Письма в ЖЭТФ, том 101, вып. 5, с. 360 – 364 

# 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 HgTe 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 КЯ, 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 $A_2B_6$ удается выращивать HgTe КЯ 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 КЯ 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 нелегированных HgTe квантовых ям толщиной 18–22 нм, с ориентациями (013) и (100). Технология их изготовления подробно описана в [10]. Измерения проводились при температуре 4.2 K в магнитных полях до 1 Т с использованием стандартной схемы фазочувствительного детектирования на частоте 12 Гц при величине измерительного тока через образец 100 нА, исключающей эффекты разогрева. Зависимости диссипативной ($\rho_{xx}$) и холловской ($\rho_{xy}$) компонент тензора сопротивления исследованных образцов от затворного напряжения $V_g$ 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 $\rho_{xx}(V_g)$ представляет собой кривую с максимумом, расположенным в окрестности точки зарядовой нейтральности (ТЗН), а $\rho_{xy}(V_g)$ – 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

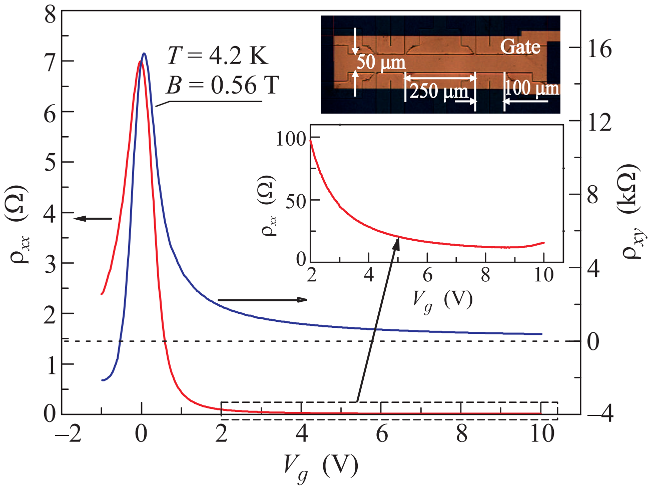


Рис. 1. Типичные зависимости диссипативной, $\rho_{xx}$ (при $B = 0$ Тл), и холловской $\rho_{xy}$ (при $B = 0.56$ Тл), компонент тензора сопротивления от затворного напряжения. Вставка – изображение образца, вид сверху; зависимости $\rho_{xx}(V_g)$ при больших $V_g$ в увеличенном масштабе

спектром, что соответствует электронным концентрациям $N_s > 5 \cdot 10^{10}\,\text{см}^{-2}$ для образцов с ориентацией (013) [3, 10] и $N_s > 1 \cdot 10^{10}\,\text{см}^{-2}$ для ориентации (100) [11]. На рис. 2 приведены экспериментальные зависимости $\mu(N_s)$ подвижности электронов от их концентрации для нескольких образцов (их основные характеристики представлены в табл. 1). Хорошо видно, что качественное поведение всех зависимостей $\mu(N_s)$ является одинаковым: при малых $N_s$ подвижность растет, достигает максиму-

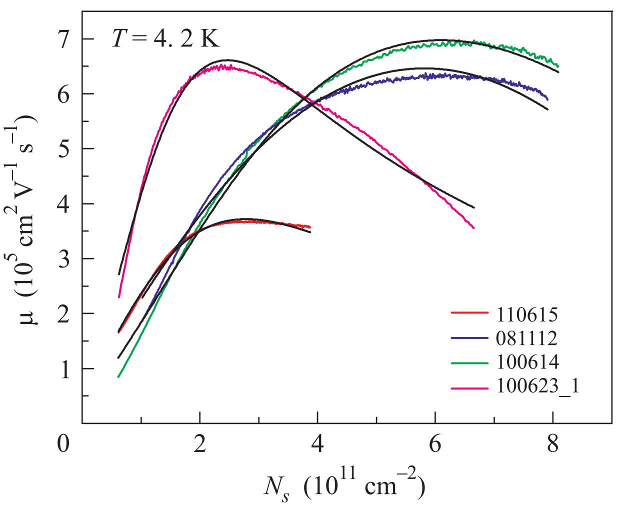


Рис. 2. Экспериментальные и расчетные зависимости $\mu(N_s)$ подвижности электронов от концентрации при $T = 4.2$ K. Тонкие черные линии соответствуют расчетным кривым. Ориентация образца 100623_1 – (100), остальных – (013)

