

Энергетический спектр и транспорт в узких квантовых ямах HgTe

© А.В. Германенко[¶], Г.М. Миньков^{*¶}, О.Э. Рут,
А.А. Шерстобитов^{*}, С.А. Дворецкий⁺, Н.Н. Михайлов⁺

Институт естественных наук, ФГАОУ ВПО „УрФУ им. первого Президента России Б.Н. Ельцина“,
620000 Екатеринбург, Россия

^{*} Институт физики металлов Уральского отделения Российской академии наук,
620990 Екатеринбург, Россия

⁺ Институт физики полупроводников им. А.В. Ржанова Сибирского отделения Российской академии наук,
630090 Новосибирск, Россия

(Получена 23 мая 2014 г. Принята к печати 15 июня 2014 г.)

Приводятся результаты экспериментального исследования явлений переноса и электронного и дырочного энергетического спектра двумерных систем в квантовой яме бесщелевого полупроводника HgTe с нормальным расположением подзон размерного квантования. Анализ экспериментальных данных позволил нам реконструировать энергетический спектр носителей заряда вблизи экстремумов дырочной и электронной подзон. Интерпретация полученных результатов проведена с использованием стандартной kP модели.

Квантовые ямы на основе бесщелевых полупроводников HgTe являются уникальными объектами, демонстрирующими яркие физические свойства, благодаря сильному спин-орбитальному взаимодействию, формирующему спектр теллурида ртути. Несмотря на то что эти системы интенсивно исследуются последнее десятилетие, сведения об энергетическом спектре до сих пор являются противоречивыми. В особенности это относится к спектру дырочных состояний [1–4].

В настоящей работе приведены результаты экспериментального исследования сопротивления и эффекта Холла в гетероструктуре с одиночной квантовой ямой (013) — Hg_{0.42}Cd_{0.58}Te/HgTe/Hg_{0.45}Cd_{0.55}Te с номинальной шириной квантовой ямы $d = 5.8$ нм, что соответствует нормальному расположению подзон размерного квантования. Измерения проводились на образцах в форме холловских мостиков, на основе которых были изготовлены полевые транзисторы. В качестве подзатворного диэлектрика использовался парилен. Это позволяло изменять и контролировать проводимость и концентрацию носителей заряда в яме в широких пределах.

Типичные зависимости поперечного (ρ_{xy}) и продольного (ρ_{xx}) сопротивлений от магнитного поля, измеренные при $T = 1.35$ К при разных напряжениях на полевом электроде (V_g), приведены на рис. 1. Отметим две яркие особенности экспериментальных кривых. Первая особенность — в режиме квантового эффекта Холла на зависимостях $\rho_{xy}(B)$ отсутствуют плато, соответствующие фактору заполнения $N = 3$ и $N = 6$ (рис. 1, *b*). Вторая — осцилляции Шубникова–де-Гааза имеет сложную структуру, что подтверждается спектрами Фурье, имеющими два максимума (см. вставку на рис. 1, *a*).

Как видно из рис. 1, *a*, поперечное сопротивление ρ_{xy} в малых магнитных полях ($B \leq 0.5$ Тл) линейно. Поэтому можно считать, что эффект Холла определяется одним сортом носителей, концентрация которых может быть экспериментально определена как $p_H = 1/eR_H$,

где $R_H = \rho_{xy}/B$ — коэффициент Холла при $B \leq 0.5$ Тл (в дальнейшем так определенную концентрацию дырок будем называть холловской концентрацией). Зависимость холловской концентрации p_H от напряжения на полевом электроде V_g показана на рис. 2 ромбиками. Видно, что в диапазоне напряжений $V_g > -2.5$ В экспериментальные точки хорошо ложатся на прямую линию, причем наклон этой прямой практически совпадает с величиной $C/e = (1.4 \pm 0.15) \cdot 10^{10}$ см⁻² В⁻¹, где C — экспериментально измеренная емкость между полевым электродом и двумерным газом. При более отрицательном напряжении на затворе $V_g < -3$ В зависимость $p_H(V_g)$ становится более пологой, что, как будет показано далее, может быть связано с особенностями спектра валентной зоны.

