Письма в ЖЭТФ, том 100, вып. 12, с. 895 – 899

Антипересечение уровней Ландау в квантовых ямах HgTe/CdHgTe (013) с инвертированной зонной структурой

М. С. Жолудев[1)], *Ф. Теп*[+2)], *С. В. Морозов*, *М. Орлита*[*2)], *К. Консейо*[+2)], *С. Руфенах*[+2)], *В. Кнап*[+2)], *В. И. Гавриленко*, *С. А. Дворецкий*[△], *Н. Н. Михайлов*[△]

Институт физики микроструктур РАН, 603950 Н.Новгород, Россия

Нижегородский государственный университет им. Лобачевского, 603950 Н.Новгород, Россия

[+]*Laboratoire Charles Coulomb (L2C), UMR CNRS 5221, GIS-TERALAB, Universite Montpellier II, 34095 Montpellier, France*

[*]*Laboratoire National des Champs Magnetiques Intenses, CNRS-UJF-UPS-INSA, FR-38042 Grenoble, France*

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

Поступила в редакцию 31 октября 2014 г.

После переработки 14 ноября 2014 г.

В спектрах поглощения квантовых ям HgTe/CdHgTe с инвертированной зонной структурой в квантующих магнитных полях обнаружено одновременное расщепление линий межзонного перехода и циклотронного резонанса в зоне проводимости. Показано, что оно обусловлено отсутствием в кристалле центра инверсии, приводящим к взаимодействию нижнего уровня Ландау зоны проводимости и верхнего уровня Ландау валентной зоны.

DOI: 10.7868/S0370274X14240072

1. Введение. В последние годы наблюдается повышенный интерес к квантовым ямам HgTe/CdHgTe с инвертированной зонной структурой [1, 2], в которых волновые функции состояний в зоне проводимости сформированы преимущественно блоховскими функциями p-типа. Известно, что инвертированная зонная структура в объемном HgTe является следствием сильного спин-орбитального взаимодействия. В асимметричных квантовых ямах HgTe с инвертированным зонным спектром это приводит к гигантскому спиновому расщеплению Рашбы [3–5]. В то же время они проявляют свойства двумерного топологического изолятора (см., например, [2, 6–8]).

В таких структурах в критическом поле B_c имеет место пересечение нижнего уровня Ландау зоны проводимости и верхнего уровня Ландау валентной зоны [9, 10]. В то же время в работах [11, 12] сообщалось о расщеплении линии поглощения на межзонном переходе, традиционно обозначаемом как α [10], вблизи B_c. Авторы работы [11] предположили, что оно может быть связано с асимметрией элементарной ячейки (*Bulk Inversion Asymmetry*, BIA), приводящей к антипересечению уровней Ландау [13], либо с электрон-электронным взаимодействием, приводящим к гибридизации переходов между двумя парами уровней Ландау. Антипересечение уровней Ландау также должно приводить к расщеплению линии внутризонного перехода в зоне проводимости (линия β [10]), которого в работах [11, 12] не наблюдалось.

В данной работе в структуре HgTe/CdHgTe (013) с квантовой ямой с инвертированным зонным спектром экспериментально обнаружено расщепление линии внутризонного перехода β. Показано, что его величина является такой же, как и для линии α, т.е. что причиной расщепления служит именно BIA.

2. Образцы и методы исследования. Исследуемый образец 091223-1 был выращен методом молекулярно-лучевой эпитаксии на полуизолирующей подложке GaAs (013) с релаксированным буфером CdTe [14, 15]. Толщина квантовой ямы HgTe равнялась 8 нм. Барьерные слои $Cd_{0.64}Hg_{0.36}Te$ с обеих сторон от квантовой ямы селективно легировались индием. Темновая концентрация электронов в яме составляла $1.5 \cdot 10^{11}$ см$^{-2}$.

Измерение спектров циклотронного резонанса (ЦР) проводилось в геометрии Фарадея с использованием фурье-спектрометра в постоянном магнитном поле до 11 Тл при $T = 4.2$ К. Подробное описание методики измерений можно найти в работах [11, 12].

