

Модель „петли экстремумов“ для спектра валентной зоны квантовой ямы HgTe/HgCdTe с инвертированной зонной структурой в полуметаллической фазе

© С.В. Гудина¹, А.С. Боголюбский¹, В.Н. Неверов^{1,¶}, Н.Г. Шелушина¹, М.В. Якунин^{1,2}

¹ Институт физики металлов им. М.Н. Михеева Уральского отделения Российской академии наук, 620990 Екатеринбург, Россия

² Институт естественных наук и математики, Уральский федеральный университет, 620002 Екатеринбург, Россия

¶ E-mail: neverov@imp.uran.ru

(Получена 25 апреля 2018 г. Принята к печати 7 мая 2018 г.)

Для валентной зоны квантовой ямы HgTe/HgCdTe с инвертированной зонной структурой рассчитаны эффективная масса и спектр уровней Ландау в квазиклассической модели „петли экстремумов“. В полуметаллической фазе веер уровней Ландау валентной зоны начинается при $B = 0$ с энергии, соответствующей энергии боковых максимумов этой зоны, и перекрывается с веером уровней Ландау зоны проводимости.

DOI: 10.21883/FTP.2018.11.46585.07

1. Введение

Примечательным свойством гетероструктур HgCdTe/HgTe/HgCdTe является то, что путем изменения ширины квантовой ямы (QW) HgTe могут быть достигнуты переходы между фазами обычного (зонного) изолятора, топологического изолятора и полуметалла. По мере увеличения толщины слоя HgTe материал становится все более и более похожим на объемный HgTe, и для широких QW ($d_{QW} > d_C \cong 6.3$ нм) зонная структура становится „инвертированной“.

В инвертированном режиме первая размерно-квантованная подзона тяжелых дырок H1 имеет электронный характер [1] и является зоной проводимости. При ширине квантовой ямы $d_{QW} > 8$ нм верхней валентной зоной становится вторая размерно-квантованная подзона тяжелых дырок H2 с немонотонным законом дисперсии.

В широких QW HgTe/Cd(Hg)Te с инвертированной зонной структурой ($d_{QW} \geq 18$ нм) возникает новая двумерная электронная система: фаза двумерного полуметалла (2D SM) [2,3]. Существование 2D SM в этой системе связано с перекрытием на несколько мэВ минимума зоны проводимости в центре зоны Бриллюэна с боковыми максимумами валентной зоны. Расчет структуры энергетических зон [3] показывает, что основной причиной перекрытия в широких QW является деформация, обусловленная несоответствием постоянных решетки HgTe и CdTe.

В области SM, когда уровень Ферми пересекает как валентную зону, так и зону проводимости, в HgTe QW наблюдается ряд интересных транспортных свойств, обусловленных сосуществованием 2D электронов и дырок [4–8].

Численные расчеты эффективной массы дырок валентной зоны (подзоны H2) для сильной анизотропии спектра (учет гофрировки, асимметрии границ квантовой ямы и различия их размытия) в квазиклассическом приближении выполнены в работе [9].

В данной работе мы представляем результаты квазиклассических расчетов эффективной массы, а также спектра уровней Ландау валентной зоны QW HgTe с инвертированной зонной структурой как в изотропном приближении (модель „петли экстремумов“), так и с учетом эффектов гофрировки.

2. Зонная структура квантовой ямы HgTe

На рис. 1 представлена структура энергетических зон напряженной квантовой ямы HgTe с $d_{QW} = 20$ нм в наноструктуре Hg_{0.35}Cd_{0.65}Te/HgTe/Hg_{0.35}Cd_{0.65}Te, рассчи-

