Поверхностные состояния в HgTe квантовой яме и рассеяние на шероховатостях

А. А. Добрецова^{+*1)}, Л. С. Брагинский^{+*}, М. В. Энтин^{+*}, З. Д. Квон^{+*}, Н. Н. Михайлов⁺, С. А. Дворецкий⁺

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

*Новосибирский государственный университет, 630090 Новосибирск, Россия

Поступила в редакцию 20 января 2015 г.

Проведено детальное исследование рассеяния двумерных электронов в широких (d = (18-22) нм) квантовых ямах на основе HgTe. Обнаружены выход на максимум и последующее падение подвижности при концентрациях двумерных электронов, превышающих (2-6) $\cdot 10^{11}$ см⁻², вызванные рассеянием на шероховатостях квантовой ямы. Построена теория рассеяния на этих шероховатостях, принимающая в расчет трансформацию волновой функции с ростом электронной концентрации. Получено хорошее согласие эксперимента и указанной теории. На основе этого сделан вывод о существовании поверхностных состояний на границах широкой HgTe квантовой ямы.

DOI: 10.7868/S0370274X15050094

В настоящее время квантовые ямы на основе НgTe относятся к одним из наиболее интенсивно изучаемых объектов физики двумерных электронных систем (ДЭС). В первую очередь это связано с уникальным обусловленным бесщелевой природой HgTe энергетическим спектром ДЭС в HgTe KЯ, который в значительной степени определяется релятивистскими эффектами и, соответственно, спин-орбитальным взаимодействием. Не менее важен и тот факт, что благодаря последним успехам молекулярно-лучевой эпитаксии соединений A₂B₆ удается выращивать HgTe KЯ очень высокого качества. В результате в последние годы в указанных ямах реализовано несколько новых разновидностей низкоразмерных электронных систем: двумерные топологические изоляторы, двумерный полуметалл и двумерные бесщелевые дираковские фермионы [1-6].

Известно [7], что рассеяние электронов на шероховатостях поверхности является основным механизмом рассеяния в поверхностных инверсионных слоях при большой концентрации носителей. Связано это с тем, что с увеличением прижимающего электроны поля толщина слоя уменьшается, а поперечный квантованный импульс электрона увеличивается. Как будет видно из дальнейшего, экспериментальная зависимость подвижности в слое HgTe также соответствует этому поведению. Однако в случае HgTe KЯ в зависимости от величины волнового вектора электрона k в квантовой яме локализация волновой функции внутри нее оказывается разной. При $k < \pi/d$ (где d – толщина ямы), то максимум квадрата волновой функции электрона будет расположен в центре. Однако при $k > \pi/d$ он начнет раздваиваться. По мере роста k образовавшиеся максимумы сдвигаются к границам ямы (каждый начинает сдвигаться к одной из границ ямы; направление сдвига зависит от направления движения электрона вдоль границы), в конечном счете образуя на границах ямы поверхностные состояния. Подобное поведение волновой функции электрона было предсказано в работе [8] и подтверждено более точными расчетами в работе [9]. Экспериментальное указание на существование таких состояний представляет несомненный интерес.

В данной работе проведено экспериментальное и теоретическое исследование рассеяния электронов на шероховатостях на границах широких HgTe квантовых ям, толщина которых в несколько раз превышает критическую ($d_c = 6.3$ нм), соответствующую переходу от прямого к инверсному спектру. Показано, что при концентрациях двумерных электронов $N_s > 3 \cdot 10^{11}$ см⁻² в них начинает доминировать рассеяние на шероховатостях ямы. Построена теория рассеяния 2D-электронов на этих шероховатостях, учитывающая предсказанную в работах [8,9] трансформацию волновой функции при увеличении концентрации электронов. Из сравнительного анализа теории и эксперимента сделан вывод о возникновении на границах широких HgTe квантовых ям

¹⁾e-mail: DobretsovaAA@gmail.com

с инвертированным спектром поверхностных состояний.