[1)] e-mail: zholudev@ipmras.ru

[2)] F. Teppe, M. Orlita, C. Consejo, S. Ruffenach, W. Knap

Для интерпретации спектров магнитопоглощения в работе были рассчитаны зависимости энергии уровней Ландау от магнитного поля в аксиальном приближении (рис. 1). При этом использовалось приближение огибающих функций с эффективным гамильтонианом Бёрта–Форемана размерности 8×8 [1, 16–18], учитывающим встроенную деформацию. Выражение для гамильтониана и набор параметров были теми же, что и в работе [12]. Магнитное поле учитывалось с помощью подстановки Пайерлса [19].

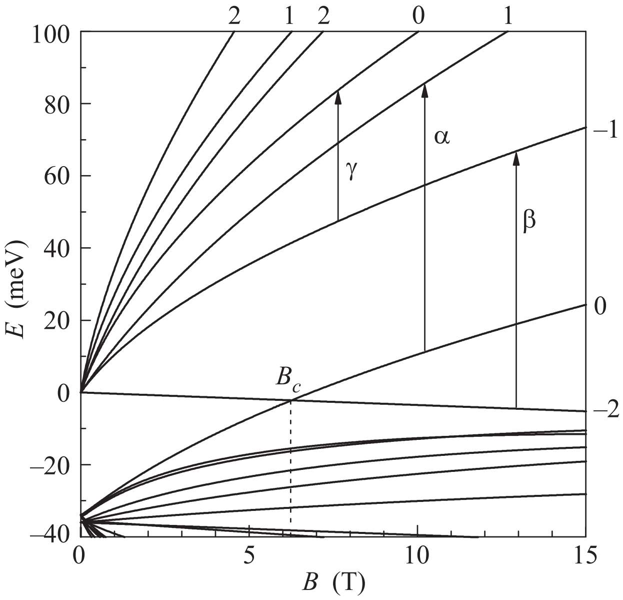

Рис. 1. Уровни Ландау для КЯ HgTe/$Cd_{0.64}Hg_{0.36}$Te шириной 8 нм. Стрелками отмечены наблюдаемые переходы. Числа соответствуют номерам N уровней Ландау

Разрешенные электродипольные переходы между уровнями Ландау ($\Delta N = 1$), которые могут наблюдаться в спектрах магнитопоглощения при небольшой концентрации электронов, показаны на рис. 1 стрелками.

3. Экспериментальные результаты. На рис. 2 приведена гистограмма поглощения исследуемого образца. В слабых магнитных полях (до 3 Тл), где измерения проводились с большим шагом по магнитному полю, наблюдаемое поглощение соответствует классическому циклотронному резонансу ($\hbar\omega \ll E_F$, ср. с [20]). Линия, возникающая при 3 Тл, соответствует переходу γ с уровня $N = -1$ на уровень $N = 0$ в зоне проводимости. Она наблюдается как ниже, так и выше полосы остаточных лучей подложки GaAs (34–37 мэВ). Линия внутризонного поглощения β (с $N = -2$ на $N = -1$) наблюдается сразу после полосы остаточных лучей и видна в диапазоне от 5 до 11 Тл.

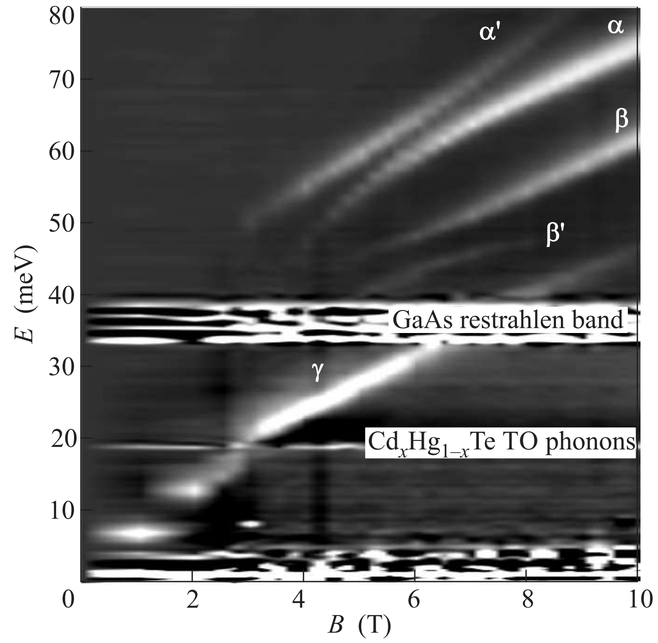

Рис. 2. Зависимость поглощения от частоты и магнитного поля. Светлый тон означает более сильное поглощение