Сопоставим теперь эти результаты с данными, полученными из анализа осцилляций Шубникова–де-Гааза. Как отмечалось выше, в спектрах Фурье имеется два четко выраженных максимума, и, как видно из вставки на рис. 1, *b*, частоты этих максимумов отличаются примерно в 2 раза. Хорошо известно [5], что аналогичная картина наблюдается в том случае, когда уровни Ландау расщеплены по спину за счет эффекта Зеемана. Если предположить, что это действительно так, то положение основного пика должно определяться концентрацией дырок p в соответствии с формулой $B_f^1 = \pi \hbar p / e$, а положение второго пика есть просто удвоенная величина B_f^1 : $B_f^2 = 2B_f^1$. Легко убедиться, что такая интерпретация в нашем случае неверна: концентрация дырок, полученная таким способом ($p = B_f^1 e / \pi \hbar$), в 1.5 раза меньше холловской концентрации во всем диапазоне V_g . Это противоречие можно разрешить в следующей модели.

Энергетический спектр носителей в квантовых ямах HgTe формируется под влиянием сильного спин-орбитального взаимодействия и поэтому сильно чувствителен к асимметрии квантовой ямы. Если предположить, что квантовая яма асимметрична настолько, что две частоты в спектрах осцилляций соответствуют двум вет-