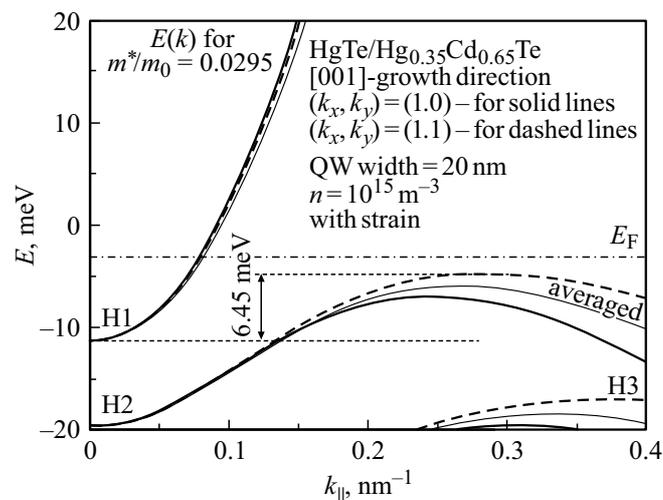


Рис. 1. Рассчитанная зонная структура напряженной квантовой ямы HgTe с $d_{QW} = 20$ нм [8,10]. Жирные сплошные линии для $(k_x, k_y) = (1, 0)$, пунктирные линии для $(k_x, k_y) = (1, 1)$. Тонкие сплошные кривые для усредненной структуры подзон (изотропная модель). Штрихпунктирная горизонтальная линия — пример положения уровня Ферми при $n = 1 \cdot 10^{15} \text{ м}^{-2}$.

