

**Федеральное государственное бюджетное учреждение науки
Институт физики микроструктур Российской академии наук**

На правах рукописи

Жолудев Максим Сергеевич

**ТЕРАГЕРЦОВАЯ СПЕКТРОСКОПИЯ
КВАНТОВЫХ ЯМ $Hg_{1-x}Cd_xTe/Cd_yHg_{1-y}Te$**

05.27.01 — твердотельная электроника, радиоэлектронные компоненты,
микро и наноэлектроника, приборы на квантовых эффектах

Диссертация на соискание учёной степени
кандидата физико-математических наук

Научный руководитель
доктор физико-математических наук
проф. В. Я. Алёшкин

Нижний Новгород — 2013

Оглавление

Оглавление	2
Введение	4
1 Обзор литературы	10
1.1 Приближение огибающих функций для расчёта электронных спектров гетероструктур	10
1.2 Кусочное решение	11
1.3 Эффективный гамильтониан	12
1.4 Методы решения уравнения Шрёдингера	13
1.5 Структуры выращенные на различных атомных плоскостях	14
1.6 Энергетический спектр электронов в гетероструктурах на основе HgCdTe .	16
2 Расчёт энергетического спектра носителей в квантовой яме $Hg_{1-x}Cd_xTe/Cd_yHg_{1-y}Te$, выращенной на атомной плоскости (013)	21
2.1 Гамильтониан гетероструктуры в произвольной системе координат	22
2.1.1 Метод инвариантов	22
2.1.2 Преобразование гамильтониана при повороте	24
2.1.3 Вычисление тензора деформации	28
2.2 Гамильтониан в четырёхзонной модели	33
2.2.1 Базисные функции и их преобразование при поворотах	33
2.2.2 Аксимальное приближение	34
2.2.3 Матрицы поворота для направления (013)	38
2.2.4 Гамильтониан гетероструктуры, выращенной на атомной плоскости (013)	38
2.2.5 Поправки, связанные с отсутствием центра инверсии в объёме	43
2.3 Расчёт состояний электронов	44
2.3.1 Гетероструктура без внешнего магнитного поля	44

2.3.2 Уровни Ландау	46
2.4 Расчёт зонной структуры квантовых ям $HgCdTe/CdHgTe$	50
2.4.1 Параметры, используемые при расчётах	50
2.4.2 Метод расчёта	51
2.4.3 Зависимость зонной структуры от толщины ямы	52
3 Экспериментальное исследование зонной структуры квантовых ям $HgCdTe/CdHgTe$	59
3.1 Структура исследуемых образцов	59
3.2 Зонная структура квантовых ям $HgCdTe/CdHgTe$ в отсутствие магнитного поля	59
3.2.1 Терагерцевая фотопроводимость узкозонных квантовых ям	59
3.2.2 Исследование зоны проводимости с помощью циклотронного резонанса	66
3.3 Уровни Ландау в квантовых ямах $HgTe/Cd_yHg_{1-y}Te$	72
3.3.1 Циклотронный резонанс и межзонные переходы в квантующих магнитных полях в образцах с нормальной зонной структурой	74
3.3.2 Циклотронный резонанс и межзонные переходы в квантующих магнитных полях в образцах с инвертированной зонной структурой	80
3.3.3 Циклотронный резонанс и межзонные переходы в квантующих магнитных полях для образца в полуметаллическом состоянии	90
3.3.4 Причина антипересечения уровней Ландау	93
3.4 Усиление терагерцового излучения на межзонных переходах в квантовой яме	96
Заключение	100
Приложение	102
A Выражения для матриц U в модели Кейна	102
B Выражения для матриц Q и K	108
В Инварианты и параметры в гамильтониане Кейна	111
Г Обозначения	114
Список литературы	115
Список публикаций автора	124

Введение

Актуальность темы исследования

В последние годы наблюдается повышенный интерес к квантовым ямам на основе твёрдого раствора $\text{Cd}_x\text{Hg}_{1-x}\text{Te}$, которые обладают рядом замечательных свойств. В то время как CdTe имеет нормальную зонную структуру, HgTe обладает так называемой инвертированной зонной структурой из-за сильного спин-орбитального взаимодействия. Тип зонной структуры квантовой ямы из «инвертированного» материала и барьерами из «нормального» материала зависит от её ширины [1; 2]. Существует критическое значение толщины ямы, где ширина запрещённой зоны равна нулю. Яма с толщиной меньше критической имеет нормальную зонную структуру, а больше критической — инвертированную [3; 4]. Возможность получения произвольной ширины запрещённой зоны вплоть до нуля делает эти структуры перспективными для применения в области инфракрасной и терагерцовой оптоэлектроники [5; 6]. Квантовые ямы с инвертированной зонной структурой являются двумерными топологическими изоляторами [1; 2] (то есть в них имеются локализованные на краях образца состояния с нулевой шириной запрещённой зоны, для которых спин электрона определяется направлением движения). Особенности структуры волновых функций зоны проводимости в инвертированных квантовых ямах приводят к сильным спин-зависимым эффектам, которые делают такие ямы перспективными для спинtronики [7; 8]. Всё это вместе взятое стимулирует экспериментальные и теоретические исследования структур такого типа.

Диссертация посвящена изучению узкозонных гетероструктур с одиночными квантовыми ямами $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}/\text{Cd}_y\text{Hg}_{1-y}\text{Te}$, выращенных на атомной плоскости (013). Теоретическое описание таких структур осложняется тем, что даже малые поправки к энергетическому спектру (порядка нескольких мэВ) могут оказаться существенными по сравнению с шириной запрещённой зоны. Для количественного описания узкозонных квантовых ям в диссертации использовался $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ гамильтониан 8×8 , учитывающий влияние удаленных зон, встроенную деформацию и отличие атомной плоскости, на которой выращена структура, от (001). Малая ширина запрещённой зо-

ны приводит к тому, что характерные энергии оптических переходов в таких образцах лежат в терагерцовом диапазоне. Поэтому наиболее адекватным методом экспериментального исследования зонного спектра этих структур представляется терагерцовая спектроскопия.

Степень разработанности темы исследования

В последнее время наблюдается прогресс в технологии молекулярно-лучевой эпитаксии гетероструктур на основе $\text{Cd}_x\text{Hg}_{1-x}\text{Te}$ (особенно для структур, выращенных на низкосимметричных плоскостях, например (013)), что привело к увеличению разнообразия доступных высококачественных образцов (см., например, [2; 9–11]). Большая часть экспериментальных исследований выполнена транспортными методами, что в частности позволило наблюдать квантовый спиновый эффект Холла [2] в образцах с инвертированной зонной структурой и гигантское (до 30 мэВ) спиновое расщепление Рашбы в асимметричных структурах [7; 8], продемонстрировать линейный закон дисперсии в квантовых ямах критической толщины [12]. В широких квантовых ямах было обнаружено перекрытие зоны проводимости и валентной зоны, приводящее к существованию электронного и дырочного двумерного газов в термодинамическом равновесии [13; 14]. Эффективным методом изучения энергетического спектра узкозонных материалов является исследование циклотронного резонанса и межзонного магнитопоглощения в квантующих магнитных полях. В гетероструктурах $\text{HgTe}/\text{CdHgTe}$ такие исследования были начаты в работах [3; 4] и выполнены лишь на нескольких образцах с инвертированным зонным спектром. Первые модельные расчеты энергетических спектров гетероструктур $\text{HgTe}/\text{CdHgTe}$ с квантовыми ямами методом огибающих функций были выполнены в работе [15], когда еще отсутствовали устоявшиеся представления о граничных условиях и величине разрыва зон на гетериインターフェース HgTe/CdTe . Дальнейшее развитие эта модель применительно в квантовым ямам $\text{HgTe}/\text{CdHgTe}$ (001) получила в работах группы Университета Вюрцбурга (см., например, [9]), которые использовали граничные условия, предложенные в работе [16]. Общий подход к расчетам зонных спектров гетероструктур, выращенных на низкосимметричных атомных плоскостях, был предложен в работе [17]. Однако, до настоящего времени такие расчеты для гетероструктур $\text{HgTe}/\text{CdHgTe}$ проводились лишь для образцов, выращенных на плоскости (112). Таким образом, до начала настоящего исследования отсутствовали четкие представления об энергетических спектрах узкозонных и бесщелевых гетероструктур $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}/\text{Cd}_y\text{Hg}_{1-y}\text{Te}$ с квантовыми ямами, выращенных на плоскости (013).

Цели и задачи

Основной целью диссертационной работы является расширение знаний об узко-зонных и бесщелевых гетероструктурах на основе $Cd_xHg_{1-x}Te$ с квантовыми ямами, выращенных на плоскости (013). Это включает в себя решение следующих задач:

1. Разработка метода расчёта зонной структуры и уровней Ландау в гетероструктурах на основе узко-зонных и бесщелевых полупроводников, выращенных на произвольной атомной плоскости.
2. Исследование терагерцовой фотопроводимости (ФП) узко-зонных гетероструктур с квантовыми ямами $Hg_{1-x}Cd_xTe / Cd_yHg_{1-y}Te$ (013).
3. Исследование циклотронного резонанса (ЦР) в квантовых ямах $Hg_{1-x}Cd_xTe / Cd_yHg_{1-y}Te$ (013) в слабых магнитных полях и сопоставление измеренной циклотронной массы с результатами расчётов.
4. Исследование циклотронного резонанса и межзонных переходов в квантовых ямах $Hg_{1-x}Cd_xTe / Cd_yHg_{1-y}Te$ (013) в квантующих магнитных полях и сопоставление положения линий поглощения с рассчитанными энергиями переходов между уровнями Ландау.

Научная новизна

Научная новизна работы заключается в следующем:

1. Межзонная терагерцевая фотопроводимость узко-зонных гетероструктур с квантовыми ямами на основе $Cd_xHg_{1-x}Te$ наблюдалась впервые.
2. Впервые проведены расчёты зонной структуры и уровней Ландау в квантовых ямах $Hg_{1-x}Cd_xTe / Cd_yHg_{1-y}Te$, выращенных на плоскости (013), с учётом встроенной деформации и эффектов, связанных с отсутствием центра инверсии в объёмном кристалле.
3. Впервые наблюдалось расщепление двух линий в спектрах магнитопоглощения гетероструктур $HgTe / Cd_yHg_{1-y}Te$ (013) с квантовыми ямами с инвертированной зонной структурой, обусловленное антипересечением нижнего уровня Ландау зоны проводимости и верхнего уровня Ландау валентной зоны.

4. В гетероструктуре с широкой квантовой ямой $\text{HgTe}/\text{Cd}_y\text{Hg}_{1-y}\text{Te}$ впервые одновременно наблюдался циклотронный резонанс электронов и дырок в квантующих магнитных полях.

Теоретическая и практическая значимость работы

Научная значимость работы заключается в получении нового знания о структуре энергетического спектра носителей в гетероструктурах с квантовыми ямами $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}/\text{Cd}_y\text{Hg}_{1-y}\text{Te}$, выращенных на атомной плоскости (013). Впервые проведены расчёты энергий и волновых функций состояний носителей заряда в гетероструктурах $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}/\text{Cd}_y\text{Hg}_{1-y}\text{Te}$ (013) с квантовыми ямами в магнитном поле и без него с учётом встроенной деформации. Проведена корректировка общепринятого набора материальных параметров гетероструктуры HgTe/CdTe , что позволило достичь лучшего согласования результатов расчётов с экспериментальными данными. Обнаружена межзонная терагерцевая проводимость в квантовых ямах $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}/\text{Cd}_y\text{Hg}_{1-y}\text{Te}$ (013) как при температуре жидкого гелия, так и при температуре жидкого азота, что может быть использовано для создания приёмников терагерцевого излучения. Показана возможность генерации излучения на межзонных переходах в узкозонных квантовых ямах $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}/\text{Cd}_y\text{Hg}_{1-y}\text{Te}$ (013) при оптической накачке.

Полученные в диссертации результаты могут быть использованы при создании новых оптоэлектронных приборов терагерцевого диапазона на основе гетероструктур с квантовыми ямами $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}/\text{Cd}_y\text{Hg}_{1-y}\text{Te}$ (013).

Методология и методы исследования

Для решения поставленных задач были применены следующие теоретические и экспериментальные методы и подходы:

- численное решение стационарного уравнения Шредингера с эффективным гамильтонианом 8×8 (явный учёт зон Γ_6 , Γ_8 , и Γ_7) в рамках метода огибающих функций;
- учет влияния магнитного поля с помощью подстановки Пайерлса и поправки Земана;
- метод теории возмущений для учета поправок в гамильтониан, связанных с отсутствием центра инверсии в объемном кристалле;

- метод фотоэлектрической спектроскопии;
- метод абсорбционной спектроскопии в терагерцовом диапазоне.

Основные положения, выносимые на защиту

1. Расчёт зонной структуры квантовых ям HgCdTe/CdHgTe (013) в рамках приближения огибающих функций в четырёхзонной модели для достижения количественного согласования с экспериментом требует корректировки значений параметров материалов, используемых в литературе: разрыва валентной зоны на гетеропереходе между CdTe и HgTe и параметра, отвечающего за взаимодействие зон Γ_6 и Γ_8 (E_p).
2. Обнаружена фотопроводимость гетероструктур с квантовыми ямами HgCdTe/CdHgTe (013) в терагерцовом диапазоне, обусловленная межзонным поглощением и переходами с участием примесей и дефектов.
3. В квантовых ямах HgTe/CdHgTe с инвертированной зонной структурой имеет место антипересечение нижнего уровня Ландау зоны проводимости и верхнего уровня Ландау валентной зоны, обусловленное отсутствием центра инверсии в кристаллической решётке HgTe.
4. В квантовых ямах HgTe/Cd_{0,7}Hg_{0,3}Te (013) шириной больше 12,5 нм, выращенных на буферном слое CdTe, имеет место перекрытие зоны проводимости с боковым максимумом валентной зоны, что может приводить к образованию полуметаллического состояния (существование электронов и дырок в равновесии).
5. В квантовых ямах HgTe/Cd_{0,7}Hg_{0,3}Te (013) с нормальной зонной структурой при межзонной оптической генерации неравновесных носителей до концентраций $\sim 10^{11}$ см⁻² усиление электромагнитного излучения на межзонных переходах многократно превышает внутризонное (друдевское) поглощение при $\hbar\omega \geq 20$ мэВ.

Степень достоверности и апробация результатов исследования

Достоверность результатов обеспечена оптимальным выбором физических моделей, учитывающих основные свойства исследуемых систем и адекватным выбором методов численных расчетов. Экспериментальные исследования выполнены априорианными в ИФМ РАН и других научных организациях методами.

Основные результаты диссертации докладывались и обсуждались на XV, XVI и XVII Международных симпозиумах «Нанофизика и наноэлектроника» (Нижний Новгород 2011, 2012, 2013); 12 Всероссийской молодежной конференции по физике полупроводников и полупроводниковой опто- и наноэлектронике (Санкт-Петербург 2010); Международном форуме по нанотехнологиям «Rusnanotech'10» (Москва 2010); 4 Всероссийской конференции молодых ученых «Микро- и нанотехнологии и их применение» (Черноголовка 2010); VIII и IX Всероссийских семинарах по радиофизике миллиметровых и субмиллиметровых волн (Нижний Новгород 2011, 2013); Российской конференции и школе по актуальным проблемам полупроводниковой нанофотоэлектроники «Фотоника-2011» (Новосибирск 2011); X и XI Российских конференциях по физике полупроводников (Нижний Новгород 2011, Санкт-Петербург 2013); Международной научно-технической конференции, школе молодых специалистов и выставке по фотоэлектронике и приборам ночного видения (Москва 2012); Международной конференции «Terahertz and Microwave radiation: Generation, Detection and Applications» (Москва 2012); Международной конференции «GDR-I Workshop» (Tignes, France 2012; Cargese, France 2013); Международной конференции «38th International Conference on Infrared, Millimeter and Terahertz Waves» (Mainz, Germany 2013); Международной конференции «Int. Conf. on Coherent and Nonlinear Optics/lasers, Applications, and technologies» (Москва 2013); 21 Международном симпозиуме «Nanostructures: Physics and Technology» (Санкт-Петербург 2013); а также на семинарах ИФМ РАН.

По теме диссертации опубликованы 41 печатная работа, в том числе 9 статей в реферируемых журналах и 32 публикации в сборниках тезисов докладов и трудов конференций, симпозиумов и совещаний.

Все вышеперечисленное в совокупности свидетельствует о достоверности полученных результатов и сделанных на их основании выводов.

Глава 1

Обзор литературы

1.1 Приближение огибающих функций для расчёта электронных спектров гетероструктур

Для приближённого вычисления энергетического спектра электрона в однородном полупроводнике используется $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ -метод, в рамках которого волновая функция представляется в следующем виде:

$$\Psi = \sum_n e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} C_n(\mathbf{k}) u_n(\mathbf{r}).$$

где $\{u_n\}$ — конечный набор базисных функций (которые являются периодическими), \mathbf{k} — вектор, принадлежащий первой зоне Бриллюэна, а C_n — неизвестные коэффициенты. Энергия состояния $E(\mathbf{k})$ и коэффициенты C_n , которые являются компонентами вектора \mathbf{C} , вычисляются как решения стационарного уравнения Шрёдингера:

$$\mathbf{H}(\mathbf{k})\mathbf{C} = E\mathbf{C},$$

где \mathbf{H} — матрица гамильтониана. Таким образом, в однородном полупроводнике волновой функцией электрона является набор плоских волн $C_n e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}$, умноженных на базисные функции u_n .

Если однородность нарушена присутствием внешнего поля, то вместо плоских волн решениями будут некоторые функции F_n :

$$\Psi = \sum_n F_n(\mathbf{r}) u_n(\mathbf{r}),$$

а в уравнении Шрёдингера гамильтониан будет матрицей операторов:

$$\hat{\mathbf{H}}\mathbf{F} = E\mathbf{F}, \quad (1.1)$$

где

$$\mathbf{F} = \begin{pmatrix} F_1 \\ \vdots \\ F_{n_{\max}} \end{pmatrix}$$

Такой подход был впервые использован в работе [19] для описания полупроводников, находящихся во внешнем электрическом и магнитном поле.