При этом она имеет разрыв вблизи критического поля $B_c = 6.2$ Тл. Линия межзонного перехода α (с $N = 0$ в валентной зоне на $N = 1$ в зоне проводимости) расщепляется на две во всем диапазоне полей от 4 до 9 Тл.

Наблюдение расщепления линии β вблизи B_c стало возможным благодаря меньшей (почти в 2 раза) концентрации электронов в нашем образце по сравнению с аналогичным образцом A, исследованным в работе [12]. В образце A фактор заполнения уровней Ландау вблизи B_c, по-видимому, превышал 2 (концентрация электронов может несколько увеличиваться за счет межзонной подсветки излучением глобара фурье-спектрометра) и линия β наблюдалась лишь в полях свыше 8 Тл вдали от антикроссинга уровней Ландау.

Видно, что линии α и β расщеплены вблизи критического поля на одинаковую величину. Появляющиеся линии α' и β' отвечают запрещенным переходам с $N = -2$ на $N = -1$ в зоне проводимости и с $N = 0$ в валентной зоне на $N = -1$ в зоне проводимости соответственно. Вдали от критического поля они исчезают. Такая структура спектров магнитопоглощения возникает вследствие взаимодействия уровней Ландау с $N = 0$ валентной зоны и $N = -2$ зоны проводимости. Последнее является одним из предложенных в работе [11] объяснений расщепления линии α. Вблизи критического поля волновые функции этих двух уровней Ландау смешиваются, что и позволяет нам наблюдать запрещенные переходы.

4. Теория. Результат эксперимента, однозначно указывает на то, что в образцах с инвертированной зонной структурой уровни Ландау с $N = -2$ зоны проводимости и $N = 0$ валентной зоны взаимодействуют и вместо их пересечения наблюдается антипересечение. Следует отметить, что, как было показано в работе [1], выход за рамки аксиального приближения без учета BIA не приводит к взаимодействию этих уровней. Для вычисления энергии уровней Ландау 0 и -2 с учетом асимметрии элементарной ячейки использовалась теория возмущений.

В нулевом порядке теории возмущений волновая функция в системе координат, ось z которой направлена перпендикулярно плоскости квантовой ямы, описывается следующим столбцом из восьми огибающих:

$$\Psi_{i,N,M}(x,y,z) = \begin{pmatrix} f^{(1)}_{i,N,M}(z)\,\varphi_{N,M}(x,y) \\ f^{(2)}_{i,N,M}(z)\,\varphi_{N+1,M}(x,y) \\ f^{(3)}_{i,N,M}(z)\,\varphi_{N-1,M}(x,y) \\ f^{(4)}_{i,N,M}(z)\,\varphi_{N,M}(x,y) \\ f^{(5)}_{i,N,M}(z)\,\varphi_{N+1,M}(x,y) \\ f^{(6)}_{i,N,M}(z)\,\varphi_{N+2,M}(x,y) \\ f^{(7)}_{i,N,M}(z)\,\varphi_{N,M}(x,y) \\ f^{(8)}_{i,N,M}(z)\,\varphi_{N+1,M}(x,y) \end{pmatrix}, \qquad (1)$$

где i – номер уровня размерного квантования, N – номер уровня Ландау, M – квантовое число, отвечающее за вырождение уровней Ландау, а функция $\varphi_{N,M}(x,y)$ равна поперечной части волновой функции свободного электрона в магнитном поле, явный вид которой зависит от калибровки. Функции $f^{(j)}_{i,N,M}(z)$ вычислялись с помощью разложения по плоским волнам аналогично [20].