[¶] Email: Alexander.Germanenko@urfu.ru

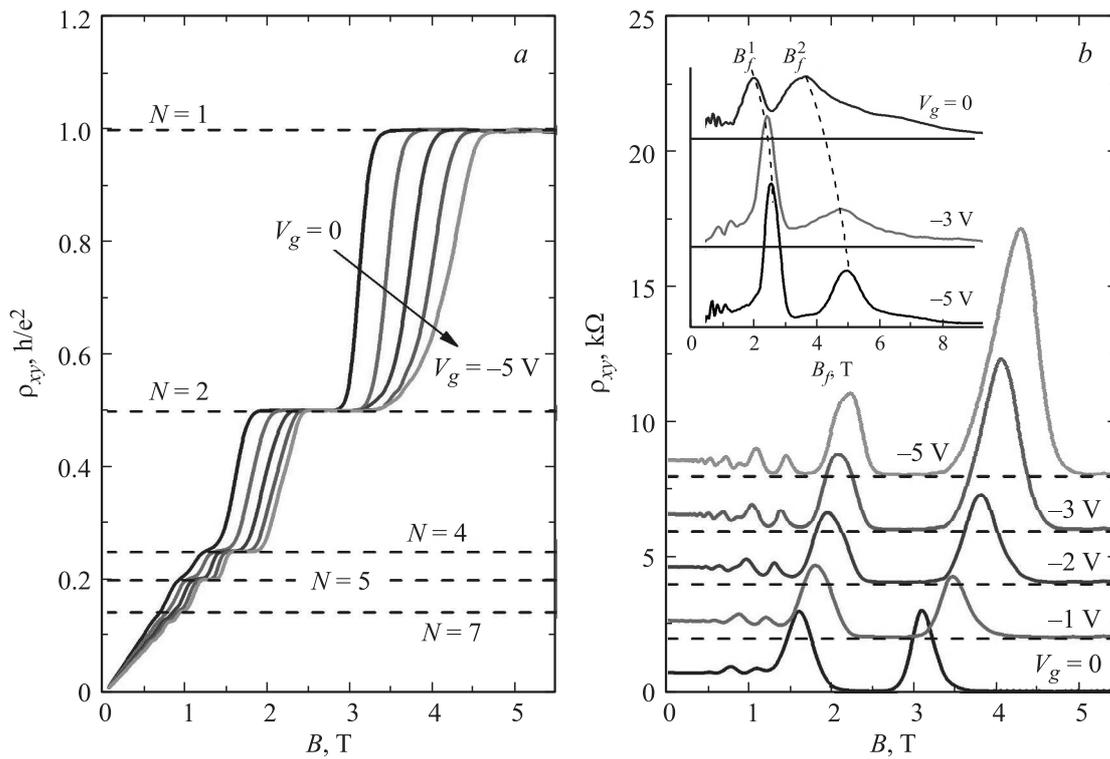


Рис. 1. Зависимости ρ_{xy} (a) и ρ_{xx} (b) от магнитного поля, измеренные при разных напряжениях на полевом электроде, $T = 1.35$ К. На вставке показаны спектры Фурье осцилляций Шубникова-де-Гааза, полученные в области малых магнитных полей ($B < 1.2$ Тл) до перехода в режим квантового эффекта Холла.

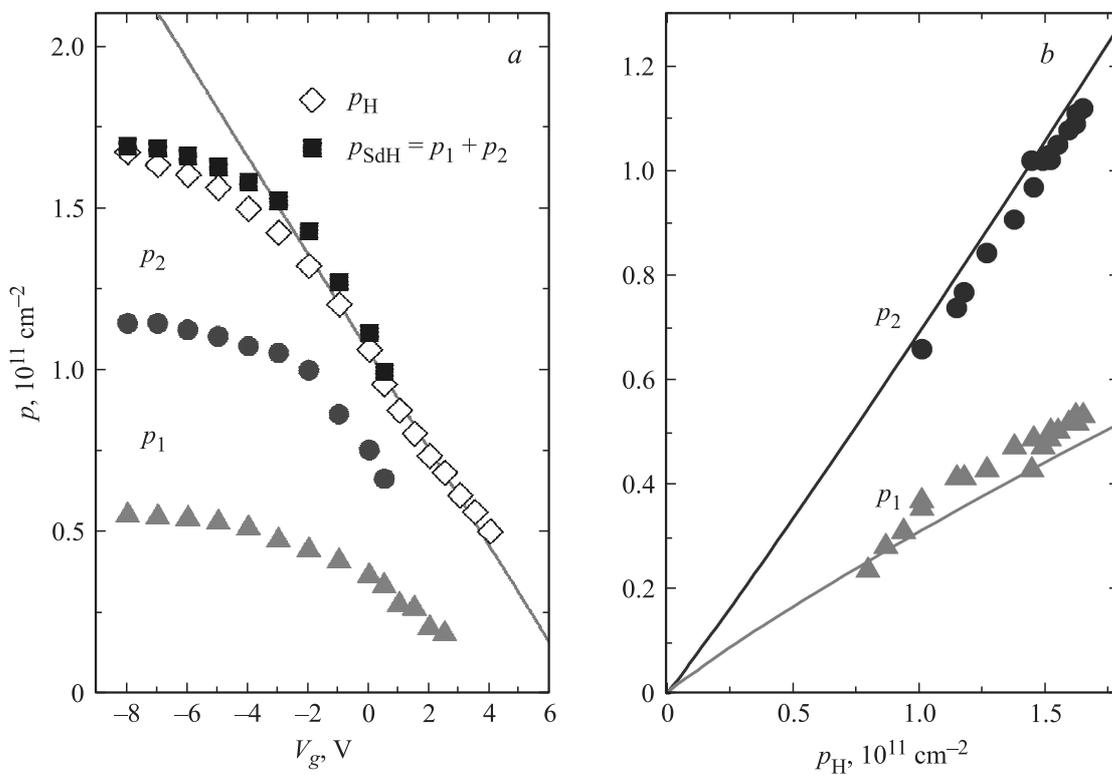


Рис. 2. a — зависимости концентраций дырок в спиновых ветвях (p_1 и p_2) и общей концентрации дырок от напряжения на полевом электроде. Прямая линия имеет наклон $1.5 \cdot 10^{10} \text{ cm}^{-2} \text{ V}^{-1}$. b — зависимости концентраций дырок в спиновых ветвях от общей концентрации дырок.