В гетероструктурах как и в случае внешнего поля периодичность нарушается и плоская волна больше не является решением, то есть нужно пользоваться разложением (1.1). Однако, в отличие от плавного внешнего поля, в гетероструктурах есть дополнительные трудности. Первая из них состоит в том, что потенциал быстро меняется на границе и к нему не может применяться подход, изложенный в работе [19], так как эти изменения не являются плавными. Вторая трудность — зависимость параметров материала от координаты — проявляет себя при попытках использовать для описания структур гамильтониан однородного полупроводника с заменой вектора квазимпульса на дифференциальный оператор. В отличие от случая плавного потенциала этот оператор действует не только на огибающие, но и на параметры, из-за чего полученный таким способом гамильтониан как правило не является эрмитовым. Выбор же эрмитового гамильтониана аналогичного объёмному неоднозначен.

Мы не будем рассматривать модели, основанные на учёте взаимодействия отдельных атомов (например методе сильной связи) и ограничимся методом огибающих функций. Здесь существует два основных подхода.

1.2 Кусочное решение

В рамках первого подхода решения в каждом слое гетероструктуры считаются линейными комбинациями решений для объёмного полупроводника. Затем эти решения в разных слоях сшиваются с помощью граничных условий, которые отличаются в разных моделях.

Иногда в качестве граничных условий выбираются бесконечные стенки, т.е. решение считается локализованным в одном слое [20; 21]. В случае слабой локализации необходимо учитывать влияние материала барьеров. Если бы материалы, составляю-

щие гетероструктуру, отличались лишь энергией на дне зоны, то задача свелась бы к отысканию состояний электрона в заданном потенциале [22]. В этом случае состояние электрона вычисляется исходя из условия непрерывности огибающей его волновой функции и её первой производной. Такое граничное условие иногда используется при расчётах состояний электрона в зоне проводимости гетероструктур, состоящих из широкозонных материалов [23].

Для узкозонного материала такая модель не подходит [24]. Это связано с тем, что близкие по энергии зоны взаимодействуют и граничные условия должны это учитывать. Нужно требовать непрерывность полной волновой функции, а не огибающей, т.е. учитывать отличия блоховских функций разных материалов, а так же их изменение на границе. Ни то ни другое не известно, а получение необходимых данных из эксперимента осложняется большим количеством параметров. Поэтому в многозонных моделях граничные условия, если они требуются в явном виде, получаются из эффективного гамильтониана (см. ниже).

1.3 Эффективный гамильтониан

Второй подход основан на решении уравнения (1.1) с эффективным гамильтонианом, который был бы определён во всей гетероструктуре включая границы слоёв. При этом постоянная решётки для всех материалов, составляющих гетероструктуру, считается одинаковой. В качестве базиса полного ортонормированного базиса в пространстве всех функций, период которых совпадает с периодом кристаллической решётки в гетероструктуре, выбирается некоторая система функций $u_n(\mathbf{r})$. Они могут совпадать с блоховскими функциями какого-либо полупроводника, а могут и не совпадать.

Как уже отмечалось выше, эффективный гамильтониан не может быть получен из матрицы \mathbf{H} простой заменой $\mathbf{k} \rightarrow \hat{\mathbf{k}} = -i\nabla$. Существует бесконечное множество вариантов, которые дают одинаковые результаты для однородного полупроводника, но в гетероструктурах приводят к разным граничным условиям для огибающих [16; 25]. Вопрос о наилучших граничных условиях (наилучшей форме эффективного гамильтониана) является предметом постоянных дискуссий [16; 25—29] и, по-видимому, не имеет универсального решения.

В работе [16] было впервые предложено постулировать непрерывность огибающих и их первых производных во всей гетероструктуре (включая гетерограницы) и вывести эффективный гамильтониан, который бы удовлетворял этому условию. Получен-

ные в результате уравнения для огибающих оказались довольно сложными и неудобными для расчётов и были упрощены. Точные решения упрощенных уравнений имеют разрывы первой производной на границах слоёв структуры и потому не удовлетворяют условию плавности огибающих. Для того, чтобы разрешить это противоречие, в работе [16] уравнения решались приближённо путём разложения огибающих по ограниченному набору плоских волн.

В ряде работ [26; 29–31] было показано, что некоторые из поправок, отброшенных при упрощении уравнений в работе [16], имеют тот же порядок по волновому вектору \mathbf{k} что и члены, вошедшие в окончательные уравнения. Модели, которые учитывают эти поправки, являются более точными, однако круг их применения ограничен из-за большого числа подгоночных параметров.

Чаще всего используется гамильтониан, который получается из матрицы \mathbf{H} путём следующей замены [15; 32; 33]:

$$\begin{aligned} Ak_\alpha &\rightarrow \hat{k}_\alpha A_1(\mathbf{r}) + A_2(\mathbf{r})\hat{k}_\alpha; \\ Bk_\alpha k_\beta &\rightarrow \hat{k}_\alpha B_1(\mathbf{r})k_\beta + \hat{k}_\beta B_2(\mathbf{r})\hat{k}_\alpha. \end{aligned}$$

Кажется, что количество параметров здесь очень велико — вдвое больше чем для объёма, однако не все они существенны. В частности, в гамильтониане 8×8 , основанном на модели Кейна, для большинства полупроводников достаточно всего одного дополнительного параметра [34; 35]. Модель, используемая в работах [34; 35], называют моделью Бёрта—Форемана. Она является одной из наиболее популярных, так как имеет наименьшее число подгоночных параметров при достаточно хорошей точности.

1.4 Методы решения уравнения Шрёдингера

Решение системы уравнения (1.1) для многокомпонентной волновой функции — непростая задача. Было показано [36; 37] что если гамильтониан содержит как валентную зону так и зону проводимости, то секулярное уравнение для $k(E)$ имеет решения, представляющие собой мнимые векторы \mathbf{k} с большим модулем. Они также появляются в случае однозонного гамильтониана, если он содержит поправки выше второй степени k . Такие решения не рассматриваются при расчёте энергетического спектра объёмных полупроводников, однако в гетероструктурах их приходится учитывать чтобы получить огибающие, удовлетворяющие граничным условиям. Из-за этого уравнение (1.1) является неустойчивым при его численном интегрировании, например, мето-

дом трансфер-матрицы [38]. Мнимые корни секулярного уравнения проявляют себя в виде экспонент растущих настолько быстро, что для выделения правильного решения на их фоне не хватает точности.

Проблема устойчивости метода трансфер-матрицы обсуждается в работе [39], где предлагается альтернативный подход — метод матрицы рассеяния. В отличие от трансфер-матрицы, которая связывает амплитуды волн на разных концах слоя, матрица рассеяния связывает амплитуды входящих и выходящих волн, при этом направлением распространения волны с мнимым волновым числом считается направление затухания. Такой подход не даёт неустойчивостям развиваться и его единственным недостатком является большая сложность вычислений для многослойных гетероструктур.

Методы трансфер-матрицы и матрицы рассеяния хорошо подходят для описания делокализованных электронов, например, в задачах туннелирования. Для носителей, локализованных в квантовой яме, энергия состояния E принимает дискретный набор значений, которые приходится вычислять методом стрельбы или вариационными методами [40–43]. Только для этих значений энергии удается получить огибающую, удовлетворяющую граничным условиям.

Для вычисления дискретного спектра квантовых ям используется разложение по ортонормированному базису [9; 16; 44]. При разложении вместо матрицы дифференциальных операторов \hat{H} мы получаем матрицу \tilde{H} большей размерности, состоящую из чисел. Энергии и волновые функции состояний электрона в квантовой яме вычисляются как собственные значения и собственные векторы этой матрицы.

В качестве базисных функций чаще всего используются плоские волны [44], т.к. для них очень легко записать матричные элементы дифференциальных операторов. Проблема неустойчивых решений здесь отсутствует, так как волны с мнимыми или слишком большими волновыми числами просто не включаются в базис. Кроме того, огибающие, полученные таким способом, всегда являются плавными функциями с непрерывной первой производной, т.е. удовлетворяют условиям приближения Бёрта [16].

1.5 Структуры выращенные на различных атомных плоскостях

В обсуждаемых нами моделях с эффективным гамильтонианом нет ограничений на форму неоднородностей в кристалле, т.е. слои гетероструктуры могут располагаться под любым углом к координатным осям. Тем не менее, решение уравнения (1.1) для

слоистых гетероструктур существенно упрощается, если считать, что параметры материала зависят только от одной координаты, например z . В этом случае из всех компонент квазиимпульса только \hat{k}_z является дифференциальным оператором.

Если гетероструктура выращена на атомной плоскости отличной от (001), то при переходе в нужную систему координат вид гамильтониана меняется. Вопрос преобразования гамильтониана подробно освещается в работе [17]. Там же указан общий способ вычисления тензора деформации, который для низкосимметричных направлений не является диагональным.

Авторы работы [17] рассматривают гамильтониан, основанный на модели Кейна [45] и имеющий размерность 8×8 . Поворот осуществляется в два этапа. Сначала преобразуются базисные функции u_m так что матрица $\hat{\mathbf{H}}$ меняется в то время как её элементы всё ещё выражены через квазиимпульс \mathbf{k} в исходной системе координат. Затем элементы матрицы $\hat{\mathbf{H}}$ переписываются с учётом закона преобразования оператора квазиимпульса:

$$\hat{\mathbf{k}}' = \mathbf{R}\hat{\mathbf{k}},$$

где \mathbf{R} — матрица поворота радиус-вектора при переходе к новой системе координат:

$$\mathbf{r}' = \mathbf{R}\mathbf{r}.$$

Во всех известных нам работах, где речь идёт о симметрии гамильтониана (например, об аксиальной симметрии) и законе его преобразования при поворотах системы координат, явно или неявно предполагается, что базис $\{u_m\}$ состоит из базисных функций представлений всей группы трёхмерных вращений, а не только группы точечной симметрии кристалла. Поэтому базисные функции после поворота $\{u'_m\}$ будут линейными комбинациями исходных $\{u_m\}$.

В работе [17] поворот осуществляется в базисе из четырёх функций S, X, Y и Z , не зависящих от спина (см. также [45]). При этом закон преобразования базиса выглядит достаточно просто:

$$S' = S;$$

$$\begin{pmatrix} X' \\ Y' \\ Z' \end{pmatrix} = \mathbf{R} \begin{pmatrix} X \\ Y \\ Z \end{pmatrix}.$$

Затем на основе преобразованного гамильтониана 4×4 записывается гамильтони-

ан 8×8 .

Таким образом, преобразование не затрагивает спин электрона. В данном случае это оправдано, поскольку спин электрона и спин-орбитальное взаимодействие учитывается с помощью всего одного параметра Δ [45; 46]. В общем случае должно использоваться непосредственное преобразование базисных функций, включающих спиновую компоненту. Такой подход также полезен для гамильтониана 6×6 (учитывающего только зоны Γ_6 и Γ_8) который не может быть непосредственно преобразован в гамильтониан 4×4 (см. [47]).

1.6 Энергетический спектр электронов в гетероструктурах на основе HgCdTe

Материал HgTe является бесщелевым полупроводником вследствие того, что в нем зона проводимости и валентная зона принадлежат одному неприводимому представлению группы симметрии кристалла. Эта особенность объясняется инвертированной зонной структурой [48; 49], т.е. обратным расположением энергетических зон по отношению к «нормальным» полупроводникам, к которым относится CdTe (рис. 1.1).

В «нормальных» полупроводниках зона проводимости в окрестности минимума

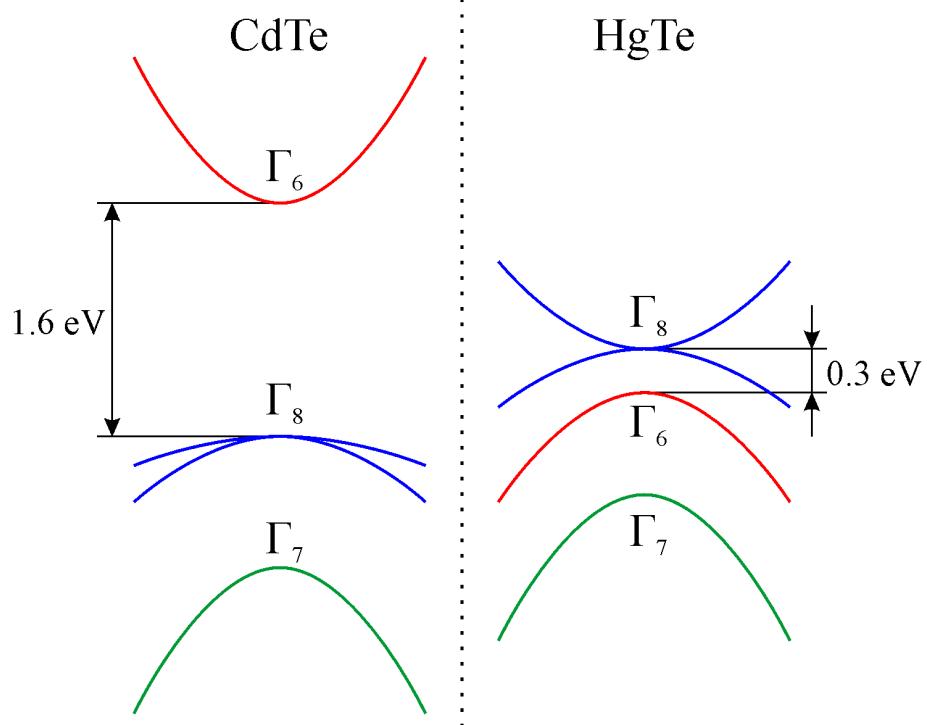


Рис. 1.1: Зонная структура CdTe и HgTe.

описывается волновыми функциями s-симметрии (неприводимое представление Γ_6), а валентная зона вблизи ее вершины — функциями p-симметрии. Зона проводимости двукратно вырождена по спину, а полный момент J для ее состояний равен 1/2. Валентная зона вследствие спин-орбитального взаимодействия расщеплена на две подзоны, образованные состояниями с $J = 3/2$ (представление Γ_8) и $J = 1/2$ (представление Γ_7). Волновые функции, принадлежащие представлению Γ_8 , образуют двукратно вырожденные зоны легких и тяжелых дырок. В Γ -точке эти зоны совпадают, и вершина валентной зоны оказывается четырехкратно вырожденной. Волновые функции, принадлежащие представлению Γ_7 , образуют зону спин-отщепленных дырок.

При инвертированной зонной структуре, реализующейся в HgTe, зона, образованная волновыми функциями представления Γ_8 , расположена выше зоны, образованной функциями представления Γ_6 . При этом одна из зон симметрии Γ_8 имеет положительную кривизну и является зоной проводимости, а другая имеет отрицательную кривизну и является валентной зоной. Зона симметрии Γ_6 обладает отрицательной кривизной. Иногда говорят, что этот материал обладает отрицательной шириной запрещенной зоны, под которой при этом понимается величина $E_g = E(\Gamma_6) - E(\Gamma_8)$. В твердом растворе $Cd_xHg_{1-x}Te$ при увеличении концентрации кадмия зонная структура меняется с инвертированной на неинвертированную.

В квантовых ямах HgTe/CdTe можно управлять зонной структурой, регулируя ширину ямы [1; 2]. В узких ямах волновые функции электрона глубоко проникают в барьер и формируются под сильным влиянием широкозонного CdTe. Вследствие этого, уровни с преобладающей s-симметрией (электроноподобные) имеют большую энергию, чем уровни с преобладающей p-симметрией (дырочноподобные), что характерно для объемного CdTe. В широких ямах волновые функции слабо проникают в барьер и состояния электрона формируются в основном под влиянием HgTe. Зонная структура таких ям является инвертированной, т.к. некоторые из электроноподобных уровней оказываются ниже чем дырочноподобные.

Объёмные твёрдые растворы $Cd_xHg_{1-x}Te$ широко применяется для создания приемников и приемных матриц среднего инфракрасного диапазона (см., например, работу [6] и ссылки в ней). Продвижение в дальний инфракрасный и терагерцовий диапазоны затруднено из-за флюктуаций состава твёрдого раствора, которые размывают края зон и могут привести к их перекрытию, что существенно снижает чувствительность приборов.

В качестве нового материала для оптических приборов, работающих в ИК диа-

пазоне были предложены сверхрешётки HgTe/CdTe [5]. Предполагалось, что в таких структурах ширина запрещённой зоны будет регулироваться за счёт толщины слоёв так что использование узкозонных твёрдых растворов не потребуется и проблема флюктуаций будет снята. Широкий спектр потенциальных приложений и значительные успехи в технологии производства тонких слоёв $\text{Cd}_x\text{Hg}_{1-x}\text{Te}$ методом молекулярно-лучевой эпитаксии стимулировали большое количество теоретических и экспериментальных исследований структур на их основе.

Особый интерес в последнее время вызывают квантовые ямы с инвертированной зонной структурой, которые являются двумерными топологическими изоляторами [1; 2], то есть в них имеются состояния с нулевой запрещённой зоной, локализованные на краях образца, в которых спин электрона определяется направлением движения. В таких образцах энергия одного из уровней Ландау в зоне проводимости убывает с ростом магнитного поля, а в валентной зоне есть уровень, энергия которого, напротив, растёт. При увеличении магнитного поля эти уровни пересекаются, так что зонная структура образца переходит от инвертированной к нормальной. Это пересечение было обнаружено с помощью магнитооптических измерений [3; 4], причём, по-видимому, в некоторых образцах эти два уровня взаимодействуют и для них имеет место антипереесечение [50].

В квантовых ямах с инвертированной зонной структурой в зоне проводимости преобладают блоховские функции p -симметрии, которые обладают большим собственным моментом чем функции s -симметрии. Это приводит к усилению спин-орбитального взаимодействия в этой зоне, что выражается в гигантском (до 30 мэВ) спиновом расщеплении Рашбы, которое проявляется в виде биений осцилляций Шубникова—де-Гааза и расщеплении линий циклотронного резонанса [7; 8].

В широких квантовых ямах $\text{HgTe}/\text{Cd}_y\text{Hg}_{1-y}\text{Te}$ дно зоны проводимости оказывается ниже бокового максимума валентной зоны, в результате чего в образце могут одновременно в равновесии существовать двумерные электронный и дырочный газы. Существование такой системы, называемой *двумерным полуметаллом*, было подтверждено экспериментально в ходе транспортных измерений [13; 14].