При $N = -2$ в формуле (1) поперечные функции для всех компонент, кроме шестой, тождественно равны нулю, так как для них первый нижний индекс отрицателен (см., например, [1]). Таким образом, волновая функция нижнего уровня Ландау зоны проводимости раскладывается только по базисным функциям представления Γ_8. Для верхнего уровня Ландау валентной зоны ($N = 0$) в формуле (1) в нуль обращается только третья компонента. Известно, что в квантовых ямах с инвертированной зонной структурой валентная зона образована состояниями с симметрией Γ_6 [2, 21]. Поэтому при изучении взаимодействия уровней Ландау 0 и -2 можно ограничиться блоком $\Gamma_6 \times \Gamma_8$.

Оператор возмущения, вызванного асимметрией элементарной ячейки, для квантовой ямы, выращенной на плоскости (001), имеет следующий вид [22]:

$$\hat{\mathbf{H}}^{(\Gamma_6\times\Gamma_8)}_{\mathrm{BIA}} = \begin{pmatrix} \sqrt{3}\hat{B} & \hat{B}_z & \hat{B}^\dagger & 0 \\ 0 & \hat{B} & \hat{B}_z & \sqrt{3}\hat{B}^\dagger \end{pmatrix}, \qquad (2)$$

где

$$\hat{B} = \frac{1}{2\sqrt{3}}\left(\mathcal{B}\hat{k}_z + \hat{k}_z\mathcal{B}\right)\hat{k}_-, \qquad (3)$$

$$\hat{B}_z = \frac{i\mathcal{B}}{\sqrt{6}}(\hat{k}_+^2 - \hat{k}_-^2). \qquad (4)$$

Параметр $\mathcal{B}$ характеризует степень BIA в материале (в [22] он обозначается как B^+_{8v}).

Поправка к энергии уровня Ландау E вычислялась в первом порядке теории возмущений:

$$\begin{vmatrix} E_{v,0} - E & H_{0,-2} \\ H^*_{0,-2} & E_{c,-2} - E \end{vmatrix} = 0, \qquad (5)$$

где

$$H_{0,-2} = \langle\Psi_{v,0,M}|\,\hat{H}_{\mathrm{BIA}}\,|\Psi_{c,-2,M}\rangle = \\ = \int d^3r\left[f^{(2)}_{v,0,M}(z)\varphi_{1,M}(x,y)\right]^* \times \\ \times \sqrt{3}\hat{B}^\dagger\left[f^{(6)}_{c,-2,M}(z)\varphi_{0,M}(x,y)\right]. \qquad (6)$$

Для того чтобы получить оператор возмущения для гетероструктуры, выращенной на атомной плоскости, отличной от (001), мы воспользовались методом, изложенным в работе [23]. Будем описывать направление роста гетероструктуры z' относительно главной оси симметрии z (направление [001]) углами θ (угол между осями z и z') и φ (угол между проекцией z' на плоскость (xy) и осью x). Преобразование вектора $\hat{\mathbf{k}}$ производится стандартным способом [24], а преобразование матрицы (2) задается следующей формулой [23]:

$$\hat{\mathbf{H}}'^{(\Gamma_6\times\Gamma_8)}_{\mathrm{BIA}} = \exp\left(\frac{i}{2}\sigma_z\varphi\right)\exp\left(\frac{i}{2}\sigma_y\theta\right) \times \\ \times \hat{\mathbf{H}}^{(\Gamma_6\times\Gamma_8)}_{\mathrm{BIA}} \times \\ \times \exp\left(-iJ_z\varphi\right)\exp\left(-iJ_y\theta\right), \qquad (7)$$

где σ_i – матрицы Паули, а J_i – матрицы проекций полного углового момента в базисе Γ_8.

Нетрудно проверить, что выражение (2) (в отличие от (3) и (4)) одинаково для структур, выращенных на любой плоскости. Поэтому формула (6) сохраняет свой вид при любой ориентации, хотя оператор $\hat{B}$ при этом меняется. Будем обозначать полученный в результате оператор как $\hat{B}'$.

