Проявление полуметаллического состояния в циклотронном резонансе низкосимметричных квантовых ям на основе HgTe

А. А. Грешнов¹⁾⁺, Ю. Б. Васильев⁺, Н. Н. Михайлов^{*}, Г. Ю. Васильева^{+×}, Д. Смирнов[°]

+ Физико-технический институт им. Иоффе РАН, 194021 С.-Петербург, Россия

*Институт физики полупроводников им. Ржанова СО РАН, 630090 Новосибирск, Россия

[×] С.-Петербургский государственный политехнический университет, 195251 С.-Петербург, Россия

°National High Magnetic Field Laboratory, Tallahassee, 32310 Florida, USA

Поступила в редакцию 29 ноября 2012 г. После переработки 11 декабря 2012 г.

Проведены измерения циклотронного резонанса в квантовых ямах HgTe/CdHgTe толщиной 21 нм с различными кристаллографическими ориентациями плоскостей ям. Исследования показали, что в отличие от структур с ориентацией (001) ямы с ориентацией (013) находятся в полуметаллическом состоянии, а их спектры поглощения содержат линии циклотронного резонанса как электронов, так и дырок. Одновременное наблюдение двух типов носителей связано с перекрытием верхних подзон размерного квантования тяжелых дырок (hh1, hh2), которое обусловлено их сильным взаимодействием с интерфейсным состоянием Дьяконова–Хаецкого. Расчет, проведенный в рамках восьмизонного kp-гамильтониана, показал, что для известных зонных параметров перекрытия ветвей hh2 и hh1 не происходит в согласии с данными по циклотронному резонансу в структурах с ориентацией (001). Для объяснения перекрытия подзон в квантовых ямах HgTe с ориентацией, отличной от (001), предлагается механизм усиления взаимодействия тяжелых дырок с интерфейсными состояниями за счет присутствия ступенек на гетерогранице низкосимметричных квантовых ям.

DOI: 10.7868/S0370274X13020082

Введение. В настоящее время методами молекулярно-пучковой эпитаксии изготавливаются гетероструктуры высокого качества с квантовыми ямами НgTe различной толщины, обладающие интересными физическими свойствами. В частности, было обнаружено [1], что достаточно широкие $(d \gtrsim 20\,\mathrm{hm})$ квантовые ямы HgTe с ориентацией плоскости (013) являются полуметаллами, т.е. имеет место перекрытие зоны проводимости и валентной зоны. В недавней работе [2] были проведены магнетотранспортные измерения, показавшие наличие полуметаллического состояния также и в широких квантовых ямах с ориентацией (112). В данной работе изучается зонная структура квантовых ям HgTe/CdHgTe шириной 21 нм методом магнетопоглощения в терагерцовой области спектра с целью исследования полуметаллического состояния в структурах с различной кристаллографической ориентацией плоскости ям и объяснения природы возникновения полуметаллического состояния. Ранее рассматриваемые структуры изучались магнетотранспортными методами [3] и методами фотопроводимости в микроволновой и терагерцовой областях спектра [4, 5]. Однако, как показали недавние исследования [6], сигнал фотопроводимости в широких квантовых ямах HgTe/CdHgTe определяется в большей степени болометрической компонентой, а не циклотронной. Поэтому при исследовании циклотронного резонанса следует применять методику прямого измерения поглощения [7, 8]. Для анализа полученных нами данных по циклотронному поглощению использовалась восьмизонная модель Пиджина–Брауна [9], учитывающая как прямое *kp*-взаимодействие валентной зоны и зоны проводимости, так и латтинжеровские слагаемые. Расчеты, проведенные в рамках такой модели, показали, что причиной образования полуметалла является немонотонное поведение дисперсионной зависимости второй подзоны размерного квантования тяжелых дырок *hh*2, возникающее вследствие взаимодействия с интерфейсным состоянием Дьяконова-Хаецкого [10]. Однако достичь перекрытия hh2 с подзоной hh1, необходимого для образования полуметалла, используя известные из литературы зонные парамет-

¹⁾e-mail: a _greshnov@hotmail.com

ры, не удается. Возникновение полуметаллического состояния в квантовых ямах HgTe с ориентацией, отличной от (001), в частности с ориентацией (013), объясняется усилением взаимодействия тяжелых дырок с интерфейсными состояниями за счет неровных гетерограниц аналогично явлению конверсии тяжелых дырок в легкие при отражении от наклонного барьера [11].