Для теоретического описания гетероструктур на основе КРТ в основном используется приближение огибающих функций. Иногда используются гамильтонианы 6х6 без спин-отщеплённой зоны [4; 15; 47; 51]. Спин-отщеплённая зона (Γ_7) расположена далеко, поэтому её явный учёт в четырёхзонной модели (модели Кейна) не приводит к качественно новым результатам. Тем не менее, в узкозонных и бесщелевых образцах

даже малые возмущения могут оказывать заметное влияние на ширину запрещённой зоны и закон дисперсии электронов, поэтому зона Γ_7 учитывается явно в большинстве работ [3; 7–9; 38; 52–55].

В ранних работах [15; 38] огибающие функции вычислялись путём кусочного решения в однородных слоях и последующего сшивания в соответствии с граничными условиями. В последнее время для вычисления дискретного спектра в квантовых ямах используется разложение по ортонормированному базису [4; 9].

Для описания гетероструктур выращенных на атомных плоскостях отличных от (001) проводится преобразование гамильтониана согласно [17] (см., например, [47]). Энергия уровней Ландау вычисляется при помощи подстановки Пайерлса, причём точность аксиального приближения в большинстве случаев оказывается достаточной [9]. Для описания встроенной деформации используются слагаемые первого порядка по тензору деформации ε (см. [9]). Пьезоэлектрические эффекты, по последним данным, пренебрежимо малы даже для низкосимметричных направлений [9; 53; 56] и как правило не учитываются.

В гетероструктурах следует уделить особое внимание параметру Кейна P , связывающему зоны Γ_6 и Γ_8 . Его значение различно для разных материалов и в эффективном гамильтониане гетероструктуры он должен зависеть от координаты, чтобы модель работала и в предельном случае однородного полупроводника. Однако, согласно своему определению, параметр P зависит только от базисных функций [45] и потому в моделях, основанных на приближении Бёрта [16], должен быть константой.

Таким образом, выбор определённого значения параметра P соответствует выбору определённого базиса. Если значение, используемое при расчёте гетероструктуры, отличается от объёмного полупроводника, то базисные функции также отличаются от его блоховских функций. В данном случае значения всех параметров должны быть пересмотрены для того, чтобы минимизировать ошибку при расчётах спектра однородного полупроводника.

В дополнение к объёмным параметрам слоёв в гетероструктурах появляется ещё одна величина — разрыв между валентными зонами HgTe и CdTe в Γ -точке (valence band offset, VBO). Первые расчёты зонной структуры квантовых ям на основе CdHgTe выполнялись в предположении что она равна нулю [15]. Последующее сопоставление с экспериментальными данными давало противоречивые результаты от 40 до 800 мэВ [4; 51–53; 57–60]. В работе [53] было получено значение 570 ± 60 мэВ для структур, выращенных как на плоскости (001), так и на низкосимметричной плоскости (112)B. В по-

следнее время используется именно это значение [7; 9; 54; 56], однако указанная погрешность является слишком высокой для количественного описания узкозонных и бесщелевых образцов, так что вопрос о значении VBO следует считать открытым.

Глава 2

Расчёт энергетического спектра носителей в квантовой яме $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}/\text{Cd}_y\text{Hg}_{1-y}\text{Te}$, выращенной на атомной плоскости (013)

Эта глава посвящена расчёту зонной структуры и уровней Ландау в квантовых ямах $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}/\text{Cd}_y\text{Hg}_{1-y}\text{Te}$ в рамках приближения огибающих функций с помощью эффективного гамильтониана. Мы сосредоточимся на гетероструктурах, выращенных на атомной плоскости (013), поскольку экспериментальные данные, для интерпретации которых будет использован разработанный здесь метод расчёта, были получены на образцах именно этого типа.

Для описания гетероструктур, выращенных на плоскости (013) с помощью гамильтониана 8×8 проводится обобщение метода, применяемого в работе [17] к гамильтониану 4×4 и работе [47] к гамильтониану 6×6 . Кроме того, для учёта встроенных напряжений, разрабатывается общая процедура вычисления тензора деформации для гетероструктуры, выращенной на произвольной атомной плоскости.

Во второй части главы разработанная процедура поворота применяется для получения гамильтониана, используемого при дальнейших расчётах, и приводится его явное выражение. Далее приводится описание процедуры вычисления волновых функций и энергий состояний электрона как в отсутствие магнитного поля так и в квантующих магнитных полях.

Заключительная часть содержит примеры расчётов зонной структуры и уровней Ландау в квантовых ямах $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}/\text{Cd}_y\text{Hg}_{1-y}\text{Te}$ (013), которые демонстрируют основные особенности энергетического спектра электронов в гетероструктурах на основе данных материалов.

2.1 Гамильтониан гетероструктуры в произвольной системе координат

2.1.1 Метод инвариантов

В максимально общей форме, подходящей для гетероструктуры, выращенных на любой атомной плоскости, гамильтониан, учитывающий члены до второй степени k включительно, имеет следующий вид:

$$\hat{H}_{nn'} = \hat{\mathbf{q}}^\dagger [\mathbf{G}_{nn'}(\mathbf{r})] \hat{\mathbf{q}}, \quad (2.1)$$

где

$$\hat{\mathbf{q}} = \begin{pmatrix} 1 \\ \hat{k}_x \\ \hat{k}_y \\ \hat{k}_z \end{pmatrix}, \quad (2.2)$$

а символом † обозначен эрмитово сопряжённый оператор.

Такой гамильтониан содержит очень большое число параметров, однако, если учитывать симметрию кристаллической решётки, количество независимых параметров окажется существенно меньше. В однородном полупроводнике энергия и волновая функция электрона не должна меняться ни при каких преобразованиях системы координат, которые переводят решётку кристалла саму в себя. Гамильтониан объёмного полупроводника, удовлетворяющий этим требованиям, можно получить с помощью метода инвариантов. Суть метода состоит в том, что гамильтониан представляется в виде линейной комбинации всех независимых операторов, которые не меняются при преобразованиях, не изменяющих исследуемую систему. Эти операторы называются *инвариантами*. Их набор ограничивается определёнными требованиями к их виду, например, рассматриваются только комбинации компонент квазипульса \mathbf{k} до второй степени включительно.

Для того, чтобы получить выражения для инвариантов, нужно рассмотреть повороты системы координат, которые не меняют кристаллическую решётку (т.е. не меняют координаты её узлов). При этом в многозонных моделях часто можно выделить группы функций, которые при поворотах преобразуются независимо друг от друга, в результате чего гамильтониан распадается на независимые блоки. Каждый инвариант ограничен одним таким блоком, расположенным на главной диагонали, или двумя симмет-

рично расположеными блоками, связанными требованием эрмитовости. В качестве примера можно привести четырёхзонную модель (модель Кейна), в которой имеется три независимых группы базисных функций, а в гамильтониане — шесть независимых блоков.

Метод инвариантов подробно описан в литературе [18; 61; 62]. Здесь мы приведём только результат — общий вид блока гамильтониана с учётом деформации:

$$\mathbf{H}^{(ab)} = \sum_c \gamma^{(ab; c)} \left\{ \sum_j \mathbf{U}_j^{(ab; c)} \left(\mathbf{q}^T \mathbf{Q}_j^{(c)} \mathbf{q} \right) \right\} + \\ + \sum_c \xi^{(ab; c)} \left\{ \sum_j \mathbf{U}_j^{(ab; c)} \left(\mathbf{K}_j^{(c)} * \boldsymbol{\varepsilon} \right) \right\}. \quad (2.3)$$

Здесь индексами a и b обозначаются независимые группы базисных функций $\left(\{u_n^{(a)}\} \text{ и } \{u_n^{(b)}\} \right)$, а пара таких индексов соответствует одному блоку гамильтониана. Индекс c нумерует разные инварианты, которые выделены фигурными скобками. Инварианты одинаковы для всех полупроводников с одинаковой структурой кристаллической решётки так как полностью определяются её симметрией. Разные материалы различаются значениями параметров $\gamma^{(ab; c)}$ и $\xi^{(ab; c)}$. Здесь и далее символом T обозначается транспонированный вектор или матрица.

Каждый инвариант состоит из матриц $\mathbf{U}_j^{(ab; c)}$, описывающих преобразование функции из пространства с базисом $\{u_n^{(b)}\}$ в функцию в пространстве с базисом $\{u_n^{(b)}\}$, и операторов, зависящих от квазимпульса k (задаваемых матрицей $\mathbf{Q}_j^{(c)}$) или тензора деформации $\boldsymbol{\varepsilon}$ (задаваемых матрицей $\mathbf{K}_j^{(c)}$). Не смотря на то, что каждая компонента меняется при рассматриваемом преобразовании, их комбинация в фигурных скобках остаётся неизменной.

Явные выражения для $\mathbf{U}_j^{(ab; c)}$, $\mathbf{Q}_j^{(c)}$ и $\mathbf{K}_j^{(c)}$ для полупроводников с тетраэдрической симметрией можно найти в приложениях А и Б а также в книгах [18; 62]. Выражения для других кристаллов могут быть получены на основе свойств их группы точечной симметрии (см., например, [63]) методами теории групп [18; 62].

Эффективный гамильтониан гетероструктуры получается из (2.3) путём замены:

$$\begin{aligned}\mathbf{k} &\rightarrow \hat{\mathbf{k}}; \\ \boldsymbol{\varepsilon} &\rightarrow \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{r}); \\ \gamma^{(ab;c)} &\rightarrow \gamma^{(ab;c)}(\mathbf{r}); \\ \xi^{(ab;c)} &\rightarrow \xi^{(ab;c)}(\mathbf{r}).\end{aligned}$$

Общий вид блоков эффективного гамильтониана гетероструктуры следующий:

$$\begin{aligned}\hat{\mathbf{H}}^{(ab)} = \sum_c \sum_j \mathbf{U}_j^{(ab;c)} &\left(\hat{\mathbf{q}}^T \left[\gamma^{(ab;c)}(\mathbf{r}) \mathbf{Q}_j^{(c)} \right] \hat{\mathbf{q}} \right) + \\ &+ \sum_c \xi^{(ab;c)}(\mathbf{r}) \sum_j \mathbf{U}_j^{(ab;c)} \left(\mathbf{K}_j^{(c)} * \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{r}) \right).\end{aligned}\quad (2.4)$$

Форма (2.4) сложнее чем (2.1), однако она более удобна для преобразования поворота. Действительно, элементы матрицы $\mathbf{G}_{nn'}$ в формуле (2.1) зависят от параметров материала. В то же время, в формуле (2.4) величины $\mathbf{U}_j^{(ab;c)}$, $\mathbf{Q}_j^{(c)}$ и $\mathbf{K}_j^{(c)}$, зависящие от направления координатных осей, являются просто матрицами чисел. Таким образом, гамильтониан для произвольного направления координатных осей может быть получен численно.

2.1.2 Преобразование гамильтониана при повороте

Рассмотрим преобразование системы координат, при котором радиус-вектор точки меняется по следующему закону:

$$\mathbf{r}' = \mathbf{R}\mathbf{r}, \quad (2.5)$$

где \mathbf{R} — ортогональная матрица. Наша задача — найти закон преобразования гамильтониана. Для этого достаточно рассмотреть однородный полупроводник (т.е. гамильтониан (2.3)), поскольку матрицы \mathbf{U} , \mathbf{Q} и \mathbf{K} в формулах (2.3) и (2.4) совпадают.

Рассмотрим отдельно одно слагаемое из первой суммы в формуле (2.3):

$$\mathbf{H}_k = \mathbf{U} (\mathbf{q}^T \mathbf{Q} \mathbf{q}). \quad (2.6)$$

Для того, чтобы получить вид этой матрицы после поворота (\mathbf{H}'_k) мы воспользуемся

тем, что матричные элементы операторов не зависят от системы координат.

Волновая функция в однородном полупроводнике задаётся следующим выражением:

$$\Psi = \sum_n C_n u_n = \mathbf{C}^T \mathbf{u}$$

где \mathbf{u} — вектор-столбец, состоящий из базисных функций, а \mathbf{C} — вектор-столбец, состоящий из коэффициентов перед этими функциями. Таким образом, волновая функция полностью определяется вектором \mathbf{C} и, следовательно, матричные элементы могут быть вычислены следующим образом:

$$\langle \Psi^{(1)} | \hat{H} | \Psi^{(2)} \rangle = \sum_{nn'} (C_n^{(1)})^* \langle u_n | \hat{H} | u_{n'} \rangle C_{n'}^{(2)} = (\mathbf{C}^{(1)})^\dagger \mathbf{H} \mathbf{C}^{(2)}$$

Любому преобразованию базисных функций u_n соответствует определённое преобразование коэффициентов C_n . Поскольку матрица гамильтониана описывает оператор, действующий в пространстве векторов \mathbf{C} , мы будем рассматривать преобразование \mathbf{C} :

$$\mathbf{C}' = \mathbf{R}_C \mathbf{C},$$

которое связано с преобразование базисных функций следующим соотношением:

$$\mathbf{R}_C = \mathbf{R}_u^*,$$

где матрица \mathbf{R}_u — матрица преобразования базисных функций:

$$\mathbf{u}' = \mathbf{R}_u \mathbf{u},$$

а символом * обозначается комплексное сопряжение.

Мы рассматриваем один блок гамильтониана, то есть оператор, связывающий компоненты волновой функции, которые раскладываются по разным частям базиса $\{u_n\}$:

$$\Psi_a = \mathbf{C}_a^T \mathbf{u}_a;$$

$$\Psi_b = \mathbf{C}_b^T \mathbf{u}_b.$$

Условие сохранения матричного элемента оператора, который задаётся матрицей (2.6),

выглядит следующим образом:

$$(\mathbf{C}'_a)^\dagger \mathbf{H}'_k(\mathbf{k}') \mathbf{C}'_b = \mathbf{C}_a^\dagger \mathbf{H}_k(\mathbf{k}) \mathbf{C}_b.$$

Подставив в данную формулу выражение (2.6) получаем

$$\left((\mathbf{C}'_a)^\dagger \mathbf{U}' \mathbf{C}'_b \right) \left((\mathbf{q}')^T \mathbf{Q}' \mathbf{q}' \right) = \left(\mathbf{C}_a^\dagger \mathbf{U} \mathbf{C}_b \right) \left(\mathbf{q}^T \mathbf{Q} \mathbf{q} \right).$$

Матрицы \mathbf{U} преобразуются вместе с базисными функциями, а матрицы \mathbf{Q} — с вектором квазимпульса, поэтому мы можем разделить эти два преобразования:

$$(\mathbf{C}'_a)^\dagger \mathbf{U}' \mathbf{C}'_b = \mathbf{C}_a^\dagger \mathbf{U} \mathbf{C}_b \quad (2.7)$$

$$(\mathbf{q}')^T \mathbf{Q}' \mathbf{q}' = \mathbf{q}^T \mathbf{Q} \mathbf{q} \quad (2.8)$$

Аналогичные рассуждения можно применить к любому слагаемому из второй суммы в формуле (2.3):

$$\mathbf{H}_\varepsilon = \mathbf{U} (\mathbf{K} * \boldsymbol{\varepsilon}).$$

В результате получается соответствующая формула для матрицы \mathbf{K} :

$$\mathbf{K}' \boldsymbol{\varepsilon}' = \mathbf{K} \boldsymbol{\varepsilon}$$

Тензор деформации $\boldsymbol{\varepsilon}$ преобразуется при поворотах так же как произведение $\mathbf{k}^T \mathbf{k}$, поэтому для матрицы \mathbf{K} справедливо следующее соотношение:

$$(\mathbf{k}')^T \mathbf{K}' \mathbf{k}' = \mathbf{k}^T \mathbf{K} \mathbf{k}. \quad (2.9)$$

Вектор квазимпульса при повороте системы координат, заданным формулой (2.5), преобразуется следующим образом:

$$\mathbf{k}' = \mathbf{R} \mathbf{k}, \quad (2.10)$$

$$\mathbf{q}' = \mathbf{R}_q \mathbf{q}, \quad (2.11)$$

где

$$\mathbf{R}_q = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & \mathbf{R} \end{pmatrix}.$$

Матрицу преобразования коэффициентов перед базисными функциями группы a обозначим $\mathbf{R}_C^{(a)}$:

$$\mathbf{C}'_a = \mathbf{R}_C^{(a)} \mathbf{C}_a. \quad (2.12)$$

Подставив формулы (2.12), (2.11) и (2.10) в выражения (2.7), (2.8) и (2.9) получаем

$$\begin{aligned} \mathbf{U}^{(ab)'} &= \mathbf{R}_C^{(a)} \mathbf{U}^{(ab)} \mathbf{R}_C^{(b)\dagger}; \\ \mathbf{Q}' &= \mathbf{R}_q \mathbf{Q} \mathbf{R}_q^T; \\ \mathbf{K}' &= \mathbf{R} \mathbf{K} \mathbf{R}^T. \end{aligned} \quad (2.13)$$

Пусть поворот системы координат задаётся с помощью углов Эйлера и состоит из трёх последовательных преобразований:

1. поворот вокруг оси z на угол α ;
2. поворот вокруг нового положения оси y на угол β ;
3. поворот вокруг нового положения оси z на угол γ .

Для такого поворота матрица преобразования радиус-вектора точки равна

$$\mathbf{R} = \begin{pmatrix} \cos \gamma & \sin \gamma & 0 \\ -\sin \gamma & \cos \gamma & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos \beta & 0 & -\sin \beta \\ 0 & 1 & 0 \\ \sin \beta & 0 & \cos \beta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos \alpha & \sin \alpha & 0 \\ -\sin \alpha & \cos \alpha & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

Третий поворот (на угол γ) здесь не обязательен, так как первые два уже расположат нужную атомную плоскость нормально к оси z , однако он необходим, если требуется расположить структуру под определённым углом к оси x . Это может быть важно при использовании моделей, которые учитывают дополнительные слагаемые связанные с понижением симметрии в плоскости квантовой ямы.