вям спектра, расщепленным сильным спин-орбитальным взаимодействием, то данные, полученные из анализа осцилляций Шубникова–де-Гааза и из эффекта Холла, окажутся в хорошем согласии друг с другом. Действительно, если концентрацию дырок в расщепленных ветвях (p_1 и p_2) находить из положения фурье-пиков с учетом отсутствия спинового вырождения, т.е. по формулам $p_1 = B_f^1 e / 2\pi\hbar$ и $p_2 = B_f^2 e / 2\pi\hbar$, а общую концентрацию дырок находить как $p_{\text{sdH}} = p_1 + p_2$, то зависимости $p_{\text{sdH}}(V_g)$ и $p_{\text{H}}(V_g)$ практически совпадут друг с другом (см. рис. 2, *a*).

На первый взгляд столь сильная величина спин-орбитального расщепления спектра, когда концентрация носителей в ветвях отличается вдвое (рис. 2, *a* и *b*), в номинально симметричной гетероструктуре кажется удивительной. Однако для этого есть разумное объяснение. Рост барьеров Hg_{1-x}Cd_xTe в установке молекулярно-пучковой эпитаксии происходит при избытке теллура, и сразу по окончании роста они имеют достаточно большую концентрацию вакансий ртути, которые, как известно, являются акцепторами. В этом случае основными носителями в яме должны быть дырки. Однако, как правило, после эвакуации гетероструктур из ростовой камеры проводимость оказывается электронной. Это связано с тем, что по окончании роста в камере остается избыток ртути и при достаточно медленном остывании происходят отжиг вакансий и конверсия проводимости. Если остывание происходит быстро, или остаточное давление ртути невелико, то отжигается лишь верхний барьер Hg_{1-x}Cd_xTe, в то время как нижний остается *p*-типа. При этом квантовая яма HgTe оказывается встроенной в *p*-*n*-переход, т.е. находится в сильном электрическом поле.

Исследуя осцилляции Шубникова–де-Гааза, можно получить информацию не только о концентрации носителей, но и об эффективной массе. Как видно из рис. 3, *a*, в малых магнитных полях ($B < 0.4$ Тл) фурье-спектр осцилляций содержит только одну низкочастотную компоненту, соответствующую дыркам с концентрацией p_1 . Следовательно, эффективная масса, найденная из анализа температурных зависимостей амплитуды осцилляций стандартным способом в малых магнитных полях, будет соответствовать дыркам с меньшей величиной квазиимпульса Ферми. Результаты такой обработки показаны на рис. 3 в виде зависимости m_1 от $k = \sqrt{p_1/4\pi}$. Видно, что эффективная масса дырок сильно растет с ростом квазиимпульса Ферми, что говорит о сильной непараболичности спектра.

Определить экспериментально эффективную массу дырок во второй расщепленной ветви оказалось существенно сложнее. Нами была использована следующая процедура. При каждой температуре спектр Фурье, полученный в широком диапазоне полей ($B < 1.1$ Тл), был аппроксимирован двумя лоренцианами, как это показано на рис. 3, *b*, после чего осуществлялось обратное преобразование Фурье только одного лоренциана с