Начнем изложение работы с описания эксперимента и его результатов. Исследованные образцы представляли собой полевые холловские структуры шириной 50 мкм с расстоянием между потенциометрическими контактами 100 и 250 мкм (вставка к рис. 1), изготовленные на основе нелегирован-



Рис. 1. Типичные зависимости диссипативной, ρ_{xx} (при B = 0 Тл), и холловской ρ_{xy} (при B = 0.56 Тл), компонент тензора сопротивления от затворного напряжения. Вставка – изображение образца, вид сверху; зависимости $\rho_{xx}(V_g)$ при больших V_g в увеличенном масштабе

ных НgTe квантовых ям толщиной 18-22 нм, с ориентациями (013) и (100). Технология их изготовления подробно описана в [10]. Измерения проводились при температуре 4.2 К в магнитных полях до 1Т с использованием стандартной схемы фазочувствительного детектирования на частоте 12 Гц при величине измерительного тока через образец 100 нА, исключающей эффекты разогрева. Зависимости диссипативной (ρ_{xx}) и холловской (ρ_{xy}) компонент тензора сопротивления исследованных образцов от затворного напряжения V_q показаны на рис. 1. Приведенные кривые типичны для квантовых ям толщиной 18-22 нм, в которых при изменении затворного напряжения реализуется переход двумерный металл-двумерный полуметалл [3, 10, 11]. Зависимость $\rho_{xx}(V_q)$ представляет собой кривую с максимумом, расположенным в окрестности точки зарядовой нейтральности (ТЗН), а $\rho_{xy}(V_q)$ – зависимость, меняющую свой знак слева от ТЗН. В данной работе нас будут интересовать только затворные напряжения, при которых в указанных ямах реализуется двумерный металл с параболическим спектром, что соответствует электронным концентрациям $N_s > 5 \cdot 10^{10} \,\mathrm{cm}^{-2}$ для образцов с ориентацией (013) [3, 10] и $N_s > 1 \cdot 10^{10} \,\mathrm{cm}^{-2}$ для ориентации (100) [11]. На рис. 2 приведены экспери-



Рис. 2. Экспериментальные и расчетные зависимости $\mu(N_s)$ подвижности электронов от концентрации при T = 4.2 К. Тонкие черные линии соответствуют расчетным кривым. Ориентация образца 100623_1 – (100), остальных – (013)

ментальные зависимости $\mu(N_s)$ подвижности электронов от их концентрации для нескольких образцов (их основные характеристики представлены в табл. 1). Хорошо видно, что качественное поведение

Таблица 1

Основные характеристики исследованных образцов

| Образец | Ориентация | d, нм |
|----------|------------|-------|
| 101615 | (013) | 20 |
| 081112 | (013) | 22 |
| 101614 | (013) | 20 |
| 100623 1 | (100) | 18 |

Таблица 2

Параметры подгонки*)

| (| Эбразец | $N_{ m imp} m cm^{-2}$ | $d_{sp},$ нм | $L, {\rm hm}$ | h, Å |
|----|-----------|------------------------|--------------|---------------|------|
| | 101615 | $1.0 \cdot 10^{10}$ | 1.4 | 7.9 | 1.6 |
| | 081112 | 110^{10} | 0.8 | 8.6 | 0.8 |
| | 101614 | $1.8 \cdot 10^{10}$ | 2.7 | 17.3 | 0.9 |
| 10 | 00623_1 | $1.2 \cdot 10^{10}$ | 5.2 | 17.3 | 1.4 |

 $^{*)}N_{\rm imp}$ – концентрация примесей, d_{sp} – среднее расстояние примесей до максимума волновой функции электрона, L и h – характерные длина и высота шероховатостей.