Строго говоря, при произвольном повороте разные группы блоховских функций уже не являются независимыми, однако этот факт, насколько нам известно, никогда не учитывается. Анализ смешивания волновых функций разных зон при произвольном повороте потребовал бы точного знания явного вида блоховских функций, либо использования большого числа подгоночных параметров. Поэтому при поворотах системы координат (а также при анализе симметрии гамильтониана, например, аксиальной) считается, что базисные функции являются собственными функциями полного угловово-

го момента. Тогда матрица поворота равна

$$\mathbf{R}_C^{(a)} = \exp(i\mathbf{J}_z^{(a)}\gamma) \cdot \exp(i\mathbf{J}_y^{(a)}\beta) \cdot \exp(i\mathbf{J}_z^{(a)}\alpha), \quad (2.14)$$

где $\mathbf{J}_{x,y,z}^{(a)}$ — матрицы проекций полного момента на координатные оси.

2.1.3 Вычисление тензора деформации

Закон преобразования тензора деформации (ε) при повороте известен

$$\varepsilon' = \mathbf{R}\varepsilon\mathbf{R}^T, \quad (2.15)$$

однако переход к другому направлению роста гетероструктуры это не просто изменение системы координат. Ориентация слоёв относительно кристаллической решётки будет разной в зависимости от того на какой атомной плоскости выращена структура.

Как правило структура выращена на толстой подложке либо буферном слое, которые практически не деформируются под действием напряжений, возникающих в тонких поверхностных слоях. В таком случае условие минимума энергии деформации означает, что постоянная решётки гетероструктуре в плоскости слоёв совпадает с такой для подложки (буфера). Таким образом, нам известны три компоненты тензора деформации в новой системе координат:

$$\begin{aligned} \varepsilon'_{xx} &= \varepsilon'_{yy} = \frac{a_0 - a}{a}; \\ \varepsilon'_{xy} &= 0; \end{aligned} \quad (2.16)$$

где a_0 — постоянная решётки подложки (буфера), a — постоянная решётки материала из которого состоит слой.

Поскольку тензор деформации симметричен по определению [64], остаётся найти всего три компоненты: ε'_{xz} , ε'_{yz} и ε'_{zz} . Это можно сделать используя закон Гука, который

связывает тензор деформации с тензором напряжений σ :

$$\begin{pmatrix} \sigma'_{xx} \\ \sigma'_{xy} \\ \sigma'_{yy} \\ \sigma'_{xz} \\ \sigma'_{yz} \\ \sigma'_{zz} \end{pmatrix} = \mathbf{C}' \begin{pmatrix} \varepsilon'_{xx} \\ \varepsilon'_{xy} \\ \varepsilon'_{yy} \\ \varepsilon'_{xz} \\ \varepsilon'_{yz} \\ \varepsilon'_{zz} \end{pmatrix}. \quad (2.17)$$

Три из шести компонент тензора напряжений известны из условия равновесия границ слоёв:

$$\begin{pmatrix} \sigma'_{xz} \\ \sigma'_{yz} \\ \sigma'_{zz} \end{pmatrix} = 0, \quad (2.18)$$

так что у нас есть система из шести уравнений (2.17) с шестью неизвестными (ε'_{xz} , ε'_{yz} , ε'_{zz} , σ'_{xx} , σ'_{xy} и σ'_{yy}).

Разделим матрицу модулей упругости \mathbf{C} на блоки размерности 3×3 :

$$\mathbf{C}' = \begin{pmatrix} \mathbf{C}'_{xy,xy} & \mathbf{C}'_{xy,z} \\ \mathbf{C}'_{z,xy} & \mathbf{C}'_{z,z} \end{pmatrix}.$$

Из трёх последних уравнений в системе (2.17) и условия (2.18) получаем выражения для искомых компонент тензора деформации:

$$\begin{pmatrix} \varepsilon'_{xz} \\ \varepsilon'_{yz} \\ \varepsilon'_{zz} \end{pmatrix} = (\mathbf{C}'_{z,z})^{-1} \mathbf{C}'_{z,xy} \begin{pmatrix} \varepsilon'_{xx} \\ \varepsilon'_{xy} \\ \varepsilon'_{yy} \end{pmatrix}. \quad (2.19)$$

Матрица модулей упругости в кристалле с решёткой типа цинковой обманки в

исходной системе координат выглядит следующим образом:

$$\mathbf{C} = \begin{pmatrix} C_{11} & 0 & C_{12} & 0 & 0 & C_{12} \\ 0 & 2C_{44} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ C_{12} & 0 & C_{11} & 0 & 0 & C_{12} \\ 0 & 0 & 0 & 2C_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 2C_{44} & 0 \\ C_{12} & 0 & C_{12} & 0 & 0 & C_{11} \end{pmatrix}. \quad (2.20)$$

Для того, чтобы записать матрицу \mathbf{C}' в новой системе координат нужно использовать уравнение (2.17) и закон преобразования тензоров $\boldsymbol{\varepsilon}$ и $\boldsymbol{\sigma}$ при поворотах. Тензор деформаций преобразуется согласно выражению (2.15), аналогичное соотношение справедливо и для тензора напряжений:

$$\boldsymbol{\sigma}' = \mathbf{R}\boldsymbol{\sigma}\mathbf{R}^T. \quad (2.21)$$

Для того, чтобы сделать дальнейшие выражения более компактными введём следующие шести- и девятикомпонентные векторы:

$$\boldsymbol{\varepsilon}_{(6)} = \begin{pmatrix} \varepsilon_{xx} \\ \varepsilon_{xy} \\ \varepsilon_{yy} \\ \varepsilon_{xz} \\ \varepsilon_{yz} \\ \varepsilon_{zz} \end{pmatrix}; \quad \boldsymbol{\sigma}_{(6)} = \begin{pmatrix} \sigma_{xx} \\ \sigma_{xy} \\ \sigma_{yy} \\ \sigma_{xz} \\ \sigma_{yz} \\ \sigma_{zz} \end{pmatrix}; \quad \boldsymbol{\varepsilon}_{(9)} = \begin{pmatrix} \varepsilon_{xx} \\ \varepsilon_{xy} \\ \varepsilon_{xz} \\ \varepsilon_{yy} \\ \varepsilon_{xy} \\ \varepsilon_{yy} \\ \varepsilon_{yz} \\ \varepsilon_{xz} \\ \varepsilon_{yz} \\ \varepsilon_{zz} \end{pmatrix}; \quad \boldsymbol{\sigma}_{(9)} = \begin{pmatrix} \sigma_{xx} \\ \sigma_{xy} \\ \sigma_{xz} \\ \sigma_{xy} \\ \sigma_{yy} \\ \sigma_{yz} \\ \sigma_{xz} \\ \sigma_{yz} \\ \sigma_{zz} \end{pmatrix}.$$

Эти векторы связаны друг с другом линейными соотношениями:

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\varepsilon}_{(6)} &= \mathbf{T}_{(9 \leftarrow 6)} \boldsymbol{\varepsilon}_{(9)} & \boldsymbol{\varepsilon}_{(9)} &= \mathbf{T}_{(6 \leftarrow 9)} \boldsymbol{\varepsilon}_{(6)}, \\ \boldsymbol{\sigma}_{(6)} &= \mathbf{T}_{(9 \leftarrow 6)} \boldsymbol{\sigma}_{(9)} & \boldsymbol{\sigma}_{(9)} &= \mathbf{T}_{(6 \leftarrow 9)} \boldsymbol{\sigma}_{(6)} \end{aligned},$$

где

$$\mathbf{T}_{(9 \leftarrow 6)} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix};$$

$$\mathbf{T}_{(6 \leftarrow 9)} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

Легко проверить, что матрицы $\mathbf{T}_{(9 \leftarrow 6)}$ и $\mathbf{T}_{(6 \leftarrow 9)}$ удовлетворяют следующему соотношению:

$$\mathbf{T}_{(9 \leftarrow 6)} \mathbf{T}_{(6 \leftarrow 9)} = \begin{pmatrix} 1 & & & & \\ & 1 & & & 0 \\ & & 1 & & \\ & & & 1 & \\ 0 & & & & 1 \\ & & & & & 1 \end{pmatrix}. \quad (2.22)$$

Для девятикомпонентных векторов, которые представляют собой не что иное как элементы соответствующих тензоров последовательно записанные в один столбец, выражения (2.15) и (2.21) выглядят следующим образом:

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\varepsilon}'_{(9)} &= (\mathbf{R} \otimes \mathbf{R}) \boldsymbol{\varepsilon}_{(9)}; \\ \boldsymbol{\sigma}'_{(9)} &= (\mathbf{R} \otimes \mathbf{R}) \boldsymbol{\sigma}_{(9)}; \end{aligned} \quad (2.23)$$

где символ « \otimes » обозначает прямое произведение матриц (см. приложение Г). Поскольку матрица \mathbf{R} является ортогональной, матрица $(\mathbf{R} \otimes \mathbf{R})$ тоже ортогональна.

Запишем закон Гука в исходной системе координат для шестикомпонентных векторов

$$\boldsymbol{\sigma}_{(6)} = \mathbf{C} \boldsymbol{\varepsilon}_{(6)},$$

перепишем это выражение, используя девятикомпонентные векторы

$$\mathbf{T}_{(6 \leftarrow 9)} \boldsymbol{\sigma}_{(9)} = \mathbf{C} \mathbf{T}_{(6 \leftarrow 9)} \boldsymbol{\varepsilon}_{(9)}$$

и, применив преобразования поворота (2.23), перейдём в новую систему координат:

$$\mathbf{T}_{(6 \leftarrow 9)} (\mathbf{R} \otimes \mathbf{R})^T \boldsymbol{\sigma}'_{(9)} = \mathbf{C} \mathbf{T}_{(6 \leftarrow 9)} (\mathbf{R} \otimes \mathbf{R})^T \boldsymbol{\varepsilon}'_{(9)}.$$

Теперь вернёмся к шестикомпонентным векторам:

$$\mathbf{T}_{(6 \leftarrow 9)} (\mathbf{R} \otimes \mathbf{R})^T \mathbf{T}_{(9 \leftarrow 6)} \boldsymbol{\sigma}'_{(6)} = \mathbf{C} \mathbf{T}_{(6 \leftarrow 9)} (\mathbf{R} \otimes \mathbf{R})^T \mathbf{T}_{(9 \leftarrow 6)} \boldsymbol{\varepsilon}'_{(6)}.$$

и домножим слева обе части выражения на матрицу $\mathbf{T}_{(6 \leftarrow 9)} (\mathbf{R} \otimes \mathbf{R}) \mathbf{T}_{(9 \leftarrow 6)}$ и воспользуемся свойством (2.22):

$$\boldsymbol{\sigma}'_{(6)} = \mathbf{T}_{(6 \leftarrow 9)} (\mathbf{R} \otimes \mathbf{R}) \mathbf{T}_{(9 \leftarrow 6)} \mathbf{C} \mathbf{T}_{(6 \leftarrow 9)} (\mathbf{R} \otimes \mathbf{R})^T \mathbf{T}_{(9 \leftarrow 6)} \boldsymbol{\varepsilon}'_{(6)}.$$

Последнее выражение — не что иное как закон Гука в новой системе координат, то есть матрица модулей упругости в новой системе координат равна:

$$\mathbf{C}' = [\mathbf{T}_{(6 \leftarrow 9)} (\mathbf{R} \otimes \mathbf{R}) \mathbf{T}_{(9 \leftarrow 6)}] \mathbf{C} [\mathbf{T}_{(6 \leftarrow 9)} (\mathbf{R} \otimes \mathbf{R})^T \mathbf{T}_{(9 \leftarrow 6)}]. \quad (2.24)$$

Итак, для того чтобы получить тензор деформации для гетероструктуры, выращенной на произвольной атомной плоскости, нужно сделать следующее:

1. Вычислить компоненты ε'_{xx} , ε'_{xy} и ε'_{yy} по формулам (2.16).
2. Вычислить матрицу модулей упругости в системе координат, где ось z направлена вдоль направления роста структуры, используя выражения (2.20) и (2.24).
3. Вычислить оставшиеся компоненты тензора деформации по формуле (2.19).

2.2 Гамильтониан в четырёхзонной модели

В данном разделе мы рассмотрим четырёхзонную модель (также известную как модель Кейна), которая используется для описания большинства узкозонных полупроводников. Здесь будут приведены выражения для гамильтониана размерности 8×8 для гетероструктур, выращенных на плоскостях и (013).

2.2.1 Базисные функции и их преобразование при поворотах

В качестве базиса в четырёхзонной модели выбираются функции принадлежащие представлениям Γ_6 , Γ_8 и Γ_7 (в кристаллах с тетраэдрической симметрией). Мы будем использовать тот же базис что и авторы работы [9]:

$$\begin{aligned} \Gamma_6 : \quad u_1 &= \begin{pmatrix} S \\ 0 \end{pmatrix}; & u_2 &= \begin{pmatrix} 0 \\ S \end{pmatrix}; \\ \Gamma_8 : \quad u_3 &= \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} X + iY \\ 0 \end{pmatrix}; & u_4 &= \frac{1}{\sqrt{6}} \begin{pmatrix} -2Z \\ X + iY \end{pmatrix}; \\ u_5 &= -\frac{1}{\sqrt{6}} \begin{pmatrix} X - iY \\ 2Z \end{pmatrix}; & u_6 &= -\frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 \\ X - iY \end{pmatrix}; \\ \Gamma_7 : \quad u_7 &= \frac{1}{\sqrt{3}} \begin{pmatrix} Z \\ X + iY \end{pmatrix}; & u_8 &= \frac{1}{\sqrt{3}} \begin{pmatrix} X - iY \\ -Z \end{pmatrix}; \end{aligned} \tag{2.25}$$

Функции (2.25) являются так же собственными функциями полного момента и его проекции на ось z . Представлениям Γ_6 и Γ_7 соответствует $J = 1/2$, а представлению $\Gamma_8 - J = 3/2$. Собственные значения проекции полного момента на ось z приведены в таблице 2.1. Отметим, что для простоты мы используем безразмерный момент импульса, а значение имеющее нужную размерность равно $\hbar J$.

Таблица 2.1: Значения модуля полного момента и проекции полного момента на ось z , соответствующие базисным функциям.

	u_1	u_2	u_3	u_4	u_5	u_6	u_7	u_8
J	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	$\frac{3}{2}$	$\frac{3}{2}$	$\frac{3}{2}$	$\frac{3}{2}$	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$
J_z	$\frac{1}{2}$	$-\frac{1}{2}$	$\frac{3}{2}$	$\frac{1}{2}$	$-\frac{1}{2}$	$-\frac{3}{2}$	$\frac{1}{2}$	$-\frac{1}{2}$

Итак, базис (2.25) можно разделить на три части, которые преобразуются независимо: две функции зоны проводимости (с), четыре функции зон тяжёлых и лёгких дырок (v) и две функции зоны спин-отщеплённых дырок (s). Таким образом, в гамильтониане, с учётом эрмитовости, можно выделить шесть независимых блоков:

$$\mathbf{H}^{(\text{Kane})} = \begin{pmatrix} \mathbf{H}^{(cc)} & \mathbf{H}^{(cv)} & \mathbf{H}^{(cs)} \\ \mathbf{H}^{(cv)\dagger} & \mathbf{H}^{(vv)} & \mathbf{H}^{(vs)} \\ \mathbf{H}^{(cs)\dagger} & \mathbf{H}^{(vs)\dagger} & \mathbf{H}^{(ss)} \end{pmatrix}. \quad (2.26)$$

Матрицы поворота для каждой группы функций согласно (2.14) выглядят следующим образом:

$$\begin{aligned} \mathbf{R}_u^{(c)} &= \mathbf{R}_u^{(s)} = \exp(-i\mathbf{J}_z^{(\frac{1}{2})}\gamma) \cdot \exp(-i\mathbf{J}_y^{(\frac{1}{2})}\beta) \cdot \exp(-i\mathbf{J}_z^{(\frac{1}{2})}\alpha); \\ \mathbf{R}_u^{(v)} &= \exp(-i\mathbf{J}_z^{(\frac{3}{2})}\gamma) \cdot \exp(-i\mathbf{J}_y^{(\frac{3}{2})}\beta) \cdot \exp(-i\mathbf{J}_z^{(\frac{3}{2})}\alpha); \end{aligned}$$

где

$$\begin{aligned} \mathbf{J}_x^{(\frac{1}{2})} &= \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}; & \mathbf{J}_x^{(\frac{3}{2})} &= \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{3} & 0 & 0 \\ \sqrt{3} & 0 & 2 & 0 \\ 0 & 2 & 0 & \sqrt{3} \\ 0 & 0 & \sqrt{3} & 0 \end{pmatrix}; \\ \mathbf{J}_y^{(\frac{1}{2})} &= \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}; & \mathbf{J}_y^{(\frac{3}{2})} &= \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i\sqrt{3} & 0 & 0 \\ i\sqrt{3} & 0 & -2i & 0 \\ 0 & 2i & 0 & -i\sqrt{3} \\ 0 & 0 & i\sqrt{3} & 0 \end{pmatrix}; \\ \mathbf{J}_z^{(\frac{1}{2})} &= \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}; & \mathbf{J}_z^{(\frac{3}{2})} &= \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 3 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -3 \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

2.2.2 Аксиальное приближение

Некоторые члены гамильтониана не меняются при поворотах системы координат вокруг оси z (т.е. поворотам в плоскости слоёв гетероструктуры). В аксиальном приближении весь эффективный гамильтониан должен удовлетворять этому условию.

Такое приближение широко используется для расчёта уровней Ландау, так как существенно упрощает вычисления (см., например, работу [9]).

Собственные функции гамильтониана, инвариантного относительно поворотов вокруг оси z , являются также собственными функциями \hat{J}_z — оператора проекции полного момента на эту ось. Пусть $\chi_{m,\mathbf{v}}(x, y)$ — волновая функция свободного электрона (без учёта движения вдоль оси z) в состоянии $J_z = m$. Вектор \mathbf{v} здесь обозначает все остальные квантовые числа, которыми характеризуется данное состояние. Для того, чтобы записать огибающие функции электрона в кристалле, находящегося в состоянии определённой проекцией момента на ось z , нужно учесть проекции собственного момента блоховских функций, которые приведены в таблице 2.2. В модели Кейна вектор огибающих функций для такого состояния равен

$$\mathbf{F}_{m,\mathbf{v}}(\mathbf{r}) = \begin{pmatrix} f_1(z) \chi_{m,\mathbf{v}}(x, y) \\ f_2(z) \chi_{m+1,\mathbf{v}}(x, y) \\ f_3(z) \chi_{m-1,\mathbf{v}}(x, y) \\ f_4(z) \chi_{m,\mathbf{v}}(x, y) \\ f_5(z) \chi_{m+1,\mathbf{v}}(x, y) \\ f_6(z) \chi_{m+2,\mathbf{v}}(x, y) \\ f_7(z) \chi_{m,\mathbf{v}}(x, y) \\ f_8(z) \chi_{m+1,\mathbf{v}}(x, y) \end{pmatrix}, \quad (2.27)$$

а проекция полного момента на ось z равна $J_z = m + \frac{1}{2}$.