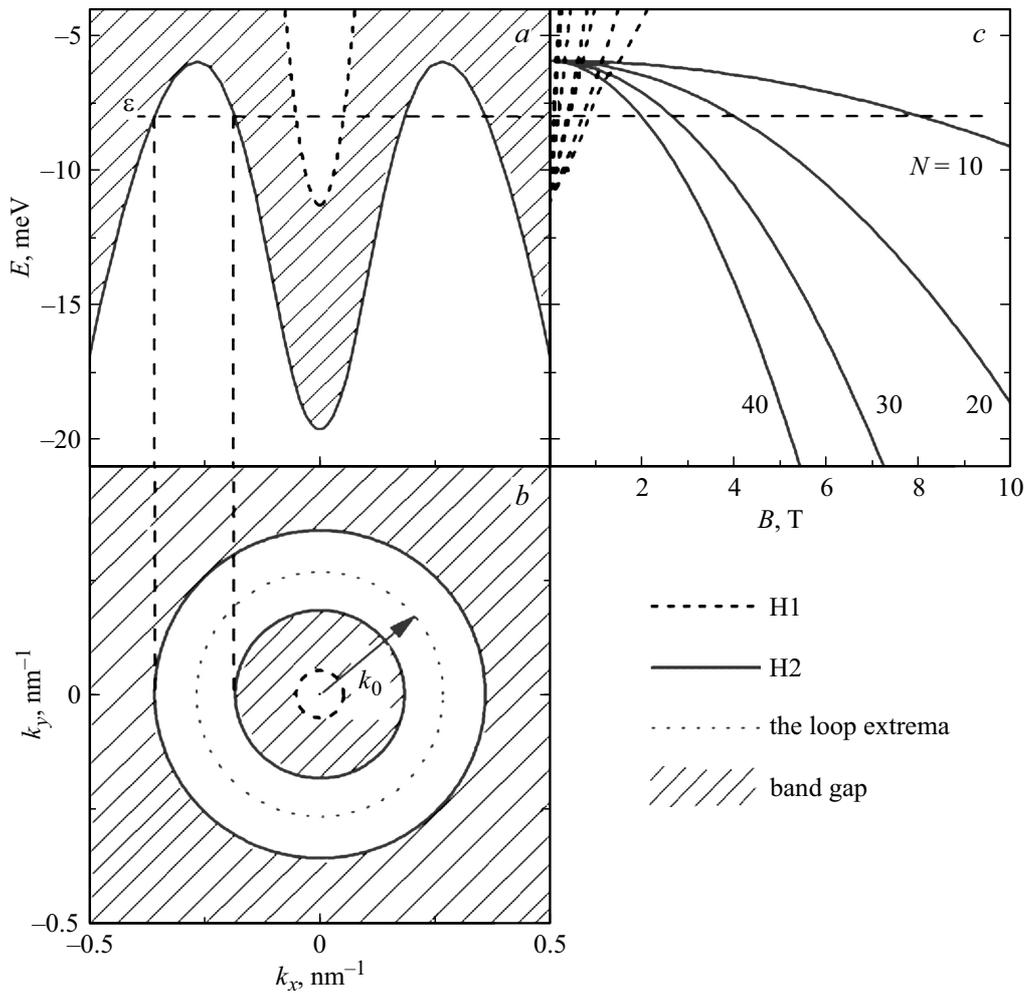


Рис. 2. *a* — зонная структура напряженной квантовой ямы HgTe с $d_{QW} = 20$ нм в изотропном приближении. *b* — изоэнергетические контуры дна зоны проводимости и потолка валентной зоны в координатах (k_x, k_y) , соответствующие энергии ϵ (пунктир на рис. 2, *a*). *c* — спектр уровней Ландау валентной зоны, вычисленный в модели „петли экстремумов“. Заштрихованы участки зонной диаграммы, соответствующие запрещенной щели между зоной проводимости и валентной зоной.

танная в рамках 8-зонной $k \cdot p$ -теории [8,10]. В валентной подзоне H2 законы дисперсии, $\epsilon_v(k_{\parallel})$, существенно различаются для (1,0) и (1,1) направлений на (k_x, k_y) плоскости (сплошная и пунктирная кривые на рис. 1 соответственно), так что контуры постоянной энергии деформированы (эффект гофрировки).

Довольно часто при оценке плотности дырок (см., например, работу [8]) можно пренебречь гофрировкой и использовать усредненную кривую для закона дисперсии валентной подзоны H2 (тонкая кривая на рис. 1).

3. Модель „петли экстремумов“

На рис. 2, *a* приведена зонная структура напряженной квантовой ямы HgTe с $d_{QW} = 20$ нм в изотропном приближении согласно работам [8,10]. На рис. 2, *b* представлены изоэнергетические контуры дна зоны проводимости (малая окружность с центром в точке Γ) и потолка

валентной зоны (окружности с радиусами $(k_0 \pm \Delta k)$ в координатах (k_x, k_y)), соответствующие энергии ϵ (пунктир на рис. 2, *a*), в изотропном приближении, когда гофрировка зоны Γ_8 не учитывается. На рис. 2, *a, b* заштрихованы участки зонной диаграммы, соответствующие запрещенной щели между зоной проводимости и валентной зоной.

В изотропном приближении изоэнергетические контуры вблизи потолка валентной зоны имеют вид колец (см. рис. 2, *b*), и мы для расчета эффективной массы и спектра уровней Ландау (LL) дырок используем модель, предложенную в работе [11] для полупроводников с решеткой вюрцита. Рашба и Шека в работе [11] показали, что если пренебречь анизотропией релятивистских взаимодействий, то минимум энергии электронов в этих полупроводниках достигается не в отдельных изолированных точках импульсного пространства, а на целой кривой — окружности, которая была названа петлей экстремумов.