1. Эксперимент. Исследовались структуры с квантовыми ямами HgTe/Cd_{0.7}Hg_{0.3}Te шириной 21 нм, выращенные методом молекулярно-= dпучковой эпитаксии на подложках с ориентацией (001) и (013). Специально образцы не легировались. Однако магнетотранспортные измерения показали, что имеет место *n*-тип проводимости с концентрацией носителей около $2 \cdot 10^{11} \, \mathrm{cm}^{-2}$ и подвижностью порядка $10^5 \,\mathrm{cm}^2 \cdot \mathrm{B}^{-1} \cdot \mathrm{c}^{-1}$. Спектры поглощения снимались с помощью фурье-спектрометра в диапазоне от 20 до $1000 \,\mathrm{cm}^{-1}$. Магнитное поле прикладывалось традиционной для измерений циклотронного в резонанса геометрии Фарадея.

Спектры поглощения, полученные для структуры с ориентацией (013) при нескольких значениях магнитного поля в диапазоне от 11 до 17.5 Т, представлены на рис. 1а. Обработка спектров позволила выделить ряд спектральных линий, зависимости которых от магнитного поля показаны на рис. 1b. Наблюдаемые линии можно разбить на две группы: высокоэнергетические и низкоэнергетические. При этом вторые проявляются только в сильных магнитных полях (B > 10 T). Весьма заметное расщепление линий, по-видимому, связано с сильной непараболичностью спектра носителей, приводящей в условиях сильного магнитного поля к неэквивалентности энергий переходов для двух направлений спина. Соотношение величин эффективных масс, извлеченных из наклона кривых (~ $0.03m_0$ и ~ $0.1m_0$ соответственно), позволяет утверждать, что первая группа линий связана с переходами между уровнями Ландау электронов, а вторая - с переходами между уровнями Ландау дырок. Одновременное наблюдение двух типов носителей означает, что система находится в полуметаллическом состоянии в согласии с данными магнетотранспортных измерений. В то же время для образцов с ориентацией (001) дырочные линии в спектрах циклотронного резонанса отсутствуют, а поведение электронных энергий с изменением магнитного поля качественно совпадает с данными, представленными на рис. 1b. Таким образом, измерения циклотронного резонанса однозначно подтверждают наличие полуметаллического состояния в широких квантовых ямах HgTe с ориентацией (013) и



Рис. 1. (a) – Спектры поглощения для квантовой ямы HgTe (013), полученные в интервале магнитных полей от 11 до 17.5 Т. (b) – Зависимости энергии поглощения от магнитного поля для спектральных линий на рис. а

его отсутствие для ориентации (001). Для понимания причин возникновения полуметаллического состояния и зависимости от ориентации плоскости ям необходимо проанализировать спектр носителей заряда в рассматриваемых структурах.

2. Теория. Для описания энергетического спектра носителей заряда в бесщелевых полупроводниках типа HgTe и квантовых ямах на их основе успешно используется восьмизонная модель Пиджина– Брауна [9, 12–15]. В рамках этой модели последовательно учитывается kp-взаимодействие зон Γ_6 , Γ_7 и Γ_8 (кейновская составляющая), а вклад остальных зон трактуется в рамках второго порядка теории возмущений (латтинжеровская составляющая). Это позволяет одновременно рассчитать массы как легких, так и тяжелых дырок, учесть эффекты непараболичности и гофрировки. В то же время главные особенности электронных состояний в квантовых ямах на основе HgTe можно проанализировать и без применения этой достаточно изощренной модели. Одной из наиболее интригующих особенностей бесщелевых полупроводников является наличие интерфейсных состояний, описываемых плавными огибающими. Впервые они были получены Дьяконовым и Хаецким в рамках модели Латтинжера [10] и Сурисом [16] в рамках модели Кейна. Для того чтобы пояснить природу интерфейсных состояний и получить простую оценку для их энергии, воспользуемся двухзонной моделью, к которой приводит шестизонная модель Кейна ($\Delta_{so} \gg |E_g|$) при нулевом поперечном волновом векторе $\mathbf{k}_{\perp} = 0$:

$$\hat{H} = \begin{bmatrix} E_c & \sqrt{2/3}P\hat{k}_z \\ \sqrt{2/3}P\hat{k}_z & E_v \end{bmatrix}, \quad (1)$$