всех зависимостей $\mu(N_s)$ является одинаковым: при малых N_s подвижность растет, достигает максиму-

ма, равного $(4-7) \cdot 10^5 \, \text{см}^2 / \text{Bc}$, а затем даже начинает падать. Более детальное сравнение показывает, что область роста, положения максимума и начала уменьшения подвижности могут в зависимости от образца иметь разный характер. В частности, для образцов 100623 1 и 110615 максимум подвижности расположен при $N_s \approx 2 \cdot 10^{11} \,\mathrm{cm}^{-2}$, а для 110614 и 081112 – при $N_s \approx 6 \cdot 10^{11} \,\mathrm{cm}^{-2}$. Описанное поведение подвижности двумерных электронов при температуре жидкого гелия наблюдается во многих ДЭС, начиная с инверсионных каналов кремниевых МОП-транзисторов [7] и кончая ДЭГ в гетеропереходе AlGaAs/GaAs [12]. Во всех случаях оно указывает на два механизма рассеяния: примесное, доминирующее при малых N_s , и рассеяние на шероховатостях, которое является основным при больших N_s. Однако если для описания примесного рассеяния можно применить уже известные выражения (см., например, [13]), то задача о рассеянии на шероховатостях не может рассматриваться в рамках стандартного подхода [7, 12], когда локализация волновой функции меняется вследствие существенного изменения формы квантовой ямы. Во-первых, из-за большой глубины ямы (около 0.5 эВ) ее форма практически не меняется при тех значениях затворного напряжения, которые использовались в данном эксперименте. Во-вторых (и в главных), как было отмечено выше, в широких квантовых ямах существует значительно более сильный эффект, связанный с возникновением поверхностных состояний на границах широкой НgTe квантовой ямы с инверсным спектром. Поэтому рассеяние на шероховатостях в такой яме требует отдельного рассмотрения, в котором необходимо учесть перестройку волновой функции в ней. Ниже идет изложение развитой для этого случая теории. Предполагается, что состояния электронов и дырок ψ в квантующем слое HgTe можно определить с использованием гамильтониана Латтинжера [8] с нулевыми условиями $\psi = 0$ на границах $z = \pm d/2$ слоя HgTe с использованием базиса $\varphi_{\alpha}^{(j)}(\mathbf{k},q) \exp(i\mathbf{kr}+iqz)$ – решения в безграничном HgTe. Здесь $\varphi_{1,2}^{(1,2)}$ – матрицы-столбцы из четырех элементов, определенные в [8], ${\bf k}$ и q – компоненты волнового вектора в плоскости квантовой ямы и направлении роста z, соответственно, $\mathbf{r} = (x, y)$ – координаты в плоскости квантовой ямы. В квантовой яме с плоскими границами решение можно искать в виде линейной комбинации

$$\psi = \exp(i\mathbf{k}\mathbf{r}) \sum_{j,\alpha} [A_{\alpha j} \varphi_{\alpha}^{(j)}(\mathbf{k}, q_j) \exp(iq_j z) + B_{\alpha j} \varphi_{\alpha}^{(j)}(\mathbf{k}, -q_j) \exp(-iq_j z)].$$

Здесь коэффициенты $A_{\alpha j}$, $B_{\alpha j}$ удовлетворяют условиям $\psi = 0$ на гетерограницах $z = \pm d/2$.

Граничные условия представляют собой однородную систему уравнений 8 × 8 для 8 коэффициентов $A_{\alpha i}, B_{\alpha j}$. Вследствие крамерсовского вырождения эта система может быть разбита на две системы 4×4 для коэффициентов A_{11} , A_{22} , B_{11} , B_{22} и A_{12} , A_{21} , В12, В21. Обращение в нуль одного из определителей вышеупомянутых систем 4 × 4 задает энергетический спектр электрона как функцию его волнового вектора k, а также z-компоненты волновых векторов *q*₁ и *q*₂. Последние величины в общем случае являются комплексными. В случае квантовой ямы бесконечной ширины это означало бы наличие поверхностных состояний. Для квантовой ямы конечной толщины состояния оказываются достаточно сильно прижатыми к одной из границ, определяемой знаком импульса электрона. Замена $\mathbf{k} \to -\mathbf{k}$ приводит к локализации состояния вблизи противоположной границы.