Для того, чтобы функция вида (2.27) была решением уравнения Шредингера, каждый элемент эффективного гамильтониана $\hat{\mathbf{H}}$ должен менять полный момент огибающей функции, на которую он действует, на определённую величину, так чтобы вид (2.27) сохранялся. Соответствующие значения приведены в таблице 2.2.

Теперь учтём зависимость элементов гамильтониана от вектора $\hat{\mathbf{k}}$. Для этого удобнее выразить записать эффективный гамильтониан в терминах операторов \hat{k}_+ и \hat{k}_- :

$$\hat{H}_{nn'} = (\hat{\mathbf{q}}^\circ)^\dagger [\mathbf{G}_{nn'}^\circ(\mathbf{r})] \hat{\mathbf{q}}^\circ, \quad (2.28)$$

Таблица 2.2: Изменение проекции полного момента на ось z для огибающих функций под действием элементов эффективного гамильтониана в рамках аксиального приближения.

	u_1	u_2	u_3	u_4	u_5	u_6	u_7	u_8
u_1	0	-1	1	0	-1	-2	0	-1
u_2	1	0	2	1	0	-1	1	0
u_3	-1	-2	0	-1	-2	-3	-1	-2
u_4	0	-1	1	0	-1	-2	0	-1
u_5	1	0	2	1	0	-1	1	0
u_6	2	1	3	2	1	0	2	1
u_7	0	-1	1	0	-1	-2	0	-1
u_8	1	0	2	1	0	-1	1	0

Таблица 2.3: Изменение проекции полного момента на ось z для огибающих функций под действием операторов, соответствующих различным элементам матрицы $\mathbf{G}_{nn'}^\circ$.

	1	k_+	k_-	k_z
1	0	1	-1	0
k_-	-1	0	-2	-1
k_+	1	2	0	1
k_z	0	1	-1	0

где

$$\hat{\mathbf{q}}^\circ = \begin{pmatrix} 1 \\ \hat{k}_+ \\ \hat{k}_- \\ \hat{k}_z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{k}_x + i\hat{k}_y) \\ \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{k}_x - i\hat{k}_y) \\ \hat{k}_z \end{pmatrix}. \quad (2.29)$$

Матрицы $\mathbf{G}_{nn'}$ в новых и старых обозначениях связаны следующим соотношением:

$$\mathbf{G}_{nn'}^\circ = \mathbf{T}_\circ \mathbf{G}_{nn'} \mathbf{T}_\circ^\dagger$$

где

$$\mathbf{T}_\circ = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{i}{\sqrt{2}} & 0 \\ 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{i}{\sqrt{2}} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

Операторы 1 и \hat{k}_z не меняют функции $\chi_{m,\mathbf{v}}(x, y)$, а операторы \hat{k}_+ и \hat{k}_- действуют на них следующим образом [22; 65]:

$$\begin{aligned} \hat{k}_+ \chi_{m,\mathbf{v}} &= A(m, \mathbf{v}) \chi_{m+1,\mathbf{v}}; \\ \hat{k}_- \chi_{m,\mathbf{v}} &= B(m, \mathbf{v}) \chi_{m-1,\mathbf{v}}. \end{aligned} \quad (2.30)$$

Из данных соотношений несложно получить изменение проекции полного момента огибающей функции под действием каждого элемента матрицы $\mathbf{G}_{nn'}^\circ$. Соответствующие значения приведены в таблице 2.3.

Итак, для перехода к аксиальному приближению необходимо исключить из гамильтониана все члены, для которых значения в таблицах 2.2 и 2.3 не совпадают. При этом следует учитывать, что члены, возникающие при деформации кристалла и зависящие только от ϵ , не меняют значение проекции полного момента огибающей функции. Поэтому они могут присутствовать лишь в тех элементах гамильтониана, для которых значение в таблице 2.2 равно нулю.

2.2.3 Матрицы поворота для направления (013)

Углы Эйлера для гетероструктуры с осью z вдоль направления (013) и осью x вдоль направления (100) имеют следующие значения:

$$\begin{aligned}\alpha &= \frac{\pi}{2} \\ \beta &= \arctan \frac{1}{3} \\ \gamma &= -\frac{\pi}{2}\end{aligned}$$

Соответствующая матрица преобразования радиус-вектора равна

$$\mathbf{R} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{3}{\sqrt{10}} & -\frac{1}{\sqrt{10}} \\ 0 & \frac{1}{\sqrt{10}} & \frac{3}{\sqrt{10}} \end{pmatrix},$$

а преобразование базисных функций задаётся матрицами

$$\mathbf{R}_C^{(c)} = \mathbf{R}_C^{(s)} = \begin{pmatrix} \cos\left(\frac{\beta}{2}\right) & -i \sin\left(\frac{\beta}{2}\right) \\ -i \sin\left(\frac{\beta}{2}\right) & \cos\left(\frac{\beta}{2}\right) \end{pmatrix}$$

$$\mathbf{R}_C^{(v)} = \begin{pmatrix} \frac{3}{4} \cos \frac{\beta}{2} & -\frac{i\sqrt{3}}{4} \sin \frac{\beta}{2} & -\frac{1\sqrt{3}}{4} \cos \frac{\beta}{2} & \frac{3i}{4} \sin \frac{\beta}{2} \\ +\frac{1}{4} \cos \frac{3\beta}{2} & -\frac{i\sqrt{3}}{4} \sin \frac{3\beta}{2} & +\frac{1\sqrt{3}}{4} \cos \frac{3\beta}{2} & -\frac{i}{4} \sin \frac{3\beta}{2} \\ -\frac{i\sqrt{3}}{4} \sin \frac{\beta}{2} & \frac{1}{4} \cos \frac{\beta}{2} & \frac{i}{4} \sin \frac{\beta}{2} & -\frac{\sqrt{3}}{4} \cos \frac{\beta}{2} \\ -\frac{i\sqrt{3}}{4} \sin \frac{3\beta}{2} & +\frac{3}{4} \cos \frac{3\beta}{2} & -\frac{3i}{4} \sin \frac{3\beta}{2} & +\frac{\sqrt{3}}{4} \cos \frac{3\beta}{2} \\ -\frac{\sqrt{3}}{4} \cos \frac{\beta}{2} & \frac{i}{4} \sin \frac{\beta}{2} & \frac{1}{4} \cos \frac{\beta}{2} & -\frac{i\sqrt{3}}{4} \sin \frac{\beta}{2} \\ +\frac{\sqrt{3}}{4} \cos \frac{3\beta}{2} & -\frac{3i}{4} \sin \frac{3\beta}{2} & +\frac{3}{4} \cos \frac{3\beta}{2} & -\frac{i\sqrt{3}}{4} \sin \frac{3\beta}{2} \\ \frac{3i}{4} \sin \frac{\beta}{2} & -\frac{1\sqrt{3}}{4} \cos \frac{\beta}{2} & -\frac{i\sqrt{3}}{4} \sin \frac{\beta}{2} & \frac{3}{4} \cos \frac{\beta}{2} \\ -\frac{i}{4} \sin \frac{3\beta}{2} & +\frac{1\sqrt{3}}{4} \cos \frac{3\beta}{2} & -\frac{i\sqrt{3}}{4} \sin \frac{3\beta}{2} & +\frac{1}{4} \cos \frac{3\beta}{2} \end{pmatrix}$$

2.2.4 Гамильтониан гетероструктуры, выращенной на атомной плоскости (013)

Процедура получения гамильтониана Кейна в исходной системе координат ($x:(100)$, $y:(010)$, $z:(001)$) с помощью метода инвариантов подробно описана в лите-

ратуре [18; 61; 62; 66] (параметры, соответствующие разным инвариантам также перечислены в приложении B). Мы следуем приближению одинарной группы (см., например, [66]), в рамках которого спин-орбитальное взаимодействие учитывается с помощью единственного параметра Δ в блоке $\hat{\mathbf{H}}^{(ss)}$. В результате этого некоторые блоки гамильтониана оказываются зависимыми друг от друга, а точнее, от одних и тех же параметров. Такими блоками являются $\hat{\mathbf{H}}^{(cv)}$ и $\hat{\mathbf{H}}^{(cs)}$, а также $\hat{\mathbf{H}}^{(vv)}$, $\hat{\mathbf{H}}^{(vs)}$ и $\hat{\mathbf{H}}^{(ss)}$. Параметры используемой модели и их значения для $Cd_x Hg_{1-x} Te$ перечислены в таблице 2.5.

Общий вид эффективного гамильтониана в четырёхзонной модели приведён в таблице 2.4. Этот вид не зависит от того, на какой атомной плоскости выращена структура. Явные выражения для членов гамильтониана представлены в следующих разделах

Мы считаем все компоненты квазимпульса операторами так что магнитное поле может быть учтено с помощью подстановки Пайерлса (см. раздел 2.3.2). Коммутаторы компонент \mathbf{k} пропорциональны магнитному полю и дают Зеемановские члены:

$$\mathcal{B} = \frac{i\hbar c}{e} \begin{pmatrix} [\hat{k}_y, \hat{k}_z] \\ [\hat{k}_z, \hat{k}_x] \\ [\hat{k}_x, \hat{k}_y] \end{pmatrix},$$

где квадратными скобками обозначен коммутатор:

$$[\hat{k}_\alpha, \hat{k}_\beta] = \hat{k}_\alpha \hat{k}_\beta - \hat{k}_\beta \hat{k}_\alpha.$$

Таким образом, Зеемановские члены уже включены в гамильтониан и введение дополнительных поправок в магнитном поле не требуется.

Анизотропное приближение

В анизотропном приближении гамильтониан не обладает аксиальной симметрией. В данном приближении операторы в таблице 2.4 равны:

$$\begin{aligned} \hat{T} = E_c + \frac{\hbar^2}{2m_0} &\left((2F+1)(\hat{k}_x^2 + \hat{k}_y^2) + \hat{k}_z(2F+1)\hat{k}_z \right) + \\ &+ a_c(\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy} + \varepsilon_{zz}); \end{aligned}$$

$$\hat{U} = E_v - \frac{\hbar^2}{2m_0} \left(\gamma_1(\hat{k}_x^2 + \hat{k}_y^2) + \hat{k}_z\gamma_1\hat{k}_z \right) + a_v(\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy} + \varepsilon_{zz});$$

Таблица 2.4: Общий вид эффективного гамильтониана гетероструктуры в рамках четырёхзонной модели.

	u_1	u_2	u_3	u_4	u_5	u_6	u_7	u_8
u_1	$\hat{T} + \hat{T}_z$	0	$-P\hat{k}_+$	$\frac{1}{\sqrt{6}}\{P, \hat{k}_z\}$	$\frac{1}{\sqrt{3}}P\hat{k}_-$	0	$\frac{1}{2\sqrt{3}}\{P, \hat{k}_z\}$	$-\sqrt{\frac{2}{3}}P\hat{k}_-$
u_2	0	$\hat{T} - \hat{T}_z$	0	$-\frac{1}{\sqrt{3}}P\hat{k}_+$	$\frac{1}{\sqrt{6}}\{P, \hat{k}_z\}$	$P\hat{k}_-$	$-\sqrt{\frac{2}{3}}P\hat{k}_+$	$\frac{1}{2\sqrt{3}}\{P, \hat{k}_z\}$
u_3	$-P\hat{k}_-$	0	$\hat{U} + \hat{V} + 3\hat{W}$	$-(\hat{S} - 3\hat{Q})^\dagger$	\hat{R}	0	$\frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{S} - 3\hat{Q})^\dagger$	$-\sqrt{2}\hat{R}$
u_4	$\frac{1}{\sqrt{6}}\{P, \hat{k}_z\}$	$-\frac{1}{\sqrt{3}}P\hat{k}_-$	$-(\hat{S} - 3\hat{Q})$	$\hat{U} - \hat{V} + \hat{W}$	$2\sqrt{3}\hat{Q}^\dagger$	\hat{R}	$\sqrt{2}(\hat{V} + \hat{W})$	$-\frac{3}{\sqrt{2}}(\hat{S} + \hat{Q})^\dagger$
u_5	$\frac{1}{\sqrt{3}}P\hat{k}_+$	$\frac{1}{\sqrt{6}}\{P, \hat{k}_z\}$	\hat{R}^\dagger	$2\sqrt{3}\hat{Q}$	$\hat{U} - \hat{V} - \hat{W}$	$(\hat{S} + 3\hat{Q})^\dagger$	$-\frac{3}{\sqrt{2}}(\hat{S} - \hat{Q})$	$-\sqrt{2}(\hat{V} - \hat{W})$
u_6	0	$P\hat{k}_+$	0	\hat{R}^\dagger	$\hat{S} + 3\hat{Q}$	$\hat{U} + \hat{V} - 3\hat{W}$	$-\sqrt{2}\hat{R}^\dagger$	$\frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{S} + 3\hat{Q})$
u_7	$\frac{1}{2\sqrt{3}}\{P, \hat{k}_z\}$	$-\sqrt{\frac{2}{3}}P\hat{k}_-$	$\frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{S} - 3\hat{Q})$	$\sqrt{2}(\hat{V} + \hat{W})$	$-\frac{3}{\sqrt{2}}(\hat{S} - \hat{Q})^\dagger$	$-\sqrt{2}\hat{R}$	$\hat{U} + 2\hat{W} - \Delta$	$2\sqrt{3}\hat{Q}^\dagger$
u_8	$-\sqrt{\frac{2}{3}}P\hat{k}_+$	$\frac{1}{2\sqrt{3}}\{P, \hat{k}_z\}$	$-\sqrt{2}\hat{R}^\dagger$	$-\frac{3}{\sqrt{2}}(\hat{S} + \hat{Q})$	$-\sqrt{2}(\hat{V} - \hat{W})$	$\frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{S} + 3\hat{Q})^\dagger$	$2\sqrt{3}\hat{Q}$	$\hat{U} - 2\hat{W} - \Delta$

$$\begin{aligned}\hat{V} = & -\frac{\hbar^2}{2m_0} \left(\gamma_2 \hat{k}_x^2 + \frac{23\gamma_2 + 27\gamma_3}{50} \hat{k}_y^2 - \frac{18}{25} \hat{k}_y \{ \gamma_2 - \gamma_3, \hat{k}_z \} - \right. \\ & \quad \left. - \hat{k}_z \frac{73\gamma_2 + 27\gamma_3}{50} \hat{k}_z \right) + \\ & + \frac{b}{2} \varepsilon_{xx} + \frac{23b + 9\sqrt{3}d}{100} \varepsilon_{yy} + \frac{-18b + 6\sqrt{3}d}{25} \varepsilon_{yz} - \frac{73b + 9\sqrt{3}d}{100} \varepsilon_{zz};\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\hat{R} = & -\frac{\hbar^2}{2m_0} \sqrt{3} \left(-\gamma_2 \hat{k}_x^2 + 2i\gamma_3 \hat{k}_x \hat{k}_y + \frac{41\gamma_2 + 9\gamma_3}{50} \hat{k}_y^2 - \right. \\ & \quad \left. - \frac{6}{25} \hat{k}_y \{ \gamma_2 - \gamma_3, \hat{k}_z \} - \frac{9}{50} \hat{k}_z (\gamma_2 - \gamma_3) \hat{k}_z \right) - \\ & - \frac{\sqrt{3}b}{2} \varepsilon_{xx} + id\varepsilon_{xy} + \frac{41\sqrt{3}b + 9d}{100} \varepsilon_{yy} - \\ & \quad - \frac{6}{25} (\sqrt{3}b - d) \varepsilon_{yz} + \frac{9}{100} (\sqrt{3}b - d) \varepsilon_{zz};\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\hat{S} = & -\frac{\hbar^2}{2m_0} \sqrt{3} \left(\hat{k}_x \{ \gamma_3, \hat{k}_z \} - \frac{12i}{25} (\gamma_2 - \gamma_3) \hat{k}_y^2 + \frac{i}{25} \hat{k}_y \{ 9\gamma_2 + 16\gamma_3, \hat{k}_z \} + \right. \\ & \quad \left. + \frac{12i}{25} \hat{k}_z (\gamma_2 - \gamma_3) \hat{k}_z \right) + \\ & + d\varepsilon_{xz} - \frac{6i}{25} (\sqrt{3}b - d) \varepsilon_{yy} + \\ & \quad + i \frac{9\sqrt{3}b + 16d}{25} \varepsilon_{yz} + \frac{6i}{25} (\sqrt{3}b - d) \varepsilon_{zz};\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\hat{T}_z &= \frac{i}{2} [\hat{k}_x, \hat{k}_y]; \\ \hat{W} &= -i \frac{\hbar^2}{2m_0} \kappa [\hat{k}_x, \hat{k}_y]; \\ \hat{Q} &= -\frac{1}{\sqrt{3}} \frac{\hbar^2}{2m_0} \left(\hat{k}_x [\kappa, \hat{k}_z] + i \hat{k}_y [\kappa, \hat{k}_z] \right);\end{aligned}$$