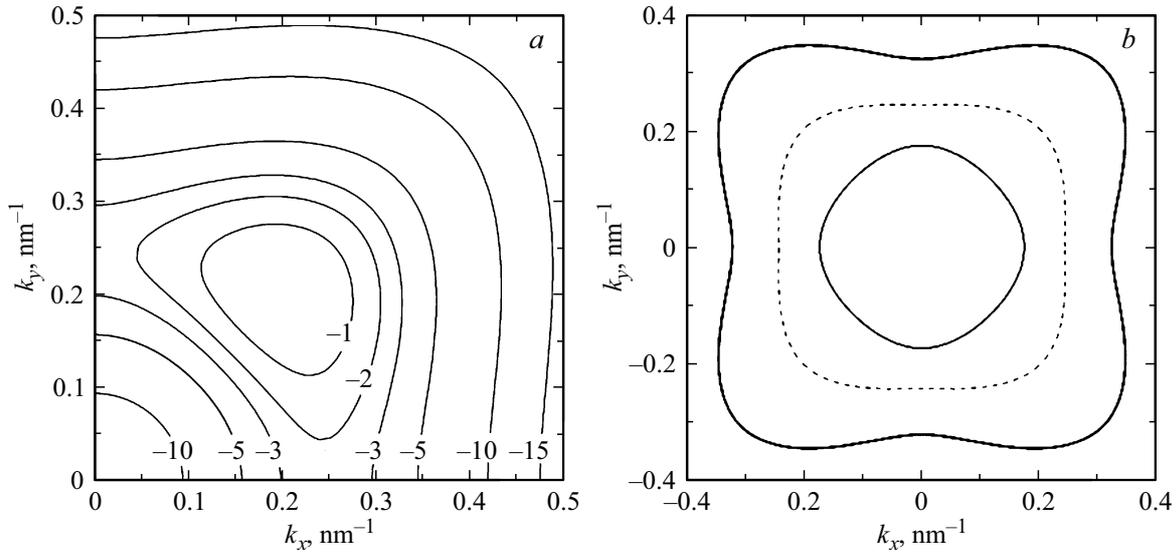


Рис. 3. *a* — картина контуров постоянной энергии вблизи потолка подзоны Н2 с учетом гофрировки спектра дырок. Показан только один квадрант зоны Бриллюэна. Цифры на кривых соответствуют значениям энергии ϵ (мэВ) при отсчете от вершины бокового максимума валентной зоны. *b* — изоэнергетические контуры потолка валентной зоны, соответствующие энергии $\epsilon = -4$ мэВ. Пунктирная кривая — „петля экстремумов“.

В этой модели закон дисперсии дырок с энергиями, близкими к экстремальной (при $p_{\perp} = p_0 \equiv \hbar k_0$), для 2D-случая примем в виде

$$\epsilon = a(p_{\perp} - p_0)^2, \tag{1}$$

где $p_{\perp} = (p_x^2 + p_y^2)^{1/2}$ при отсчете энергии в глубину валентной зоны.

Вычисляя в квазиклассическом приближении циклотронную эффективную массу [12]

$$m_c(\epsilon) = \frac{1}{2\pi} \frac{dS(\epsilon)}{d\epsilon}, \tag{2}$$

(где $S(\epsilon)$ — площадь кольца изоэнергетической поверхности, изображенной на рис. 2, *b*), и расстояние между квантованными магнитным полем B уровнями энергии

$$\Delta\epsilon = \frac{\hbar e B}{m_c(\epsilon)} \tag{3}$$

для LL-спектра дырок валентной зоны QW HgTe в модели „петли экстремумов“, при $N \gg 1$ находим

$$\epsilon(N, B) = aN^3 \left(\frac{\hbar e B}{p_0} \right)^2, \tag{4}$$

т. е. $\epsilon(N, B) \sim N^2 B^2$.

Спектр уровней Ландау валентной зоны, вычисленный в модели „петли экстремумов“, схематически показан на рис. 2, *c*. Важно, что этот LL-веер начинается с энергии $\epsilon = 0$, соответствующей энергии вершин (боковых максимумов) валентной зоны (подзоны Н2), и перекрывается с LL-веером зоны проводимости (подзоны Н1), как это и должно быть в SM-фазе.

4. Учет эффектов гофрировки

Учет анизотропии $\epsilon_v(k_{\parallel})$ в соответствии с рис. 1 приводит к более сложному виду изоэнергетических контуров вблизи потолка подзоны Н2 (см., например, работу [13]). Картина линий постоянной энергии валентной зоны с учетом гофрировки представлена на рис. 3, *a*: при малых энергиях основными состояниями дырок становятся четыре максимума, смещенные из центра зоны Бриллюэна в направлениях $(\pm 1; \pm 1)$, а в направлениях $(0; \pm 1)$ и $(\pm 1; 0)$ находятся четыре седловые точки.

При энергиях ниже седловых точек изоэнергетические контуры приобретают вид деформированных („гофрированных“) колец, и мы снова имеем „петлю экстремумов“, когда максимумы энергии дырок достигаются на гладкой замкнутой кривой в пространстве импульсов (см. пунктирную кривую на рис. 3, *b*).

В целом эффект гофрировки приводит к аномальной зависимости $m_c(\epsilon)$ с логарифмической расходимостью в седловых точках и, как следствие, к сложному виду картины уровней Ландау.

5. Заключение

Соответствие квантово-механических расчетов спектра уровней Ландау [8,10] с квазиклассической картиной, рассмотренной в данной статье, проанализировано в докладе Якунина и др. [14]. Отметим, что квазиклассический подход важен для теоретической оценки эффективной массы дырок сложной валентной зоны с немонотонным законом дисперсии.

Работа выполнена в рамках государственного задания ФАНО России (темы „Спин“ АААА-А18-118020290104-2 и „Электрон“, № АААА-А18-118020190098-5).