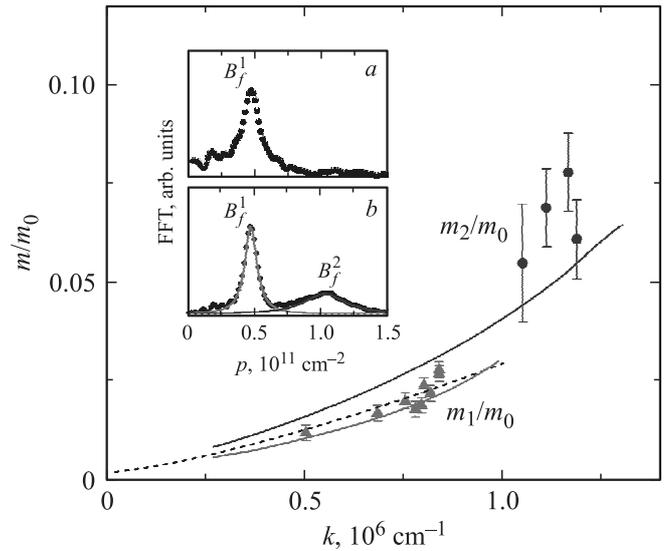


Рис. 3. Зависимость эффективной массы дырок для двух спиновых ветвей от квазиимпульса. Символы — экспериментальные данные, пунктирная кривая — интерполяция экспериментальной зависимости $m_1(k)$, использованная для нахождения закона дисперсии $E(k)$, сплошные кривые — результат теоретического расчета, описанного в тексте. На вставке показаны результаты преобразования Фурье осцилляций Шубникова–де-Гааза, выполненного в двух диапазонах магнитных полей: $B < 0.4$ Тл (*a*) и $B < 1.1$ Тл (*b*). Символы — спектр Фурье экспериментальных кривых. Кривые на (*b*) — два лоренциана, сумма которых есть наилучший результат подгонки экспериментального спектра Фурье.

центральной частотой B_f^2 . Затем по температурной зависимости амплитуды восстановленных таким способом осцилляций была определена эффективная масса дырок, соответствующих второй ветви (показана кружочками на рис. 3). Видно, что масса дырок в расщепленных ветвях существенно различна.

В принципе, зная эффективную массу при различных концентрациях, можно восстановить и закон дисперсии $E(k)$, если предположить, что он не меняется (или меняется слабо) при изменении формы ямы при изменении напряжения на полевом электроде. С этой целью мы интерполировали экспериментальную зависимость $m_1(k)$ плавной кривой, как это показано на рис. 3 пунктирной линией, и нашли зависимость $E(k) = \int_0^k k/m(k)dk$, показанную треугольниками на рис. 4, *a*. Поскольку ошибка в определении $m_2(k)$ для второй ветви существенно выше и количество точек меньше, спектр для этой ветви был получен из спектра первой ветви простым изменением масштаба по оси k : $k_2 = \sqrt{2}k_1$, что соответствует отношению концентраций дырок в ветвях, равному двум (см. рис. 2).

Таким образом, анализ экспериментальных данных показал, что спектр дырок в исследованных квантовых ямах HgTe расщеплен на две невырожденных по спину