где P – кейновский матричный элемент. Волновые функции слева и справа от интерфейса, расположенного в точке z = 0, имеют вид

$$\Psi = \begin{bmatrix} 1\\ \frac{\sqrt{2/3P\hat{k}_z}}{E-E_v} \end{bmatrix} e^{-\varkappa |z|}.$$
 (2)

Постоянные затухания $\varkappa_{1,2}$ в каждом из материалов определяются дисперсионным уравнением

$$\varkappa^{2} = -\frac{3(E - E_{c})(E - E_{v})}{2P^{2}}.$$
(3)

Граничные условия приводят к уравнению

$$\varkappa_1(E - E_{v2}) = -\varkappa_2(E - E_{v1}).$$
(4)

Отсюда немедленно следует, что обращение зонной структуры в одном из полупроводников является необходимым и достаточным условием возникновения интерфейсного состояния, а его энергия дается формулой

$$E_I = \frac{E_{c2}E_{v1} - E_{c1}E_{v2}}{E_{c1} + E_{v2} - E_{v1} - E_{c2}}.$$
(5)

В частности, если принять линейную аппроксимацию для зависимости положений краев зон от состава твердого раствора CdHgTe, то для всех гетеропереходов (а значит и достаточно широких квантовых ям) Cd_xHg_{1-x}Te/Cd_yHg_{1-y}Te получается универсальное значение $E_I \approx -90$ мэВ, определяемое положением краев зон в HgTe ($E_c = -0.303$ эВ, $E_v = 0$) и CdTe ($E_c = 1.036$ эВ, $E_v = -0.570$ эВ). Для достаточно узких квантовых ям левое и правое интерфейсные состояния будут перекрываться. Это может приводить к существенному энергетическому расщеплению и даже выходу уровней в область выше $E_v^{(HgTe)}$. Хотя для квантовых ям шириной d = 21 нм таким перекрытием можно пренебречь, интерфейсные состояния проявляются благодаря их взаимодействию с

уровнями размерного квантования тяжелых дырок и даже могут быть причиной образования двумерного полуметалла. Подмешивание интерфейсных состояний, аналогичное смешиванию легких и тяжелых дырок в нормальных полупроводниках, осуществляется главным образом за счет линейных по \mathbf{k}_{\perp} "кейновских" слагаемых $T_{\pm}^{(2)}$ в гамильтониане Пиджина–Брауна [9]:

$$\tilde{E}_{c} = E_{c} + \alpha (2F + 1)k^{2},
\tilde{E}_{v} = E_{v} - \alpha [(\gamma_{1} - 2\gamma_{2})k_{z}^{2} + (\gamma_{1} + \gamma_{2})k_{\perp}^{2}],
\overline{E}_{v} = E_{v} - \alpha [(\gamma_{1} + 2\gamma_{2})k_{z}^{2} + (\gamma_{1} - \gamma_{2})k_{\perp}^{2}],
\tilde{E}_{so} = E_{v} - \Delta_{so} - \alpha \gamma_{1}k^{2},
\hat{T}_{z} = \sqrt{2/3}P\hat{k}_{z}, \quad T_{\pm} = P(k_{x} \pm k_{y}),
l = 6\alpha \gamma_{3}(k_{x} - ik_{y})\hat{k}_{z}, \quad q = \sqrt{2}\alpha \gamma_{2}(k_{z}^{2} - k_{\perp}^{2}),
m = \sqrt{6}\alpha (2i\gamma_{3}k_{x}k_{y} - \gamma_{2}k_{\perp}^{2}), \quad \alpha = \hbar^{2}/(2m_{0}). \quad (7)$$

Результаты расчетов дисперсионных зависимостей в квантовых ямах $HgTe/Cd_{0.7}Hg_{0.3}Te$ шириной d == 21 нм показаны на рис. 2 для ориентации (001) и на рис. 3 для ориентации (013). При расчетах использовалось четыре набора зонных параметров HgTe, взятых из обзора [13] и представленных в таблице. Видно, что вторая подзона размерного квантования тяжелых дырок hh2 имеет тенденцию к немонотонной зависимости энергии от волнового вектора, направленного вдоль плоскости ямы. Такое поведение ветви hh2 (и других подзон размерного квантования тяжелых дырок) объясняется тем, что уже при малых волновых векторах k_{\perp} включается сильное взаимодействие с одним из интерфейсных состояний (*I*1), расположенных по энергии около E = -90 мэВ. В результате такого взаимодействия у каждой из ветвей тяжелых дырок появляется участок положительной

²⁾Оценка показывает, что соответствующие латтинжеровские слагаемые по крайней мере на 2 порядка меньше кейновских.