Поперечная функция $\varphi_{0,M}(x,y)$ переходит в $\varphi_{1,M}(x,y)$ только под действием оператора $\hat{k}_+$ [1]. Таким образом, интеграл (6) отличен от нуля, только если в операторе $\hat{B}'^\dagger$ присутствуют слагаемые, пропорциональные оператору $\hat{k}_-$. Тогда оператор $\hat{B}'$ в общем виде (с указанием лишь существенных для нас членов) равен

$$\hat{B}' = \frac{\chi}{2\sqrt{3}}\left(\mathcal{B}\hat{k}_z + \hat{k}_z\mathcal{B}\right)\hat{k}_- + \ldots, \tag{8}$$

где χ – численный коэффициент, не зависящий ни от материальных параметров, ни от компонент квазиимпульса.

Расщепление уровней Ландау с $N = -2$ зоны проводимости и $N = 0$ валентной зоны в критическом магнитном поле B_c равно

$$\Delta E = |\chi|\sqrt{\frac{eB_c}{\hbar c}}\left|M_{0,-2}\right|, \tag{9}$$

где $M_{0,-2}$ – матричный элемент, слабо зависящий от ориентации квантовой ямы:

$$M_{0,-2} = \int f^{(2)*}_{v,0,M}\left(\mathcal{B}\hat{k}_z + \hat{k}_z\mathcal{B}\right)f^{(6)}_{c,-2,M}\,dz.$$

Значение χ определяется направлением роста гетероструктуры (θ,φ). Его можно получить из формулы (7):

$$\chi = \cos(2\varphi)\cos(2\theta) + \\ + \frac{i}{2}\sin(2\varphi)\cos\theta\left(3\cos^2\theta - 1\right). \tag{10}$$

Из выражения (10) следует, что модуль χ имеет максимальную величину ($|\chi| = 1$) для направления [001]. В то же время значение χ, а с ним и расщепление уровней Ландау равно нулю для направлений [011] и [111]. Как видно из рис. 3, существует целый диапазон направлений, для которых взаимодействие уровней Ландау 0 и -2, вызванное асимметрией элементарной ячейки, оказывается ослаблено в 5 и более раз. Величина $|\chi|$ для атомной плоскости (013), на которой выращен исследуемый образец, составляет 0.8 и не сильно уступает значению для плоскости (001).

Для CdTe параметр $\mathcal{B}$ известен. Он равен 22.41 эВ·Å^2 [22]. Для HgTe эта величина неизвестна. Она может быть определена путем подгонки рассчитываемого расщепления линий α и β к измеренному значению, которое составляет 4 мэВ. Таким образом была получена величина 60 эВ·Å^2 (ср. с [13]).

На рис. 4 представлены результаты расчетов энергий переходов α, α', β и β' с учетом расщепления уровней Ландау 0 и -2, вызванного BIA. Видно, что теоретические кривые лежат чуть ниже, чем наблюдаемые линии поглощения. Таким образом, имеет место рассогласование, которое наблюдалось ранее в работах [11, 12, 20, 25, 26]. Коррекции параметров, выполненной в работе [12], оказалось достаточно для количественного описания переходов α и α', в то время как линия β хорошо описывалась только в полях более 10 Тл, т.е. вдали от B_c. Такое поведение линии β можно было бы