Аксиальное приближение

В аксиальном приближении гамильтониан инвариантен относительно поворотов вокруг оси z . В данном приближении операторы в таблице 2.4 равны:

$$\hat{T} = E_c + \frac{\hbar^2}{2m_0} \left((2F+1)(\hat{k}_+ \hat{k}_- + \hat{k}_- \hat{k}_+) + \hat{k}_z (2F+1) \hat{k}_z \right) + \\ + a_c(\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy} + \varepsilon_{zz});$$

$$\hat{U} = E_v - \frac{\hbar^2}{2m_0} \left(\gamma_1 (\hat{k}_+ \hat{k}_- + \hat{k}_- \hat{k}_+) + \hat{k}_z \gamma_1 \hat{k}_z \right) + a_v(\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy} + \varepsilon_{zz});$$

$$\hat{V} = -\frac{\hbar^2}{2m_0} \left(\gamma_2 \hat{k}_- \hat{k}_+ + \frac{23\gamma_2 + 27\gamma_3}{50} \hat{k}_+ \hat{k}_- - \hat{k}_z \frac{73\gamma_2 + 27\gamma_3}{50} \hat{k}_z \right) + \\ + \frac{b}{2} \varepsilon_{xx} + \frac{23b + 9\sqrt{3}d}{100} \varepsilon_{yy} + \frac{-18b + 6\sqrt{3}d}{25} \varepsilon_{yz} - \frac{73b + 9\sqrt{3}d}{100} \varepsilon_{zz};$$

$$\hat{R} = \frac{\hbar^2}{2m_0} \sqrt{3} \frac{91\gamma_2 + 109\gamma_3}{100} \hat{k}_-^2;$$

$$\hat{S} = -\frac{\hbar^2}{2m_0} \frac{\sqrt{6}}{50} \hat{k}_+ \{9\gamma_2 + 41\gamma_3, \hat{k}_z\};$$

$$\hat{T}_z = -\frac{1}{2} [\hat{k}_+, \hat{k}_-];$$

$$\hat{W} = \frac{\hbar^2}{2m_0} \kappa [\hat{k}_+, \hat{k}_-];$$

$$\hat{Q} = -\sqrt{\frac{2}{3}} \frac{\hbar^2}{2m_0} \hat{k}_+ [\kappa, \hat{k}_z];$$

Тензор деформации

Компоненты тензора деформации, полученные описанным в разделе 2.1.3 способом, представлены ниже

$$\begin{pmatrix} \varepsilon_{xx} \\ \varepsilon_{xy} \\ \varepsilon_{yy} \\ \varepsilon_{xz} \\ \varepsilon_{yz} \\ \varepsilon_{zz} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \varepsilon_{xx} \\ 0 \\ \varepsilon_{xx} \\ 0 \\ \frac{12(2C_{11}+4C_{12}C_{44}-C_{11}^2-C_{11}C_{12}+2C_{12}^2)}{(82C_{11}-18C_{12})C_{44}+9C_{11}^2-9C_{12}^2}\varepsilon_{xx} \\ \frac{2(9C_{11}-73C_{12})C_{44}-9C_{11}^2-18C_{11}C_{12}+27C_{12}^2}{(82C_{11}-18C_{12})C_{44}+9C_{11}^2-9C_{12}^2}\varepsilon_{xx} \end{pmatrix}.$$

2.2.5 Поправки, связанные с отсутствием центра инверсии в объёме

Члены, связанные с отсутствием центра инверсии в объёме, не представлены в таблице 2.4 поскольку они обычно не учитываются. Мы не используем их при расчётах нигде кроме раздела 3.3.4, при этом рассматриваются только члены, дающие наибольший вклад в гамильтониан [18]. Эти слагаемые не содержат аксиально симметричной части и могут быть учтены только в анизотропном приближении [18; 67]:

$$\hat{\mathbf{H}}^{(\text{BIA})} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & \sqrt{3}\hat{B} & \hat{B}_z & \hat{B}^\dagger & 0 & \frac{1}{\sqrt{2}}\hat{B}_z & -\sqrt{2}\hat{B}^\dagger \\ 0 & 0 & 0 & \hat{B} & \hat{B}_z & \sqrt{3}\hat{B}^\dagger & \sqrt{2}\hat{B} & -\frac{1}{\sqrt{2}}\hat{B}_z \\ \sqrt{3}\hat{B}^\dagger & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \hat{B}_z^\dagger & \hat{B}^\dagger & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \hat{B} & \hat{B}_z^\dagger & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \sqrt{3}\hat{B} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \frac{1}{\sqrt{2}}\hat{B}_z^\dagger & \sqrt{2}\hat{B}^\dagger & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -\sqrt{2}\hat{B} & -\frac{1}{\sqrt{2}}\hat{B}_z^\dagger & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (2.31)$$

$$\hat{B} = \frac{1}{\sqrt{6}} \hat{\mathbf{k}}^\dagger B_8 \begin{pmatrix} 0 & 0,3 & 0,4 \\ 0,3 & -0,3i & -0,4i \\ 0,4 & -0,4i & 0,3i \end{pmatrix} \hat{\mathbf{k}};$$

$$\hat{B}_z = \frac{1}{\sqrt{6}} \hat{\mathbf{k}}^\dagger B_8 \begin{pmatrix} 0 & 0,8i & -0,6i \\ 0,8i & 0 & 0 \\ -0,6i & 0 & 0 \end{pmatrix} \hat{\mathbf{k}}.$$

2.3 Расчёт состояний электронов

В данном разделе подробно описана процедура вычисления энергий и волновых функций состояний электронов в гетероструктурах, которые описываются гамильтонианом вида (2.1) с помощью разложения по плоским волнам [44].

2.3.1 Гетероструктура без внешнего магнитного поля

В гетероструктуре, слои которой перпендикулярны оси z огибающие функции в плоскости (xy) являются плоскими волнами:

$$F_n(\mathbf{r}) = f_n(z) e^{i(k_x x + k_y y)}. \quad (2.32)$$

Для того, чтобы найти неизвестные функции $f_n(z)$ подставим выражение (2.32) в уравнение Шрёдингера (1.1) с гамильтонианом (2.1). В результате получим систему уравнений для функций $f_n(z)$:

$$\sum_{n'} \hat{\mathbf{q}}^\dagger [\mathbf{G}_{nn'}(z)] \hat{\mathbf{q}} f_{n'}(z) e^{i(k_x x + k_y y)} = E f_n(z) e^{i(k_x x + k_y y)},$$

или

$$\sum_{n'} \left(e^{-i(k_x x + k_y y)} (\hat{\mathbf{q}}^\dagger [\mathbf{G}_{nn'}(z)] \hat{\mathbf{q}}) e^{i(k_x x + k_y y)} \right) f_{n'}(z) = E f_n(z). \quad (2.33)$$

Поскольку $\hat{\mathbf{q}}$ содержит дифференциальный оператор \hat{k}_z , выражение (2.33) является системой дифференциальных уравнений. Для того, чтобы перейти к системе алгебраических уравнений, разложим неизвестные функции $f_n(z)$ по плоским волнам [44]:

$$f_n(z) = \sum_{k_z} g_{n,k_z} e^{i k_z z}. \quad (2.34)$$

Подстановка разложения (2.34) в уравнение (2.33) даёт систему уравнений для коэффициентов g_{n,k_z} :

$$\sum_{n',k'_z} \left\langle k_z \left| e^{-i(k_x x + k_y y)} (\hat{\mathbf{q}}^\dagger [\mathbf{G}_{nn'}(z)] \hat{\mathbf{q}}) e^{i(k_x x + k_y y)} \right| k'_z \right\rangle g_{n',k'_z} = E g_{n,k_z}. \quad (2.35)$$

где

$$\left\langle k_z \left| \hat{A} \right| k'_z \right\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dz e^{-ik_z z} \hat{A} e^{ik'_z z}$$

Применение оператора $\hat{\mathbf{q}}$ к функциям координат в левой части уравнения (2.35) даёт следующий результат:

$$\sum_{n',k'_z} H_{nk_z, n'k'_z}(k_x, k_y) g_{n',k'_z} = E g_{n,k_z}, \quad (2.36)$$

где

$$H_{nk_z, n'k'_z}(k_x, k_y) = \begin{pmatrix} 1 & k_x & k_y \end{pmatrix} [\tilde{\mathbf{G}}_{nk_z, n'k'_z}] \begin{pmatrix} 1 \\ k_x \\ k_y \end{pmatrix};$$

$$\tilde{\mathbf{G}}_{nk_z, n'k'_z} = \langle k_z | \begin{pmatrix} G_{nn',11}(z) + \\ G_{nn',1z}(z)k'_z + \\ k_z G_{nn',z1}(z) + \\ k_z G_{nn',zz}(z)k'_z \end{pmatrix} \begin{pmatrix} G_{nn',1x}(z) + \\ k_z G_{nn',zx}(z) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} G_{nn',1y}(z) + \\ k_z G_{nn',zy}(z) \end{pmatrix} | k'_z \rangle.$$

$$\begin{pmatrix} G_{nn',x1}(z) + \\ G_{nn',xz}(z)k'_z \end{pmatrix} G_{nn',xx}(z) G_{nn',xy}(z)$$

$$\begin{pmatrix} G_{nn',y1}(z) + \\ G_{nn',yz}(z)k'_z \end{pmatrix} G_{nn',yx}(z) G_{nn',yy}(z)$$

Численная диагонализация матрицы $\mathbf{H}(k_x, k_y)$ в уравнении (2.36) даёт энергии $E(k_x, k_y, i)$ состояний электронов и соответствующие волновые функции в виде коэффициентов $g_{n,k_z}(k_x, k_y, i)$ разложения (2.34), где i — номер подзоны размерного квантования.

2.3.2 Уровни Ландау

Гамильтониан гетероструктуры в магнитном поле получается при помощи подстановки Пайерлса:

$$\mathbf{k} \rightarrow \hat{\mathbf{k}}' = \hat{\mathbf{k}} + \frac{e}{\hbar c} \mathbf{A}(\mathbf{r}), \quad (2.37)$$

где \mathbf{A} — вектор-потенциал магнитного поля \mathcal{B} :

$$\mathcal{B} = [\nabla \times \mathbf{A}].$$

Мы рассматриваем случай, когда поле \mathcal{B} перпендикулярно слоям гетероструктуры, т.е. направлено вдоль оси z . При этом движение электрона в плоскости (xy) квантуется и плоские волны уже не являются решением.

Как уже было отмечено в разделе 2.2.4, Зеемановские члены уже включены в гамильтониан как коммутатор $[\hat{k}_x, \hat{k}_y]$, поэтому введение дополнительных поправок в магнитном поле не требуется.

Волновая функция свободного электрона в однородном магнитном поле равна [22]:

$$\Psi_{N,M,k_z} = \varphi_{N,M}(x, y) e^{ik_z z},$$

где N — номер уровня Ландау, а M — квантовое число, отвечающее за вырождение уровней Ландау. Физический смысл квантового числа M , как и вид поперечной волновой функции $\varphi_{N,M}(x, y)$, определяется выбранной калибровкой вектор-потенциала \mathbf{A} .

Введём операторы рождения и уничтожения аналогично [9]

$$\begin{aligned} \hat{a}^\dagger &= \lambda \hat{k}'_+ = \frac{\lambda}{\sqrt{2}} (\hat{k}'_x + i \hat{k}'_y); \\ \hat{a} &= \lambda \hat{k}'_- = \frac{\lambda}{\sqrt{2}} (\hat{k}'_x - i \hat{k}'_y); \end{aligned} \quad (2.38)$$

где λ — магнитная длина равная

$$\lambda = \sqrt{\frac{\hbar c}{e \mathcal{B}}}$$

Тогда для поперечных функций, вне зависимости от калибровки, будут выполняться следующие соотношения:

$$\begin{aligned} \hat{a}^\dagger \varphi_{N,M}(x, y) &= \sqrt{N+1} \varphi_{N+1,M}(x, y); \\ \hat{a} \varphi_{N,M}(x, y) &= \sqrt{N} \varphi_{N-1,M}(x, y). \end{aligned} \quad (2.39)$$

Будем искать огибающие функции в следующем виде:

$$F_n(\mathbf{r}) = \sum_N f_{n,N}(z) \varphi_{N,M}(x, y), \quad (2.40)$$

где

$$f_{n,N}(z) = \sum_{k_z} g_{n,k_z,N} e^{ik_z z}.$$

Как и в случае магнитного поля мы ищем зависимость огибающих от координаты z с помощью разложения по плоским волнам. Подставив выражение (2.40) в уравнение (1.1) получим систему уравнений для коэффициентов $g_{n,k_z,N}$:

$$\sum_{n',k'_z,N'} (\hat{\mathbf{q}}_{\perp}^{\circ'})^\dagger \left[\tilde{\mathbf{G}}_{nk_z, n'k'_z}^{\circ} \right] \hat{\mathbf{q}}_{\perp}^{\circ'} \varphi_{N',M}(x, y) g_{n',k'_z,N'}(z) = E \varphi_{N,M}(x, y) g_{n,k_z,N}(z),$$

где

$$\hat{\mathbf{q}}_{\perp}^{\circ'} = \begin{pmatrix} 1 \\ \hat{k}'_+ \\ \hat{k}'_- \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ \hat{a}^\dagger/\lambda \\ \hat{a}/\lambda \end{pmatrix};$$

$$\tilde{\mathbf{G}}_{nk_z, n'k'_z}^{\circ} = \mathbf{T}_{\circ\perp} \tilde{\mathbf{G}}_{nk_z, n'k'_z} \mathbf{T}_{\circ\perp}^\dagger;$$

$$\mathbf{T}_{\circ\perp} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{i}{\sqrt{2}} \\ 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{i}{\sqrt{2}} \end{pmatrix}.$$

Воспользовавшись свойством (2.39), получим следующую систему уравнений:

$$\sum_{n',k'_z,N'} H_{nk_zN, n'k'_zN'} g_{n',k'_z,N'}(z) = E g_{n,k_z,N}(z), \quad (2.41)$$

где

$$H_{nk_z N, n'k'_z N'} = \begin{cases} \frac{1}{\lambda^2} \sqrt{N(N-1)} \left[\tilde{\mathbf{G}}_{nk_z, n'k'_z}^\circ \right]_{+,+}, \\ \quad N' = N-2; \\ \frac{1}{\lambda} \sqrt{N} \left(\left[\tilde{\mathbf{G}}_{nk_z, n'k'_z}^\circ \right]_{1,+} + \left[\tilde{\mathbf{G}}_{nk_z, n'k'_z}^\circ \right]_{+,1} \right), \\ \quad N' = N-1; \\ \left[\tilde{\mathbf{G}}_{nk_z, n'k'_z}^\circ \right]_{1,1} + \frac{1}{\lambda^2}(N+1) \left[\tilde{\mathbf{G}}_{nk_z, n'k'_z}^\circ \right]_{-,+} + \\ \quad + \frac{1}{\lambda^2} N \left[\tilde{\mathbf{G}}_{nk_z, n'k'_z}^\circ \right]_{+,-}, \\ \quad N' = N; \\ \frac{1}{\lambda} \sqrt{N+1} \left(\left[\tilde{\mathbf{G}}_{nk_z, n'k'_z}^\circ \right]_{-,1} + \left[\tilde{\mathbf{G}}_{nk_z, n'k'_z}^\circ \right]_{1,-} \right), \\ \quad N' = N+1; \\ \frac{1}{\lambda^2} \sqrt{(N+1)(N+2)} \left[\tilde{\mathbf{G}}_{nk_z, n'k'_z}^\circ \right]_{-,-}, \\ \quad N' = N+2; \\ 0, \quad \text{в остальных случаях.} \end{cases} \quad (2.42)$$

В аксиальном приближении (см. раздел 2.2.2) система уравнений (2.41) существенно упрощается. В соответствии с соотношениями (2.30) и (2.39) воздействие операторов \hat{k}_+ , \hat{k}_- на функции $\chi_{m,\nu}$ и операторов \hat{a}^\dagger , \hat{a} на функции $\varphi_{N,M}$ происходит схожим образом. Поэтому вектор огибающих, вид которого аналогичен (2.27), является решением [9]:

$$\mathbf{F}_{N,M}(\mathbf{r}) = \begin{pmatrix} f_1(z) \varphi_{N,M}(x, y) \\ f_2(z) \varphi_{N+1,M}(x, y) \\ f_3(z) \varphi_{N-1,M}(x, y) \\ f_4(z) \varphi_{N,M}(x, y) \\ f_5(z) \varphi_{N+1,M}(x, y) \\ f_6(z) \varphi_{N+2,M}(x, y) \\ f_7(z) \varphi_{N,M}(x, y) \\ f_8(z) \varphi_{N+1,M}(x, y) \end{pmatrix}. \quad (2.43)$$

Поперечные волновые функции $\varphi_{N,M}$ определены только для неотрицательных номеров уровней Ландау, в противном случае они должны быть приняты тождественно равными нулю, так как оператор уничтожения по определению удовлетворяет следующему соотношению:

$$\hat{a} \varphi_{0,M}(x, y) = 0.$$

Таким образом, квантовое число N в формуле (2.43) может принимать лишь те значения, для которых хотя бы одна компонента вектора $\mathbf{F}_{N,M}$ не равна нулю, т.е. имеет неотрицательный номер уровня Ландау, что соответствует $N \geq -2$. Для $-2 \leq N \leq 0$ выражение (2.43) имеет следующий вид:

$$\mathbf{F}_{-2,M}(\mathbf{r}) = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ f_{6,0}(z) \varphi_{0,M}(x, y) \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}; \quad (2.44)$$

$$\mathbf{F}_{-1,M}(\mathbf{r}) = \begin{pmatrix} 0 \\ f_{2,0}(z) \varphi_{0,M}(x, y) \\ 0 \\ 0 \\ f_{5,0}(z) \varphi_{0,M}(x, y) \\ f_{6,1}(z) \varphi_{1,M}(x, y) \\ 0 \\ f_{8,0}(z) \varphi_{0,M}(x, y) \end{pmatrix}; \quad (2.45)$$

$$\mathbf{F}_{0,M}(\mathbf{r}) = \begin{pmatrix} f_{1,0}(z) \varphi_{0,M}(x, y) \\ f_{2,1}(z) \varphi_{1,M}(x, y) \\ 0 \\ f_{4,0}(z) \varphi_{0,M}(x, y) \\ f_{5,1}(z) \varphi_{1,M}(x, y) \\ f_{6,2}(z) \varphi_{2,M}(x, y) \\ f_{7,0}(z) \varphi_{0,M}(x, y) \\ f_{8,1}(z) \varphi_{1,M}(x, y) \end{pmatrix}. \quad (2.46)$$

Подставив выражение (2.43) в (2.41) получаем

$$\sum_{n', k'_z} H_{nk_z N + \nu(n), n'k'_z N + \nu(n')} g_{n', k'_z} = Eg_{n, k_z}, \quad (2.47)$$

где значения $\nu(n)$ соответствуют форме (2.43), то есть:

$$\nu(n) = 0, -1, 1, 0, -1, -2, 0, -1;$$

а $H_{nk_z N + \nu(n), n'k'_z N + \nu(n')}$ задаётся формулой (2.42).