Рис. 2. Зависимость энергии носителей от волнового вектора в плоскости для квантовой ямы HgTe (001). Показаны результаты расчетов с двумя наборами параметров из таблицы: HgTe-I (a) и HgTe-III (b)



Рис. 3. Зависимость энергии носителей от волнового вектора в плоскости для квантовой ямы HgTe (013). Показаны результаты расчетов с двумя наборами параметров из таблицы: HgTe-II (a) и HgTe-IV (b)

дисперсии, а основная ветка hh1 становится электронной, являясь, по сути, продолжением I1 при больших k_{\perp} . В случае, когда максимум hh2 лежит выше минимума hh1 (т.е. ее энергии при $k_{\perp} = 0$), имеет место перекрытие подзон размерного квантования и реализуется полуметаллическое состояние. Как видно из рис. 2 и 3 и данных последнего столб-

Письма в ЖЭТФ том 97 вып. 1-2 2013

ца таблицы, максимальный прирост энергии δE на ветви hh2 и, соответственно, возможность ее перекрытия с hh1 существенно зависят от зонных параметров. Например, учет гофрировки ($\gamma_2 \neq \gamma_3$) увеличивает δE в 4–5 раз. Тем не менее при всех наборах параметров, взятых из обзора [13], ветвь hh2 не дотягивает до hh1 более чем в 2 раза. Это согласуется с экспериментальными данными для квантовых ям с ориентацией (001), но никак не объясняет существования полуметалла в квантовых ямах (013). Более того, δE для ориентации (013) оказывается несколько меньше, чем для (001). Последнее находится в противоречии с экспериментальной тенденцией и сигнализирует о наличии дополнительных, не учтенных факторов, которые мы обсудим ниже.

Наборы зонных параметров, использованные для расчетов

	$E_P = P^2 / \alpha \text{ (sB)}$	γ_1^L	γ_2^L	γ_3^L	$\Delta(001/013)^*$
HgTe-I	18.18	12.8	8.4	8.4	0.06/0.04
HgTe-II	18.18	14.8	8.6	8.6	0.06/0.05
HgTe-III	18.18	16.8	10.4	9.2	0.30/0.21
HgTe-IV	18.18	14.8	10.9	8.7	0.31/0.26
CdTe	18.18	5.3	1.6	1.9	

*Максимальный прирост ветви hh2 относительно ее энергии при $k_{\perp} = 0, \ \Delta = \delta E/E_0$, для квантовых ям с ориентациями (001) и (013).

3. Обсуждение и выводы. Заметим, что, в отличие от ряда работ (см., например, [15, 2]), при расчете спектров носителей мы не учитывали самосогласованного электростатического потенциала и механических напряжений, возникающих в слоях, образующих квантовую яму, считая их учет превышением точности. Мы предлагаем свое объяснение различия в электронных свойствах квантовых ям HgTe разной ориентации, основанное на различии в строении интерфейсов между слоями HgTe и CdHgTe. На рис. 4 схематически представлены кристаллические решетки, выращенные на подложках (001) и (013). Плоскость (013) получается отклонением плоскости (001) в сторону кристаллографического направления [110] примерно на 19°. Она представляет собой ступенчатую поверхность, состоящую из трех атомов в плоскости атомных террас (001) и понижения на один атом между ними. Четко видно различие в поверхности интерфейсов для структур с ориентациями (001) и (013): если для случая (001) гетерограницу можно считать атомарно-гладкой, то для (013) она не является однородной. Это означает, что в структурах, выращенных в низкосимметричных направлениях, возможна трансформация тя-



Рис. 4. Схематическое изображение кристаллических решеток, выращенных на подложках (001) и (013), демонстрирующее различие в строении гетерограниц для этих двух ориентаций и возможность конверсии тяжелой дырки в легкую

желой дырки в легкую даже при волновом векторе, направленном строго вдоль оси роста, аналогично тому, как это происходит при отражении от наклонного потенциального барьера [11]. К сожалению, количественный учет влияния неоднородностей гетерограниц (на атомарном уровне) выходит за рамки метода эффективной массы. Поэтому произвести количественную оценку влияния подобных неоднородностей на спектр носителей достаточно сложно. В пользу предложенной гипотезы говорит хорошо известный факт: неэквивалентность гетероинтерфейсов может существенно сказываться на физических свойствах, в частности приводить к гигантской оптической анизотропии [17, 18]. Таким образом, можно полагать, что проявление полуметаллического состояния в квантовых ямах пониженной симметрии обусловлено подмешиванием интерфейсных состояний к тяжелым дыркам при отражении от гетероинтерфейсов, не являющихся в этом случае атомарногладкими.