Список литературы

- [1] M.I. D'yakonov, A.V. Khaetskii. JETP, **55**, 917 (1982); L.G. Gerchikov, A. Subashiev. Phys. Status Solidi B, **160**, 443 (1990).
- [2] Z. Kvon, E. Olshanetsky, D. Kozlov, N. Mikhailov, S. Dvoretzskii. JETP Lett., **87**, 502 (2008).
- [3] Z.D. Kvon, E.B. Olshanetsky, E.G. Novik, D.A. Kozlov, N.N. Mikhailov, I.O. Parm, S.A. Dvoretzskiy. Phys. Rev. B, **83**, 193304 (2011).
- [4] G.M. Gusev, E.B. Olshanetsky, Z.D. Kvon, N.N. Mikhailov, S.A. Dvoretzskiy, J.C. Portal. Phys. Rev. Lett., **104**, 166401 (2010).
- [5] M. Zholudev, F. Teppe, M. Orlita, C. Consejo, J. Torres, N. Dyakonova, M. Czapkiewicz, J. Wróbel, G. Grabecki, N. Mikhailov, S. Dvoretzskii, A. Ikonnikov, K. Spirin, V. Aleshkin, V. Gavrilenko, W. Knap. Phys. Rev. B, **86**, 205420 (2012).
- [6] M. Zholudev, A.V. Ikonnikov, F. Teppe, M. Orlita, K.V. Maremyanin, K.E. Spirin, V.I. Gavrilenko, W. Knap, S.A. Dvoretzskiy, N.N. Mihailov. Nanoscale Res. Lett., **7**, 534 (2012).
- [7] G.M. Minkov, A.V. Germanenko, O.E. Rut, A.A. Sherstobitov, S.A. Dvoretzskiy, N.N. Mikhailov. Phys. Rev. B, **88**, 155306 (2013).
- [8] M.V. Yakunin, A.V. Suslov, M.R. Popov, E.G. Novik, S.A. Dvoretzskiy, N.N. Mikhailov, Phys. Rev. B, **93**, 085308 (2016).
- [9] G.M. Minkov, V.Ya. Aleshkin, O.E. Rut, A.A. Sherstobitov, A.V. Germanenko, S.A. Dvoretzskiy, N.N. Mikhailov. Phys. Rev. B, **96**, 035310 (2017).
- [10] E.G. Novik, A. Pfeuffer-Jeschke, T. Jungwirth, V. Latussek, C.R. Becker, G. Landwehr, H. Buhmann, L.W. Molenkamp. Phys. Rev. B, **72**, 035321 (2005).
- [11] Э.И. Рашба, В.И. Шека. ФТТ, **2**, 162 (1959).
- [12] И.М. Лифшиц, М.Я. Азбель, М.И. Каганов. *Электронная теория металлов* (М., Наука, 1971).
- [13] G. Landwehr, J. Gerschutz, S. Oehling, A. Pfeuffer-Jeschke, V. Latussek, C.R. Becker. Physica E, **6**, 713 (2000).
- [14] М.В. Якунин, С.М. Подгорных, М.Р. Попов, С.С. Криштопенко, Ф. Терре, В. Jouault, W. Desrat, Н.Н. Михайлов, С.А. Дворецкий. *Тез. докл. XXII Уральской Международной школы по физике полупроводников* (Екатеринбург, Россия, 2018) с. 170.

Редактор А.Н. Смирнов

„Extremum loop“ model for valence band spectrum of HgTe/HgCdTe quantum well with inverted band structure

S.V. Gudina¹, A.S. Bogolubskii¹, V.N. Neverov¹, N.G. Shelushinina¹, M.V. Yakunin^{1,2}

¹ Miheev Institute of Metal Physics, Ural Branch of Russian Academy of Sciences, 620108 Ekaterinburg, Russia

² Institute of Natural Sciences and Mathematics, Ural Federal University, 620002 Ekaterinburg, Russia

Abstract The effective mass and the Landau level spectrum are calculated for HgTe/HgCdTe quantum well valence band with inverted band structure in the quasi-classical „extremum loop“ model. In the semi-metallic phase, the Landau level fan of the valence band starts at $B = 0$ from the energy of the lateral maxima band, and overlaps with the fan of the Landau levels of the conduction band.