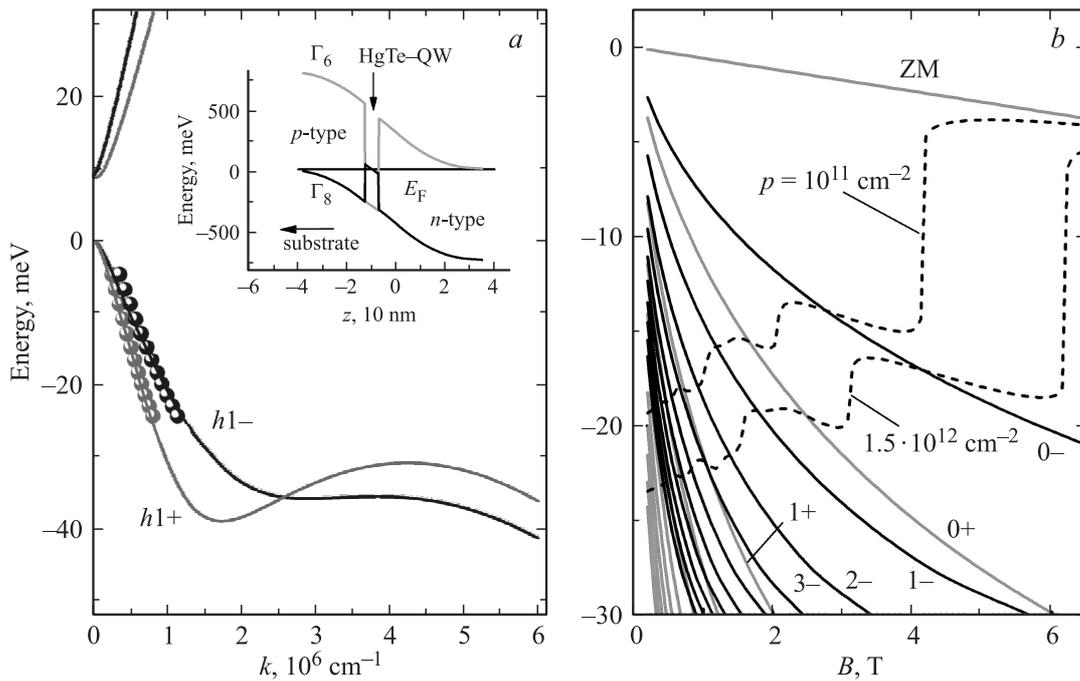


Рис. 4. *a* — закон дисперсии дырочной и валентной зон для квантовой ямы HgTe, помещенной в электрическое поле p – n -перехода, как показано на вставке. Символы — экспериментальные данные, кривые — результат теоретического расчета, выполненного в kP модели, как описано в тексте. *b* — зависимость энергий уровней Ландау и уровня Ферми (для двух значений p) от магнитного поля для квантовой ямы, спектр которой в отсутствие магнитного поля показан на панели (*a*).

ветви. Расщепление является большим: концентрации дырок в ветвях отличаются примерно в 2 раза. Экспериментальная эффективная масса сильно зависит от квазиимпульса и существенно различна для двух ветвей.

Для проверки адекватности нашей интерпретации и для количественного описания полученных данных мы рассчитали энергетический спектр двумерных состояний в исследованных гетероструктурах. Для расчета использована стандартная kP модель, учитывающая взаимодействие легкой зоны Γ_8 и зоны Γ_6 точно, а взаимодействие с удаленными зонами с точностью до членов порядка k_2 . Использовано аксиальное приближение. Уравнение Шредингера и уравнение Пуассона решались методом прямого численного интегрирования [6]. В расчетах использованы параметры из работ [7,8]. Концентрация акцепторов в нижнем барьере и концентрация доноров в верхнем для простоты полагались равными друг другу $N_d = N_a = N_i$, компенсация отсутствовала. Именно величина N_i определяет величину электрического поля в p – n -переходе, а следовательно, и величину спин-орбитального расщепления спектра. В нашем случае хорошее согласие между экспериментальными и рассчитанными зависимостями концентраций дырок в расщепленных ветвях от общей концентрации дырок (см. рис. 2, *b*) получается при $N_i = 3 \cdot 10^{17} \text{ см}^{-3}$. Рассчитанные зависимости энергии носителей от квазиимпульса и энергетическая диаграмма показаны на рис. 4, *a*. На том же рисунке символами показан восстановленный из экспериментальных данных закон дисперсии

для потолка валентной зоны. Видно, что рассчитанные кривые идут практически по экспериментальным точкам. Столь же хорошее согласие эксперимента и модельных расчетов наблюдается и при описании зависимости эффективной массы дырок от квазиимпульса (рис. 3).