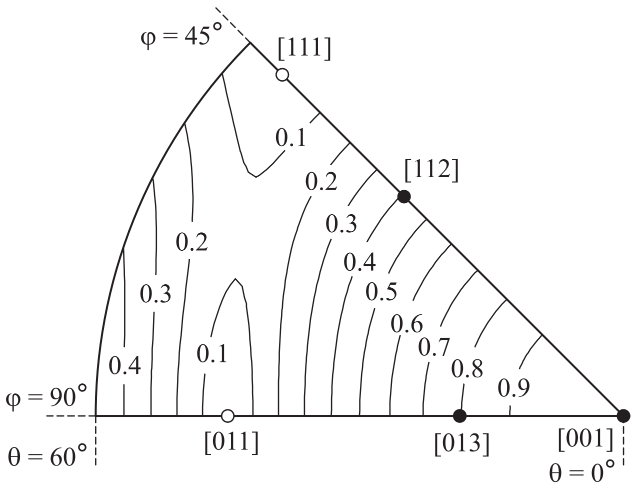

Рис. 3. Значения $|\chi|$ для различных ориентаций

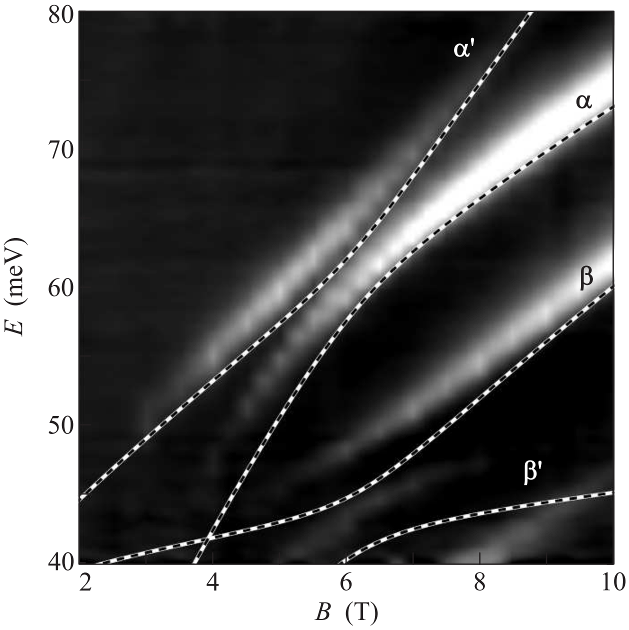

Рис. 4. Энергии переходов вблизи критического магнитного поля, вычисленные с учетом асимметрии элементарной ячейки HgTe. Результаты расчетов (штриховые линии) наложены на экспериментальную гистограмму магнитопоглощения

объяснить влиянием BIA. Однако полученные в настоящей работе результаты показывают, что используемая теоретическая модель не дает количественного описания ни для линии β, ни для впервые обнаруженной линии β' даже с учетом BIA. Новые экспериментальные данные можно использовать для дальнейшего совершенствования методов расчета энергетического спектра гетероструктур на основе $Cd_xHg_{1-x}Te$.

5. Заключение. Таким образом, в настоящей работе для образца с квантовой ямой HgTe/CdHgTe (013) с инвертированной зонной структурой впервые обнаружено одновременное расщепление линий межзонного перехода (α) и циклотронного резонанса (β). Показано, что данное расщепление может быть описано с помощью модели, учитывающей асимметрию элементарной ячейки кристалла HgTe, в рамках которой уровни Ландау с номерами 0 и -2 взаимодействуют и испытывают антипересечение.

Одинаковый масштаб расщепления этих линий указывает на то, что его причиной является именно антипересечение уровней Ландау, вызванное асимметрией элементарной ячейки кристалла HgTe, а не электрон-электронное взаимодействие.

Работа выполнена при поддержке РФФИ (гранты # 13-02-00894, 14-02-01103, 14-02-31588), Российской академии наук, грантов Президента РФ # МК-4758.2014.2, МК-3057.2013.2, НШ-1214.2014.2 и Минобрнауки (соглашение от 27.08.2013 # 02.B.49.21.0003 между МОН РФ и ННГУ).