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**$^{*)}$

| Образец | $N_{\text{imp}}$ см$^{-2}$ | $d_{sp}$, нм | $L$, нм | $h$, Å |
|---|---|---|---|---|
| 101615 | $1.0{\cdot}10^{10}$ | 1.4 | 7.9 | 1.6 |
| 081112 | $1.{\cdot}10^{10}$ | 0.8 | 8.6 | 0.8 |
| 101614 | $1.8{\cdot}10^{10}$ | 2.7 | 17.3 | 0.9 |
| 100623_1 | $1.2{\cdot}10^{10}$ | 5.2 | 17.3 | 1.4 |

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

ма, равного $(4-7)\cdot 10^5\,\text{см}^2/\text{Вс}$, 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 $N_s \approx 2\cdot 10^{11}\,\text{см}^{-2}$, а для 110614 и 081112 – при $N_s \approx 6\cdot 10^{11}\,\text{см}^{-2}$. 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 HgTe 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 $\psi$ 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], $\mathbf{k}$ 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

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

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 $8\times 8$ для 8 коэффициентов $A_{\alpha j}$, $B_{\alpha j}$. Вследствие крамерсовского вырождения эта система может быть разбита на две системы $4\times 4$ для коэффициентов $A_{11}$, $A_{22}$, $B_{11}$, $B_{22}$ и $A_{12}$, $A_{21}$, $B_{12}$, $B_{21}$. Обращение в нуль одного из определителей вышеупомянутых систем $4\times 4$ 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 $k=k_{\text{F}}=\sqrt{2\pi N_s}$ представлена на рис. 3. Видно,

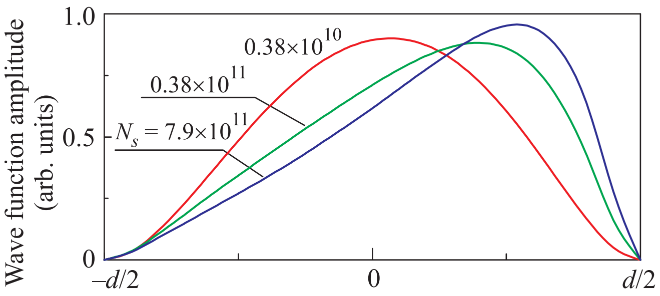


Рис. 3. Эволюция волновой функции электрона в яме как функции $k=k_F=\sqrt{2\pi N_s}$. При изменении знака $k_y$ на противоположный максимум волновой функции будет смещаться в сторону левой границы

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

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:

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

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 $N_{\mathrm{imp}}$ и их среднее расстояние до максимума волновой функции $d_{sp}$. Тем самым неоднородное распределение заряженных примесей моделировалось заряженной плоскостью со средней плотностью заряда $eN_{\mathrm{imp}}$. 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 КЯ в пределах $(1-2)\cdot10^{10}$ 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_М 13-02-12148), РАН и МОН.

1. M. König, S. Wiedmann, C. Brüne, A. Roth, H. Buhmann, L.W. Molenkamp, X.L. Qi, and S.C. Zhang, Science **318**, 766 (2007).
2. З.Д. Квон, Е.Б. Ольшанецкий, Д.А. Козлов, Н.Н. Михайлов, С.А. Дворецкий, Письма в ЖЭТФ **87**, 588 (2008).
3. Е.Б. Ольшанецкий, З.Д. Квон, М.В. Энтин, Л.И. Магарилл, Н.Н. Михайлов, С.А. Дворецкий, Письма в ЖЭТФ **89**, 338 (2009).
4. 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).
5. 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).
6. Д.А. Козлов, З.Д. Квон, Н.Н. Михайлов, С.А. Дворецкий, Письма в ЖЭТФ **93**, 186 (2011).
7. T. Ando, A. Fowler, and F. Stern, Rev. Mod. Phys. **54**, 437 (1982).
8. М.И. Дьяконов, А.В. Хаецкий, ЖЭТФ **82**, 1584 (1982).
9. L.G. Gerchikov and A.V. Subashiev, Phys. Stat. Sol **160**, 443 (1990).
10. З.Д. Квон, Е.Б. Ольшанецкий, Д.А. Козлов, Н.Н. Михайлов, С.А. Дворецкий, ФНТ **37**, 258 (2011).
11. 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).

12. 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).
14. R. E. Prange and T. W. Nee, Phys. Rev. **168**, 779 (1968).
15. A. V. Chaplik and M. V. Entin, Sov. Phys. JETP **28**, 514 (1968) [ZhETF **55**, 990 (1968)].
16. L. I. Magarill and M. V. Entin, Письма в ЖЭТФ **100**, 639 (2014).
17. Дж. Займан, *Модели беспорядка*, Мир, М. (1982).