Численная диагонализация матрицы $\mathbf{H}(N, \mathcal{B})$ в уравнении (2.47) даёт энергии уровней Ландау $E(N, \mathcal{B}, i)$ и соответствующие волновые функции (в виде набора коэффициентов $g_{n, k_z}(N, \mathcal{B}, i)$) где i — номер подзоны размерного квантования.

2.4 Расчёт зонной структуры квантовых ям HgCdTe/CdHgTe

2.4.1 Параметры, используемые при расчётах

При расчётах использовались параметры, приведённые в таблице 2.5. Параметры a_c , a_v , b , d и значения модулей упругости C_{ij} были взяты из работы [68]; параметр B_8 — из книги [18]; остальные параметры — из работы [9].

Все величины считались линейно зависящими от состава твёрдого раствора, за исключением ширины запрещённой зоны E_g , для которой использовалось следующее

выражение [53; 69], учитывающее зависимость от температуры:

$$E_g(\text{Cd}_x\text{Hg}_{1-x}\text{Te}) = -0,303(1-x) + 1,606x - 0,132x(1-x) + \frac{[4,95(1-x) - 3,25x - 3,93x(1-x)]T^2}{10[11(1-x) + 78,7x + T]}.$$

Величина VBO (valence band offset) равная разрыву валентной зоны между CdTe и HgTe также считалась зависящей от температуры [53]:

$$E_v(\text{HgTe}) - E_v(\text{CdTe}) = 570 - 0,4T.$$

За начало отсчёта энергии было принято положение дна валентной зоны HgTe.

2.4.2 Метод расчёта

Волновые функции вычисляются с помощью методики описанной в разделе 2.3 путём разложения по плоским волнам (2.34). Поскольку одиночная квантовая яма не является периодической структурой, волновое число k_z может принимать непрерывное множество значений, т.е. разложение производится по бесконечному базису, даже если максимальное значение k_z ограничено.

Для того чтобы перейти к конечному базису удобному для численных расчётов, мы рассмотрим периодическую структуру (с периодом L), состоящую из одинаковых квантовых ям того же вида, что и исходная (рис. 2.1). Период этой модельной структуры выбирается таким, чтобы соседние ямы не взаимодействовали друг с другом. Другими словами, барьеры должны быть достаточно широкими для того, чтобы мож-

Таблица 2.5: Параметры материалов, используемые при расчётах.

Параметры	CdTe	HgTe	Параметры	CdTe	HgTe
E_g (эВ)	1,606	-0,303	B_8 (эВ·Å ²)	-22,41	–
E_v (эВ)	-0,57	0	a (Å)	6,48	6,46
Δ (эВ)	0,91	1,08	a_c (эВ)	-2,925	-2,380
F	-0,09	0	a_v (эВ)	0	1,31
E_p (эВ)	18,8	18,8	b (эВ)	-1,2	-1,5
γ_1	1,47	4,1	d (эВ)	-5,4	-2,5
γ_2	-0,28	0,5	C_{11} (10^{11} дин/см ²)	5,62	5,92
γ_3	0,03	1,3	C_{12} (10^{11} дин/см ²)	3,94	4,14
κ	-1,31	-0,4	C_{44} (10^{11} дин/см ²)	2,06	2,19

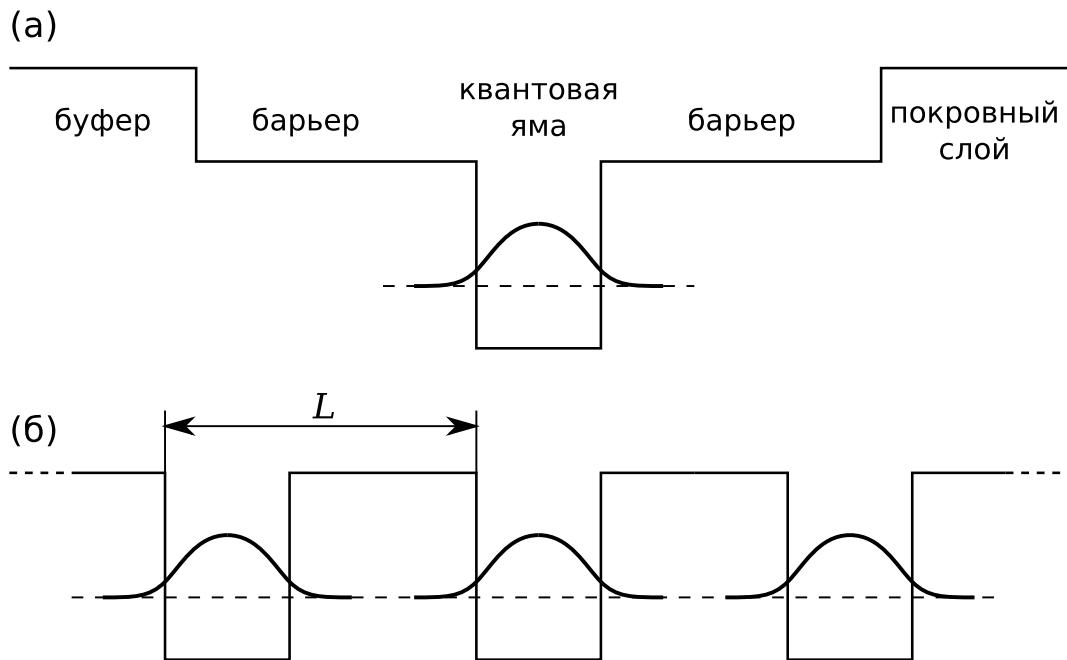


Рис. 2.1: Одиночная квантовая яма (а) и модельная гетероструктура (б).

но было пренебречь величиной волновой функции электрона в некоторой точке по середине. Для широкого диапазона параметров квантовой ямы достаточно оказывается толщина 20 нм.

Поскольку теперь мы имеем дело с периодической структурой, волновое число k_z может принимать дискретный набор значений с шагом $\frac{2\pi}{L}$. Если в качестве максимального волнового числа выбрана величина $\frac{2\pi}{L} N_k$, то базис должен состоять из $2N_k + 1$ элемента:

$$k_z = -\frac{2\pi}{L} N_k, \dots, -\frac{2\pi}{L}, 0, \frac{2\pi}{L}, \dots, \frac{2\pi}{L} N_k.$$

При расчётах мы использовали $N_k = 30$.

2.4.3 Зависимость зонной структуры от толщины ямы

Рассмотрим квантовую яму из чистого HgTe с барьерами Cd_{0,7}Hg_{0,3}Te (оптимальный с технологической точки зрения состав барьера с высокой концентрацией кадмия). Ширина запрещённой зоны зависит от толщины квантовой ямы, причём эта зависимость не является монотонной (см. рис. 2.2).

В узкой квантовой яме волновая функция электрона хорошо проникает в барьер и зонная структура оказывается CdTe-подобной, т.е. неинвертированной или *нормальной*. В квантовой яме с нормальной зонной структурой зона проводимости образована электрон-подобными волновыми функциями, т.е. функциями у которых огибающие,

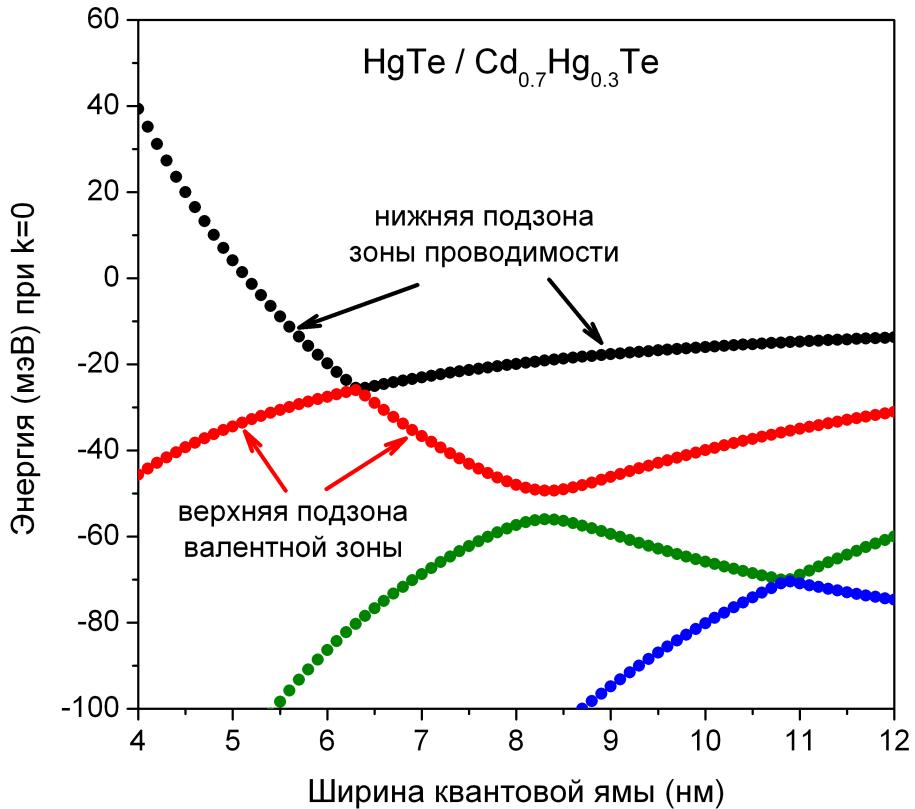


Рис. 2.2: Рассчитанная зависимость энергии подзон размерного квантования при $\mathbf{k}_\perp = 0$ от ширины квантовой ямы $\text{HgTe}/\text{Cd}_{0,7}\text{Hg}_{0,3}\text{Te}$ (013) при $T = 0\text{K}$.

соответствующие блоховскими функциями S-типа (симметрия Γ_6), существенно больше чем остальные огибающие. Валентная зона образована дырочно-подобными волновыми функциями, в которых преобладают огибающие, соответствующие блоховскими функциями P-типа (симметрия Γ_8 и Γ_7).

Отличия зоны проводимости от валентной зоны хорошо видны в структуре уровней Ландау. В разделе 2.3.2 было показано, что уровень Ландау с наименьшем номером ($N = -2$) содержит всего одну огибающую функцию (см. формулу (2.44)), которая соответствует блоховской функции зоны тяжёлых дырок u_6 с проекцией полного момента на ось z равной $-3/2$. Таким образом, наличие уровня с $N = -2$ указывает на существенный вклад зоны тяжёлых дырок. На рис. 2.3, 2.4 видно, что в ямах с нормальной зонной структурой этот уровень присутствует в валентной зоне и отсутствует в зоне проводимости.

При увеличении ширины квантовой ямы ширина запрещённой зоны уменьшается (рис. 2.3, 2.3). В узкозонных ямах сильнее становится непарabolичность зоны проводимости, которая проявляется в практически линейном законе дисперсии $E(k)$ для

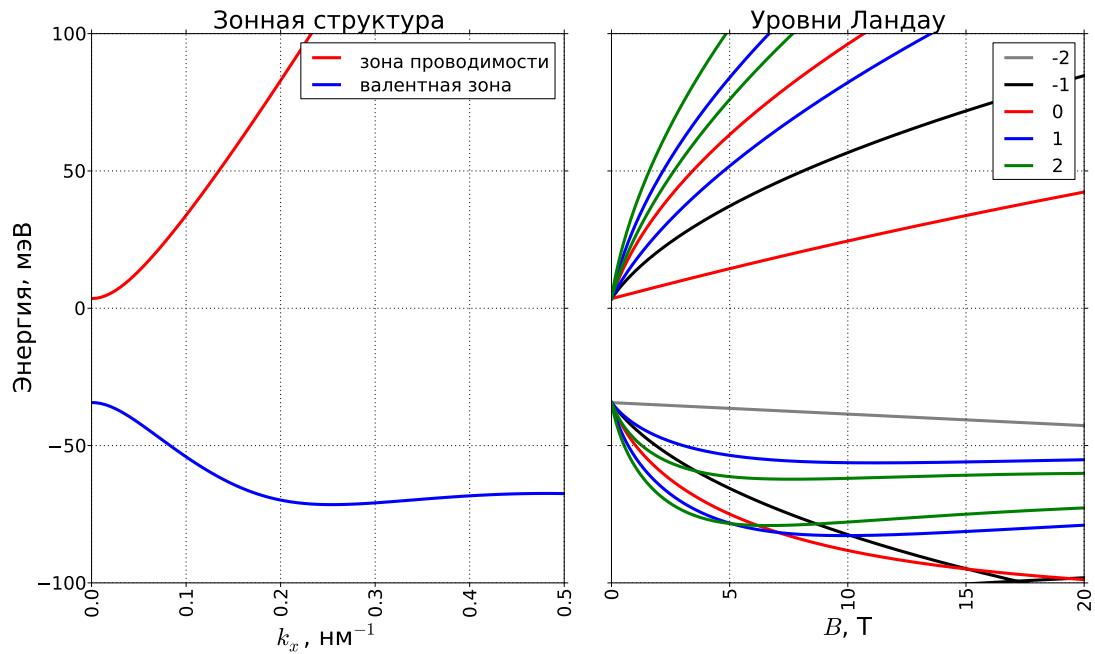


Рис. 2.3: Рассчитанная зонная структура и уровни Ландау квантовой ямы $\text{HgTe}/\text{Cd}_{0.7}\text{Hg}_{0.3}\text{Te}$ (013) толщиной 5 нм при $T = 0\text{К}$.

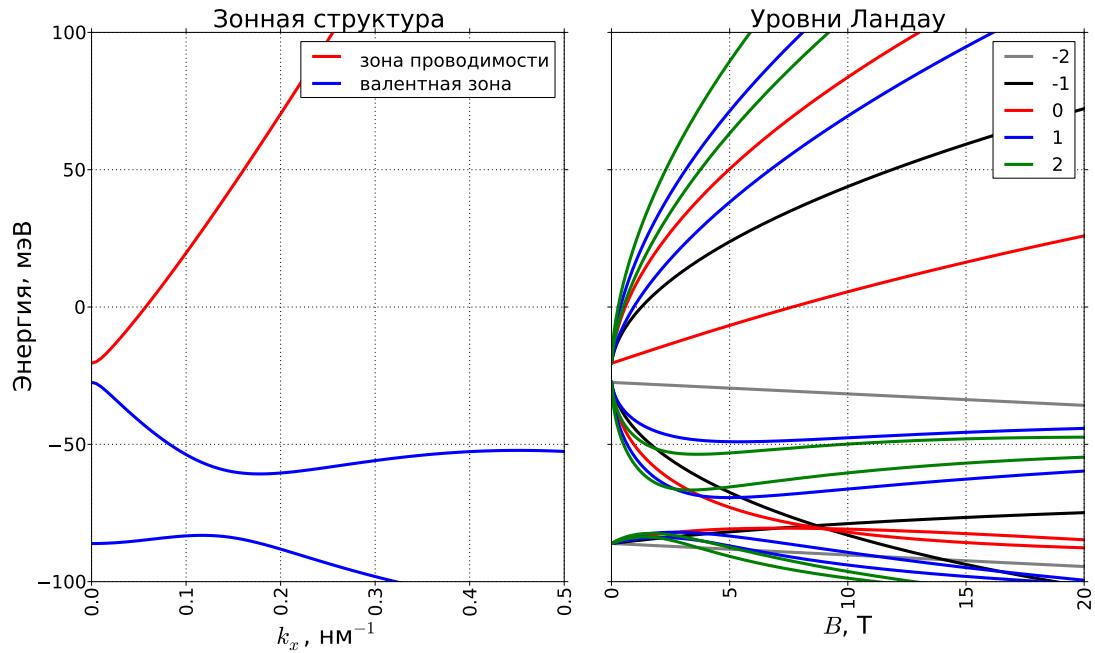


Рис. 2.4: Рассчитанная зонная структура и уровни Ландау квантовой ямы $\text{HgTe}/\text{Cd}_{0.7}\text{Hg}_{0.3}\text{Te}$ (013) толщиной 6 нм при $T = 0\text{К}$.

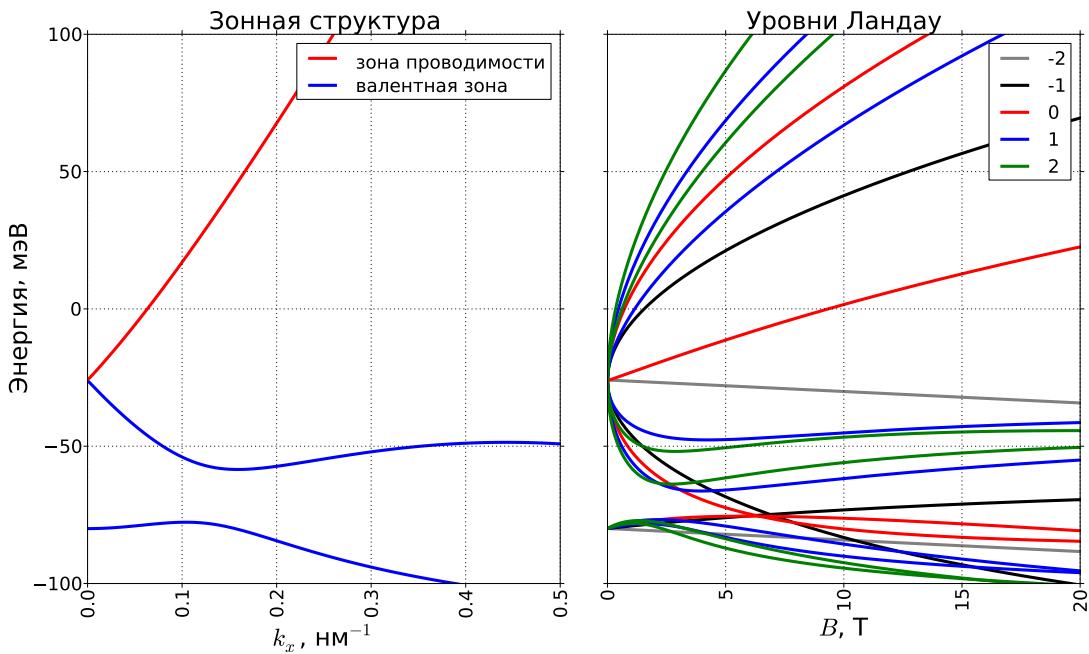


Рис. 2.5: Рассчитанная зонная структура и уровни Ландау квантовой ямы $\text{HgTe}/\text{Cd}_{0,7}\text{Hg}_{0,3}\text{Te}$ (013) толщиной 6,3 нм (критическая толщина) при $T = 0\text{K}$.