Важным аргументом в пользу предложенной интерпретации является наличие отмеченной выше особенности в поведении $\rho_{xy}(B)$, выражающаяся в отсутствии плато в режиме квантового эффекта Холла, соответствующих фактору заполнения 3 и 6 (рис. 1, *b*). Для объяснения такого явления необходимо рассчитать уровни Ландау для данной структуры, что может быть сделано численно решением соответствующей задачи на собственные значения [8,9]. Однако качественное объяснение можно получить в рамках квазиклассического подхода, согласно которому энергия n -го уровня Ландау в поле B может быть получена из закона дисперсии $E(k)$ в нулевом магнитном поле заменой $k^2 \rightarrow (2n+1)eB/\hbar$, $n = 0, 1, \dots$. Результат такого расчета для спектра, показанного на рис. 4, *a*, представлен на рис. 4, *b*. Цифры на кривых — это значение n , знаки плюс и минус соответствуют ветвям $h1^+$ и $h1^-$ на рис. 4, *a*. Уровень Ландау, обозначенный ZM , является аномальным [8–10], его энергия не может быть получена в рамках квазиклассического приближения. На том же рисунке показан ход уровня Ферми в магнитном поле, рассчитанный в предположении $p_1 + p_2 = \text{const}(B)$, размытие уровней Ландау при этом полагалось равным 1 мэВ и независимым от магнитного поля. Хорошо видно, что

уровни Ландау 1^+ и 3^- в области их пересечения с уровнем Ферми являются слившимися. Расстояние между уровнями 0^+ и 1^- в области их пересечения с уровнем Ферми также оказывается сравнительно небольшим. Это означает, что щель локализованных состояний между этими уровнями может отсутствовать, что и должно привести к исчезновению плато, соответствующих факторам заполнения 3 и 6 в режиме квантового эффекта Холла.

Наконец, стремление кривых $\rho_H(V_g)$ к насыщению при уменьшении напряжения на полевом электроде также может быть объяснено в рамках предлагаемой модели. Как видно из рис. 2, заметное отклонение $\rho_H(V_g)$ от прямой линии наблюдается при $\rho_H \simeq 1.5 \cdot 10^{11} \text{ см}^{-2}$. Энергия Ферми при этой концентрации (см. рис. 4, *b*) примерно равна -25 мэВ . Как видно из рис. 4, *a*, именно при этой энергии располагаются боковые минимумы в дисперсии валентной зоны с большой эффективной массой. Если состояния вблизи этих экстремумов локализованы за счет любого вида беспорядка, то дырки в этих экстремумах не будут давать заметного вклада в проводимость. Она будет определяться только дырками, заполняющими состояния центральных максимумов, тогда как скорость погружения уровня Ферми в валентную зону с уменьшением V_g будет контролироваться большой плотностью состояний боковых максимумов.

В заключение мы хотели бы напомнить основной результат, полученный нами в работах [4,11] для квантовых ям HgTe шириной 20.2 нм с инверсным расположением подзон, в которых потолок валентной зоны является зоной h_2 , а не h_1 , как в ямах с нормальным спектром: экспериментально восстановленный закон дисперсии вблизи потолка валентной зоны в таких системах существенно отличается от результатов теоретического расчета.

Таким образом, приведенные в данной работе результаты наряду с результатами [4,11] показывают, что экспериментальные данные, относящиеся к спектру легких носителей заряда (как дырок, так и электронов), находятся в хорошем согласии с результатами расчетов, выполненных в рамках традиционной kP модели. Это относится к квантовым ямам как с нормальным, так и инверсным расположением подзон размерного квантования. Когда речь идет о спектре состояний со сравнительно большой эффективной массой (порядка и больше массы тяжелой дырки в родительском объемном материале), экспериментальные результаты не описываются в рамках традиционного подхода.

Следует отметить, что аналогичное несоответствие теории и эксперимента при описании спектра тяжелых дырок наблюдается не только в двумерных системах на основе бесщелевых полупроводников, но и в квантовых ямах на основе классических гетероструктур $A^{III}B^V$ [12,13]. Адекватная интерпретация отсутствует до сих пор.

Авторы выражают благодарность В.Я. Алешкину и М.С. Жолудеву за полезное обсуждение результатов.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (гранты № 12-02-00098 и 13-02-00322) и Министерства образования и науки РФ в рамках базовой части.

