).
6. Ф. Бег, П. Пужоль, Р. Рамазашвили, ЖЭТФ **153**, 108 (2018).
7. L. Fidkovskii and A. Kitaev, Phys. Rev. B **81**, 134509 (2010).
8. C. Wang and T. Senthil, Phys. Rev. B **89**, 195124 (2014).
9. Ch.-K. Chiu, J. C. Y. Teo, A. P. Scnyder, and S. Ryu, Rev. Mod. Phys. **88**, 035005 (2016).
10. S. V. Aksenov, A. O. Zlotnikov, and M. S. Shustin, Phys. Rev. B **101**, 125431 (2020).
11. Л. В. Келдыш, Ю. В. Копаев, ФТТ **6**, 2791 (1964).
12. А. Н. Козлов, Л. А. Максимов, ЖЭТФ **48**, 1184 (1965).
13. J. de Cloiseaux, J. Phys. Chem. Solids **26**, 259 (1965).
14. В. В. Вальков, Письма в ЖЭТФ **111**, 772 (2020).
15. V. V. Val'kov and M. M. Korovushkin, Eur. Phys. J. B **69**, 219 (2009).
16. В. В. Вальков, М. М. Коровушкин, ЖЭТФ **139**, 126 (2011).
17. R. Zwanzig, Phys. Rev. **124**, 983 (1961).
18. H. Mori, Prog. Theor. Phys. **33**, 423 (1965).
19. S. Zhou and Z. Wang, Phys. Rev. Lett. **100**, 217002 (2008).
20. В. В. Вальков, А. О. Злотников, Письма в ЖЭТФ **109**, 769 (2019).
21. В. В. Вальков, Т. А. Валькова, В. А. Мицкан, Письма в ЖЭТФ **102**, 399 (2015).
22. А. Ю. Кунцевич, Е. В. Тупиков, С. А. Дворецкий, Н. Н. Михайлов, М. Резников, Письма в ЖЭТФ **111**, 750 (2020).