Эволюция поверхностных состояний как функции $k = k_{\rm F} = \sqrt{2\pi N_s}$ представлена на рис. 3. Видно,



Рис. 3. Эволюция волновой функции электрона в яме как функции $k = k_F = \sqrt{2\pi N_s}$. При изменении знака k_y на противоположный максимум волновой функции будет смещаться в сторону левой границы

что увеличение концентрации электронов приводит к усилению локализации волновой функции вблизи одной из границ квантовой ямы. Это позволяет ожидать усиления рассеяния электронов на границах $z = \pm d/2 + \xi(\mathbf{r})$ в присутствии неровностей $\xi(\mathbf{r})$.

Предположим, что на границе раздела HgTe/CdTe имеет место большой скачок потенциала U_0 , в то время как эффективные массы в CdTe остаются теми же. Разложим потенциальную энергию вблизи границы $z = d/2 + \xi(\mathbf{r})$ по $\xi(\mathbf{r})$: $U_0\theta[z - d/2 - \xi(\mathbf{r})] \approx U_0\theta(z - d/2) + U_0\xi(\mathbf{r})\delta(z - d/2)$ [14–16]. Будем рассматривать второе слагаемое в этом выражении как возмущение, вызывающее поверхностное рассеяние электронов. Учтем большое значение U_0 и поведение волновой функции в

Письма в ЖЭТФ том 101 вып. 5-6 2015

CdTe, $\psi \propto \exp[-\kappa_{e,h}(z-d/2)]$, $\kappa_{e,h} = \sqrt{2m_{e,h}U_0}/\hbar$ (индексы относятся к электронной и дырочной компонентам волновой функции соответственно). Тогда можно выразить значение волновой функции вблизи границы через ее нормальную производную: $\psi_{e,h} = -\kappa_{e,h}^{-1}\partial_z\psi_{e,h}|_{z=d/2}$. При такой подстановке в пределе большого U_0 эта величина выпадает из окончательного ответа. Аналогичные рассуждения можно провести и для границы $z = -d/2 + \xi(\mathbf{r})$. В борновском приближении по рассеивающему потенциалу находим обратное время релаксации на поверхностных шероховатостях:

$$\frac{1}{\tau} = \frac{\hbar^3}{8\pi} \int \widetilde{W}(\mathbf{p} - \mathbf{p}') \left| \frac{\partial \psi^*}{\partial z} \widehat{m}^{-1} \frac{\partial \psi}{\partial z} \right|^2 \times (1 - \cos\theta) \delta(\epsilon_p - \epsilon_{p'}) d^2 p', \qquad (1)$$

где $\widetilde{W}(\mathbf{k})$ – фурье-образ корреляционной функции неровной поверхности $W(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \langle \xi(\mathbf{r})\xi(\mathbf{r}')\exp[i(\mathbf{p} - -\mathbf{p}')(\mathbf{r} - \mathbf{r}')]\rangle, \ \widehat{m}^{-1}$ – диагональный тензор, нулевые элементы которого совпадают с \widehat{m}_e^{-1} и \widehat{m}_h^{-1} соответственно. Результат интегрирования (1) зависит от конкретного вида корреляционной функции.

Перейдем теперь к сравнению эксперимента и теории. Но прежде сделаем несколько предварительных замечаний. При расчете подвижности, обусловленной примесным рассеянием, предполагалось, что в исследованных структурах оно вызвано остаточными примесями, неоднородно распределенными вблизи границы HgTe/HgCdTe. Соответственно для его описания вводились два подгоночных параметра: концентрация примесей N_{imp} и их среднее расстояние до максимума волновой функции d_{sp} . Тем самым неоднородное распределение заряженных примесей моделировалось заряженной плоскостью со средней плотностью заряда е N_{imp}. Подвижность, связанная с рассеянием на шероховатостях, определялась по формуле (1). При этом предполагалось, что $W(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = h^2 \exp[-|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|]/L$, т.е. имеет вид ступенчатой поверхности с характерной высотой h и длиной ступеньки L [17]. Таким образом, в расчете полной подвижности существовало еще два подгоночных параметра: характерная высота h и длина *L* неровности.