Список литературы

- [1] G. Landwehr, J. Gerschütz, S. Oehling, A. Pfeuffer-Jeschke, V. Latussek, C.R. Becker. *Physica E*, **6**, 713 (2000).
- [2] K. Ortner, X.C. Zhang, A. Pfeuffer-Jeschke, C.R. Becker, G. Landwehr, L.W. Molenkamp. *Phys. Rev. B*, **66**, 075 322 (2002).
- [3] Z.D. Kvon, E.B. Olshanetsky, E.G. Novik, D.A. Kozlov, N.N. Mikhailov, I.O. Parm, S.A. Dvoretzky. *Phys. Rev. B*, **83**, 193 304 (2011).
- [4] G.M. Minkov, A.V. Germanenko, O.E. Rut, A.A. Sherstobitov, S.A. Dvoretzki, N.N. Mikhailov. *Phys. Rev. B*, **88**, 155 306 (2013).
- [5] И.М. Цидильковский. *Электроны и дырки в полупроводниках* (М., Наука, 1972).
- [6] V.A. Larionova, A.V. Germanenko. *Phys. Rev. B*, **55**, 13 062 (1997).
- [7] X.C. Zhang, A. Pfeuffer-Jeschke, K. Ortner, V. Hock, H. Buhmann, C.R. Becker, G. Landwehr. *Phys. Rev. B*, **63**, 245 305 (2001).
- [8] E.G. Novik, A. Pfeuffer-Jeschke, T. Jungwirth, V. Latussek, C.R. Becker, G. Landwehr, H. Buhmann, L.W. Molenkamp. *Phys. Rev. B*, **72**, 035 321 (2005).
- [9] M.S. Zholudev, A.V. Ikonnikov, F. Teppe, M. Orlita, K.V. Maremyanin, K.E. Spirin, V.I. Gavrilenko, W. Knap, S.A. Dvoretzkiy, N.N. Mihailov. *Nanoscale Research Lett.*, **7**, 534 (2012).
- [10] B. Buttner, C.X. Liu, G. Tkachov, E.G. Novik, C. Brune, H. Buhmann, E.M. Hankiewicz, P. Recher, B. Trauzettel, S.C. Zhang, L.W. Molenkamp, *Nature Phys.*, **7**, 418 (2011).
- [11] А.В. Германенко, Г.М. Миньков, О.Э. Рут, А.А. Шерстобитов, С.А. Дворецкий, Н.Н. Михайлов. *ФТП*, **47**, 1586 (2013).
- [12] Shawn-Yu Lin, H.P. Wei, D.C. Tsui, J.F. Klem. *Appl. Phys. Lett.*, **67**, 2170 (1995).
- [13] G.M. Minkov, A.A. Sherstobitov, A.V. Germanenko, O.E. Rut, V.A. Larionova, B.N. Zvonkov. *Phys. Rev. B*, **72**, 165 325 (2005).

Редактор Т.А. Полянская

Energy spectrum and transport in HgTe quantum wells

A.V. Germanenko, G.M. Minkov, O.E. Rut,
A.A. Sherstobitov*, S.A. Dvoretzky⁺, N.N. Mikhailov⁺*

Institute of Natural Sciences, Ural Federal University,
620000 Ekaterinburg, Russia

* Institute of Metal Physics,
Russian Academy of Sciences,
620990 Ekaterinburg, Russia

⁺ Rzhanov Institute of Semiconductor Physics,
Siberian Branch, Russian Academy of Sciences,
630090 Novosibirsk, Russia

Abstract The results of an experimental study of the energy spectrum of the valence band in a HgTe quantum well with normal spectrum in the presence of a strong spin-orbit splitting are reported. The analysis of the temperature, magnetic field and gate voltage dependences of the Shubnikov–de Haas oscillations allows us to restore the energy spectrum of the two valence band branches, which are split by the spin-orbit interaction. The comparison with the theoretical calculation shows that a six-band kP theory well describes all the experimental data in the vicinity of the top of the valence band.