1. E. G. Novik, A. Pfeuffer-Jeschke, T. Jungwirth, V. Latussek, C. R. Becker, G. Landwehr, H. Buhmann, and L. W. Molenkamp, Phys. Rev. B **72**, 035321 (2005).
2. B. A. Bernevig, T. L. Hughes, and S.-C. Zhang, Science **314**, 1757 (2006).
3. X. C. Zhang, A. Pfeuffer-Jeschke, K. Ortner, V. Hock, H. Buhmann, C. R. Becker, and G. Landwehr, Phys. Rev. B **63**, 245305 (2001).
4. Y. S. Gui, C. R. Becker, N. Dai, J. Liu, Z. J. Qiu, E. G. Novik, M. Schäfer, X. Z. Shu, J. H. Chu, H. Buhmann, and L. W. Molenkamp, Phys. Rev. B **70**, 115328 (2004).
5. К. Е. Спирин, А. В. Иконников, А. А. Ластовкин, В. И. Гавриленко, С. А. Дворецкий, Н. Н. Михайлов, Письма в ЖЭТФ **92**(1), 65 (2010).
6. M. König, S. Wiedmann, C. Brüne, A. Roth, H. Buhman, L. W. Molenkamp, X.-L. Qi, and S.-C. Zhang, Science **318**, 766 (2007).
7. C. Brüne, A. Roth, H. Buhmann, E. M. Hankiewicz, L. W. Molenkamp, J. Maciejko, X.-L. Qi, and S.-C. Zhang, Nat. Phys. **8**, 485 (2012).
8. З. Д. Квон, К.-М. Дантшер, К. Цот, Д. А. Козлов, Н. Н. Михайлов, С. А. Дворецкий, С. Д. Ганичев, Письма в ЖЭТФ **99**(5), 333 (2014).
9. J. R. Meyer, R. J. Wagner, F. J. Bartoli, C. A. Hoffman, M. Dobrowolska, T. Wojtowicz, J. K. Furdyna, and L. R. Ram-Mohan, Phys. Rev. B **42**, 9050 (1990).
10. M. Schultz, U. Merkt, A. Sonntag, U. Rössler, R. Winkler, T. Colin, P. Helgesen, T. Skauli, and S. Løvold, Phys. Rev. B **57**, 14772 (1998).
11. M. Orlita, K. Masztalerz, C. Faugeras, M. Potemski, E. G. Novik, C. Brüne, H. Buhmann, and L. W. Molenkamp, Phys. Rev. B **83**, 115307 (2011).
12. M. Zholudev, F. Teppe, M. Orlita, C. Consejo, J. Torres, N. Dyakonova, M. Czapkiewicz, J. Wróbel, G. Grabecki, N. Mikhailov, S. Dvoretskii, A. Ikonnikov, K. Spirin, V. Aleshkin, V. Gavrilenko, and W.Knap, Phys. Rev. B **86**, 205420 (2012).
13. M. Pang and X. G. Wu, Phys. Rev. B **88**, 235309 (2013).
14. N. N. Mikhailov, R. N. Smirnov, S. A. Dvoretsky, Y. G. Sidorov, V. A. Shvets, E. V. Spesivtsev, and S. V. Rykhlitski, Int. J. Nanotechnology **3**, 120 (2006).
15. S. Dvoretsky, N. Mikhailov, Y. Sidorov, V. Shvets, S. Danilov, B. Wittman, and S. Ganichev, J. Electronic Materials. **39**, 918 (2010).
16. G. Bastard, *Wave Mechanics Applied to Semiconductor Heterostructures*, Les Editions de Physique (1991).
17. M. G. Burt, J. Phys.: Cond. Mat. **4**, 6651 (1992).
18. B. A. Foreman, Phys. Rev. B **48**, 4964 (1993).
19. J. M. Luttinger and W. Kohn, Phys. Rev. **97**, 869 (1955).
20. A. V. Ikonnikov, M. S. Zholudev, K. E. Spirin, A. A. Lastovkin, K. V. Maremyanin, V. Ya. Aleshkin, V. I. Gavrilenko, O. Drachenko, M. Helm, J. Wosnitza, M. Goiran, N. N. Mikhailov, S. A. Dvoretskii, F. Teppe, N. Diakonova, C. Consejo, B. Chenaud, and W.Knap, Semicond. Sci. Tech. **26**, 125011 (2011).
21. R. Winkler, L. Y. Wang, Y. H. Lin, and C. S. Chu, Sol. State Com. **152**, 2096 (2012).
22. R. Winkler, *Spin-Orbit Coupling Effects in Two-Dimensional Electron and Hole Systems*, Springer, Berlin, Heidelberg (2003).
23. O. E. Raichev, Phys. Rev. B **85**, 045310 (2012).
24. J. Los, A. Fasolino, and A. Catellani, Phys. Rev. B **53**, 4630 (1996).
25. M. S. Zholudev, A. V. Ikonnikov, F. Teppe, M. Orlita, K. Maremyanin, K. Spirin, V. Gavrilenko, W. Knap, S. Dvoretskiy, and N. Mihailov, Nano. Res. Lett. **7**(1), 534 (2012).
26. А. В. Иконников, М. С. Жолудев, К. В. Маремьянин, К. Е. Спирин, А. А. Ластовкин, В. И. Гавриленко, С. А. Дворецкий, Н. Н. Михайлов, Письма в ЖЭТФ **95**(8), 452 (2012).