Работа выполнена при поддержке Фонда "Династия", РФФИ (#10-02-00815, 12-02-31276), Программы поддержки ведущих научных школ (НШ-2901.2012.2) и программ РАН. Часть работы выполнена в Национальной лаборатории сильных магнитных полей (США), финансируемой NSF/DMR-0654118, штатом Флорида и Департаментом энергии.

Когда эта статья была написана, нам стало известно об аналогичных экспериментах по наблюдению циклотронного резонанса электронов и дырок в ямах НgTe (013) [19]. Кроме того, согласно последним исследованиям [20] двумерный полуметалл может наблюдаться и в квантовых ямах ориентации (001), но лишь в крайне узком интервале затворных напряжений. Поскольку измерения циклотронного резонанса не допускают подстройки концентрации таким способом, в наших экспериментах на квантовых ямах HgTe (001) полуметаллическое состояние не проявлялось. Хотя ориентация (001) соответствует гладкой, нетеррасированной поверхности раздела HgTe/CdHgTe, физической причиной реализации полуметалла в этом случае могут служить шероховатости интерфейса, возникающие при росте методом молекулярно-пучковой эпитаксии.

Выражаем благодарность рецензенту за указание на работу [20].

- З. Д. Квон, Е. Б. Ольшанецкий, Д. А. Козлов, Письма в ЖЭТФ 87, 588 (2008).
- Z. D. Kvon, E. B. Olshanetsky, E. G. Novik et al., Phys. Rev. B 83, 193304 (2011).
- Е.Б. Ольшанецкий, З.Д. Квон, М.В. Энтин и др., Письма в ЖЭТФ 89, 338 (2009).
- Д. А. Козлов, З. Д. Квон, Н. Н. Михайлов и др., Письма в ЖЭТФ 93, 186 (2011).
- Z.-D. Kvon, S.N. Danilov, N.N. Mikhailov et al., Physica E 40, 1885 (2008).
- Ю.Б. Васильев, Н.Н. Михайлов, F.Gouider и др., ФТП 46, 673 (2012).
- A.V. Ikonnikov, M. S. Zholudev, K. E. Spirin et al., Semicond. Sci. Technol. 26, 125011 (2011).
- А. В. Иконников, М. С. Жолудев, К. В. Маремьянин и др., Письма в ЖЭТФ 95, 452 (2012).
- C.R. Pidgeon and R.N. Brown, Phys. Rev. 146, 575 (1966).
- М. И. Дьяконов, А. В. Хаецкий, Письма в ЖЭТФ 33, 115 (1981); ЖЭТФ 82, 1584 (1982).
- A. Polkovnikov and R. A. Suris, Phys. Rev. B 62, 16566 (2000).

- 12. И.М. Цидильковский, Зонная структура полупроводников, М.: Наука, 1978.
- Б. Л. Гельмонт, В. И. Иванов-Омский, И. М. Цидильковский, УФН 120, 337 (1976).
- И. И. Ляпилин, И. М. Цидильковский, УФН 146, 35 (1985).
- E.G. Novik, A. Pfeuffer-Ieschke, T. Jingwirth et al, Phys. Rev. B 72, 035321 (2005).
- 16. Р.А. Сурис, ФТП **20**, 2008 (1986).
- O. Krebs, D. Rondi, J.L. Gentner et al., Phys. Rev. Lett. 80, 5770 (1998).
- 18. A.V. Platonov et al, Phys. Rev. Lett. 83, 3546 (1999).
- M.S. Zholudev, A.V. Ikonnikov, F.Teppe et al., Nanoscale Research Letters 7, 534 (2012).
- E. B. Olshanetsky, Z. D. Kvon, N. N. Mikhailov et al., Solid State Comm. 152, 265 (2012).