Результаты описанной подгонки представлены на рис. 2. На нем показаны экспериментальные и расчетные зависимости подвижности от электронной концентрации. Ясно видно, что расчетные кривые хорошо описывают экспериментальные. Соответствующие параметры подгонки приведены в табл. 2. Обсудим их величины и поведение. Начнем с анализа примесного рассеяния. Как видно из таблицы, концентрация рассеивающих примесей меняется в изученных HgTe KЯ в пределах $(1-2) \cdot 10^{10} \, \text{см}^{-2}$, а их среднее расстояние до плоскости ДЭГ – в пределах 0.8-5.2 нм. Отсюда можно сделать вывод о том, что примесное рассеяние в изучаемых структурах определяется неоднородным распределением заряженных остаточных примесей вблизи границы гетероперехода HgTe/HgCdTe, причем для образцов 100623 1 и 110614 максимум примесного распределения расположен уже в HgCdTe-барьере. Если говорить о размерах шероховатостей, то они характеризуются небольшой высотой (порядка межплоскостного расстояния) и на два порядка большей характерной длиной. Отметим, что параметры шероховатостей, полученные для квантовых ям на основе гетероперехода AlGaAs/GaAs [12], отличаются в два-три раза большей характерной высотой и в два раза меньшей характерной длиной, т.е. в целом имеют один и тот же порядок величины.

Работа выполнена при поддержке РФФИ (грант # ОФИ М13-02-12148), РАН и МОН.

- M. König, S. Wiedmann, C. Brüne, A. Roth, H. Buhmann, L.W. Molenkamp, X.L. Qi, and S.C. Zhang, Science **318**, 766 (2007).
- З. Д. Квон, Е.Б. Ольшанецкий, Д.А. Козлов, Н. Н. Михайлов, С. А. Дворецкий, Письма в ЖЭТФ 87, 588 (2008).
- Е.Б. Ольшанецкий, З.Д. Квон, М.В. Энтин, Л.И. Магарилл, Н.Н. Михайлов, С.А. Дворецкий, Письма в ЖЭТФ 89, 338 (2009).
- B. Buttner, C.X. Liu, G. Tkachov, E.G. Novik, C. Brüne, H. Buhmann, E.M. Hankiewicz, P. Recher, B. Trauzettel, S.C. Zhang, and L.W. Molenkamp, Nature Phys. 7, 418 (2011).
- З. Д. Квон, С. Н. Данилов, Д. А. Козлов, К. Цот, Н. Н. Михайлов, С. А. Дворецкий, С. Д. Ганичев, Письма в ЖЭТФ 94, 895 (2011).
- Д. А. Козлов, З. Д. Квон, Н. Н. Михайлов, С. А. Дворецкий, Письма в ЖЭТФ 93, 186 (2011).
- T. Ando, A. Fowler, and F. Stern, Rev. Mod. Phys. 54, 437 (1982).
- М. И. Дьяконов, А.В. Хаецкий, ЖЭТФ 82, 1584 (1982).
- L.G. Gerchikov and A.V. Subashiev, Phys. Stat. Sol 160, 443 (1990).
- З. Д. Квон, Е. Б. Ольшанецкий, Д. А. Козлов, Н. Н. Михайлов, С. А. Дворецкий, ФНТ **37**, 258 (2011).
- E. B. Olshanetsky, Z. D. Kvon, N. N. Mikhailov, E. G. Novik, I. O. Parm, and S. A. Dvoretsky, Sol. State Com. 152, 265 (2012).

Письма в ЖЭТФ том 101 вып. 5-6 2015

- H. Sakaki, T. Noda, K. Hirakawa, M. Tanaka, and T. Matsusue, Appl. Phys. Lett. 51, 1934 (1987).
- 13. J. H. Davies, *The Physics of Low-dimensional* Semiconductors, Cambridge University Press (1998).
- R.E. Prange and T.W. Nee, Phys. Rev. 168, 779 (1968).
- A. V. Chaplik and M. V. Entin, Sov. Phys. JETP 28, 514 (1968) [ZhETF 55, 990 (1968)].
- L. I. Magarill and M. V. Entin, Письма в ЖЭТФ 100, 639 (2014).
- 17. Дж. Займан, Модели беспорядка, Мир, М. (1982).