больших k . С уменьшением ширины запрещённой зоны уменьшается эффективная масса как в зоне проводимости так и в валентной зоне, а начало области линейного закона дисперсии становится ближе к $k = 0$. Энергия уровней Ландау в узкозонных квантовых ямах, напротив, зависит от магнитного поля нелинейно (рис. 2.3, 2.3).

Когда толщина ямы равна критическому значению d_c , зона проводимости и валентная зона касаются друг друга в точке $k = 0$ (см. рис. 2.5), то есть ширина запрещённой зоны равна нулю. При этом закон дисперсии зон вблизи точки касания линеен.

При больших толщинах волновая функция электрона сильнее локализована в квантовой яме и зонная структура является HgTe-подобной, или *инвертированной*. В отличие от объёмного твёрдого раствора с инвертированной зонной структурой, который является бесщелевым, квантовые ямы имеют ненулевую запрещённую зону (рис. 2.6). Отличие инвертированной и нормальной зонной структуры проявляется в симметрии волновых функций. В HgTe-подобных квантовых ямах зона проводимости образована дырочно-подобными, а валентная зона — электрон-подобными функциями. Соответственно, уровень Ландау с $N = -2$ здесь расположен в зоне проводимости, а в валентной зоне — отсутствует (рис. 2.6).

Если сравнить рисунки 2.4 и 2.6, то можно увидеть, что при переходе через точку инверсии зона проводимости и валентная зона обмениваются уровнями Ландау с $N = 0$ и $N = -2$. При этом зависимость энергии этих уровней от магнитного поля не

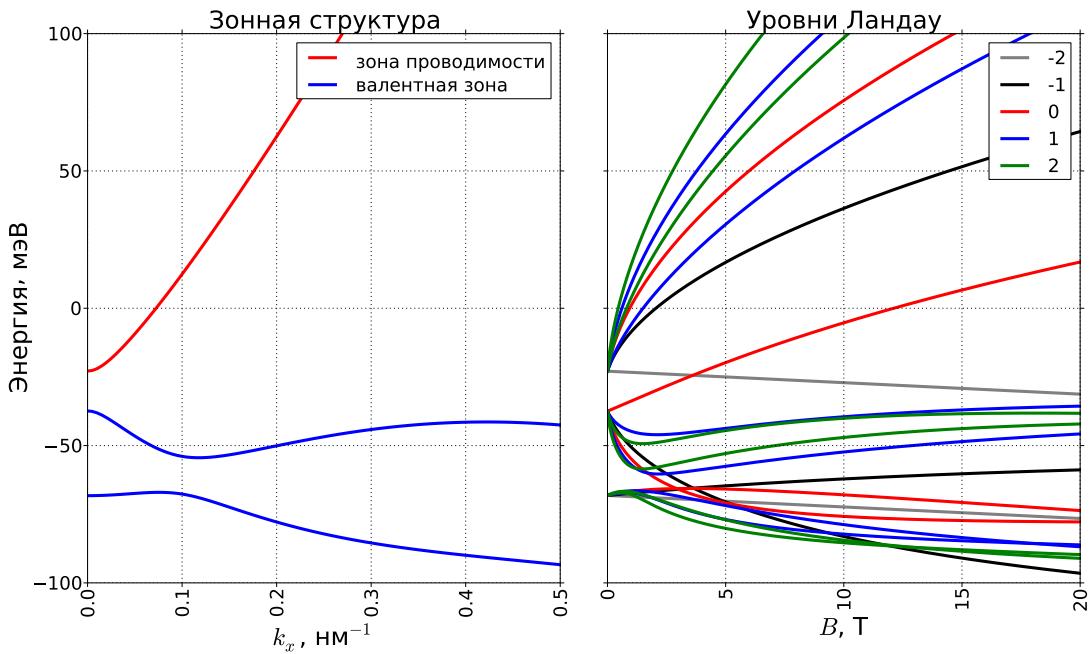


Рис. 2.6: Рассчитанная зонная структура и уровни Ландау квантовой ямы $\text{HgTe}/\text{Cd}_{0.7}\text{Hg}_{0.3}\text{Te}$ (013) толщиной 7 нм при $T = 0\text{К}$.

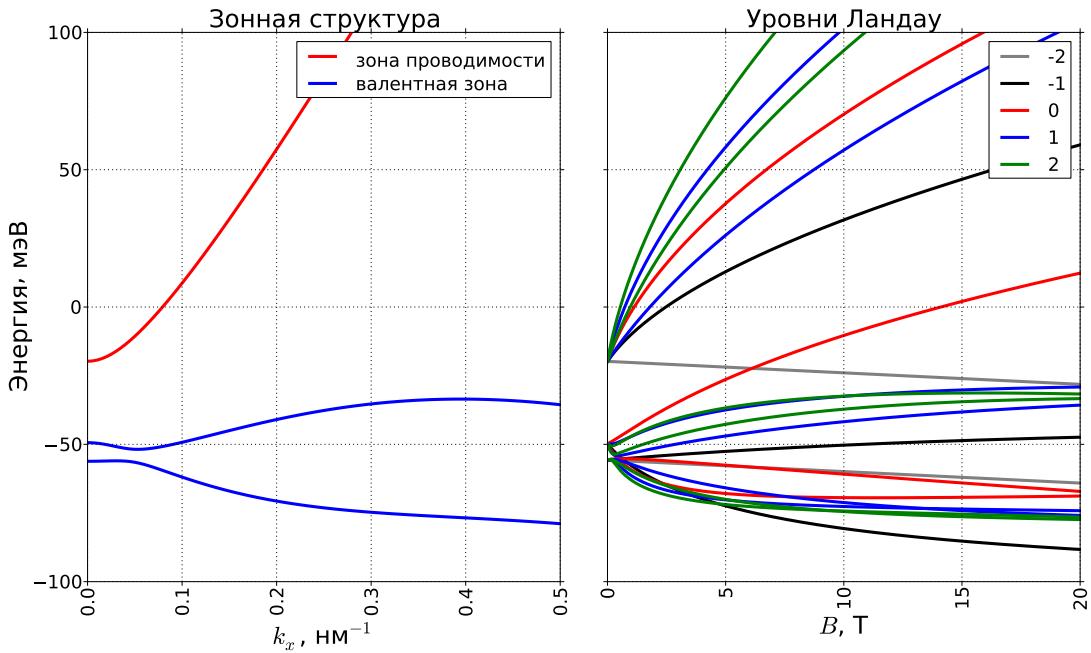


Рис. 2.7: Рассчитанная зонная структура и уровни Ландау квантовой ямы $\text{HgTe}/\text{Cd}_{0.7}\text{Hg}_{0.3}\text{Te}$ (013) толщиной 8 нм при $T = 0\text{К}$.

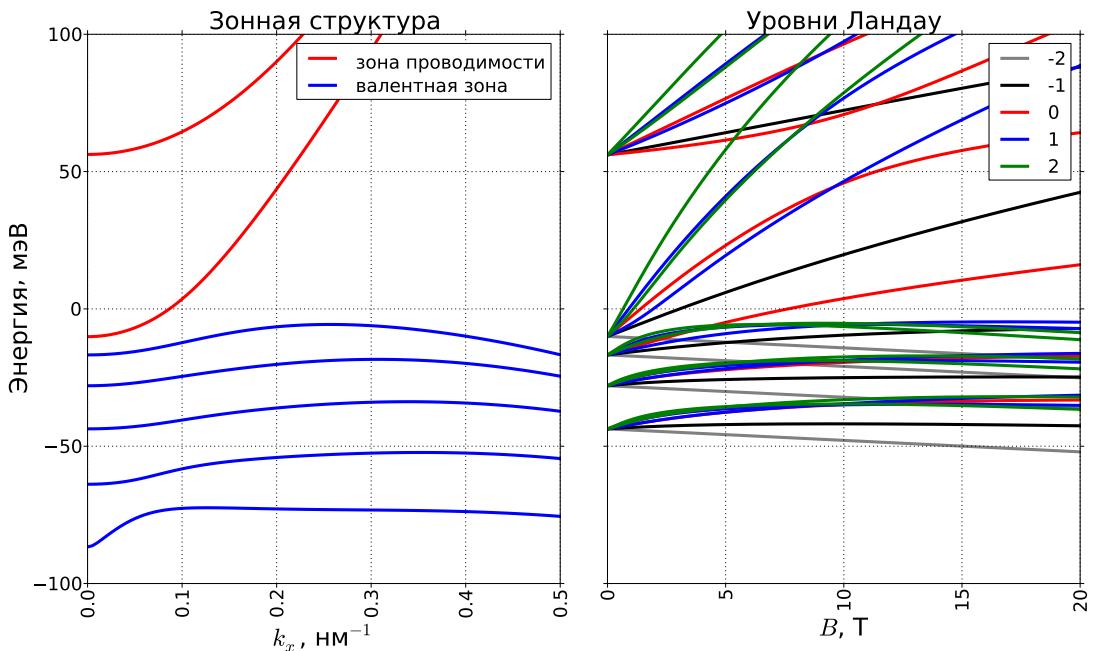


Рис. 2.8: Рассчитанная зонная структура и уровни Ландау квантовой ямы $\text{HgTe}/\text{Cd}_{0,7}\text{Hg}_{0,3}\text{Te}$ (013) толщиной 20 нм при $T = 0\text{K}$.

меняется (энергия уровня с $N = 0$ — возрастает, а уровня с $N = -2$ — уменьшается). В результате, при инвертированной зонной структуре эти уровни пересекаются.

Ещё одна особенность, на которую следует обратить внимание в инвертированной зонной структуре — увеличение энергии бокового максимума валентной зоны с ростом толщины ямы (сравните рис. 2.6 и 2.7). В достаточно широкой яме боковой максимум расположен выше центрального (рис. 2.7), т.е. яма является непрямозонной. Если сделать яму ещё шире, энергия бокового максимума валентной зоны может превысить энергию дна зоны проводимости (рис. 2.8). В такой яме благодаря перекрытию зон в равновесии может существовать электронный и дырочный двумерный газ, т.е. образец является *полуметаллом*.

Добавление небольшого количества кадмия в квантовую яму приводит к изменениям в зонной структуре. В частности, меняется критическая толщина и толщина при которой происходит переход к полуметаллическому состоянию. На диаграмме 2.9 показано как зонная структура зависит от ширины и состава квантовой ямы.

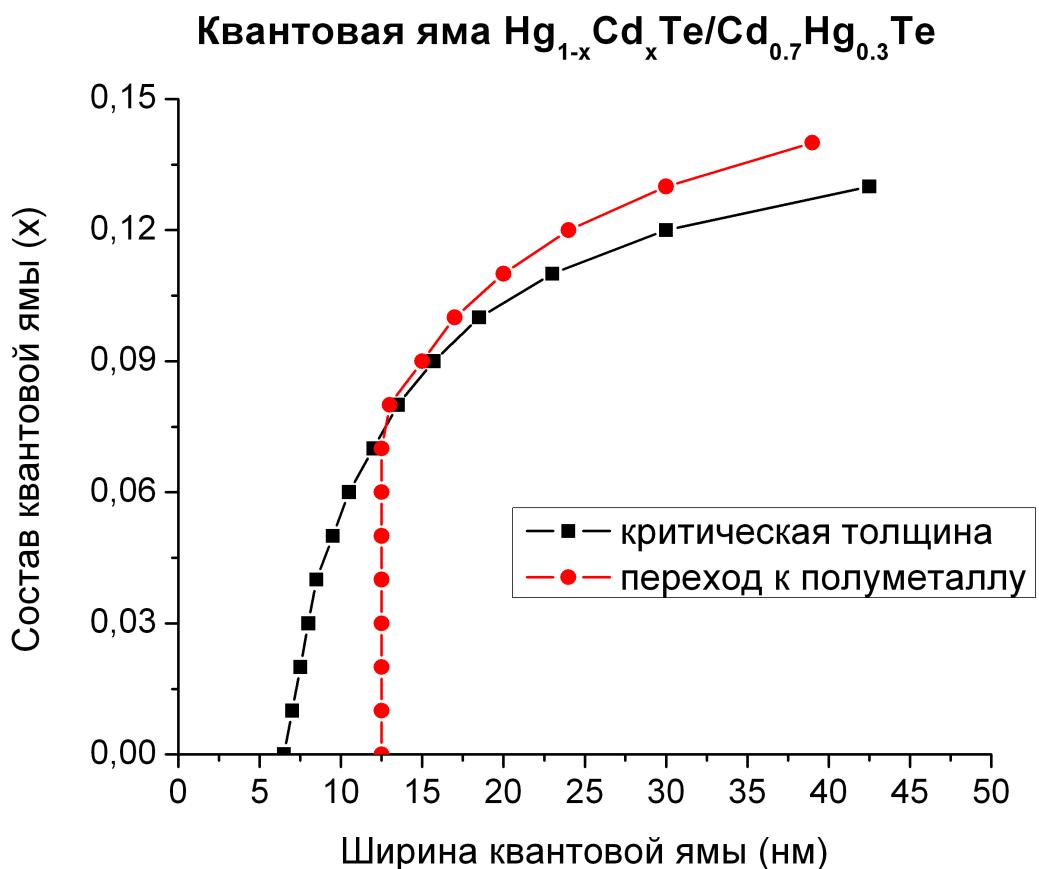


Рис. 2.9: Диаграмма типов зонной структуры квантовой ямы $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}/\text{Cd}_{0.7}\text{Hg}_{0.3}\text{Te}$ (013) в зависимости от ширины состава ямы при $T = 0\text{K}$.

Глава 3

Экспериментальное исследование зонной структуры квантовых ям HgCdTe/CdHgTe

3.1 Структура исследуемых образцов

Исследуемые образцы были выращены методом молекулярно-лучевой эпитаксии на полуизолирующей подложке GaAs (013) [10; 11]. Последовательно выращивались буферный слой ZnTe, релаксированный буфер CdTe, нижний барьерный слой Cd_yHg_{1-y}Te, квантовая яма Cd_xHg_{1-x}Te, верхний барьер Cd_yHg_{1-y}Te, и покровный слой CdTe (см. рис. 3.1). Толщина барьера составляла около 100 нм, а покровного слоя — около 50 нм. Толщина квантовой ямы в зависимости от образца варьировалась от 5 до 30 нм. В некоторых образцах с целью создания двумерного электронного газа в квантовой яме барьеры были легированы мелкими донорами (индием) симметрично с двух сторон от квантовой ямы.

Для интерпретации экспериментальных данных использовались расчёты зонной структуры и уровней Ландау, проведённые методом, описанным в главе 2.

3.2 Зонная структура квантовых ям HgCdTe/CdHgTe в отсутствие магнитного поля

3.2.1 Терагерцевая фотопроводимость узкозонных квантовых ям

Исследования терагерцовой фотопроводимости (ФП) проводились при температуре 4,2 и 77 К с помощью установки, схема которой представлена на рис. 3.2. При этом использовались образцы с характерными размерами 5 × 5 мм² с двумя полосковыми омическими контактами по краям. Образец располагался в световодной вставке в транспортный гелиевый или азотный сосуд Дьюара. Излучение подводилось к образцу

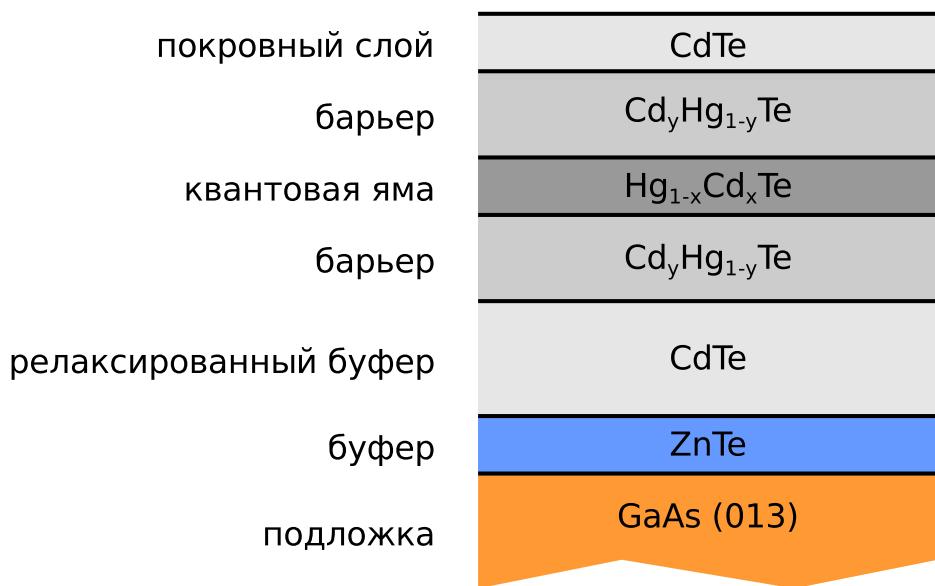


Рис. 3.1: Схема исследуемых образцов.

Таблица 3.1: Параметры квантовых ям Hg_{1-x}Cd_xTe/Cd_yHg_{1-y}Te (013). n — темновая концентрация носителей в зоне проводимости, измеренная магнитотранспортными методами.

№	Образец	Доля кадмия		Ширина ямы (нм)	n (см ⁻²)
		y	x		
1	091225-1	0,72	0,139	30	—
2	100708-1	0,646	0,154	30	—
3	100707-1	0,702	0,166	30	—
4	091217-1	0,72	0	7	$2,2 \cdot 10^{11}$
5	091222-1	0,7	0	8	$2,7 \cdot 10^{11}$
6	091223-1	0,62	0	8	$1,6 \cdot 10^{11}$
7	110623	0,62	0	5,6	$7,8 \cdot 10^{10}$
8	110624	0,62	0	5,9	$2,8 \cdot 10^{10}$
9	110615	0,65	0	20,2	—

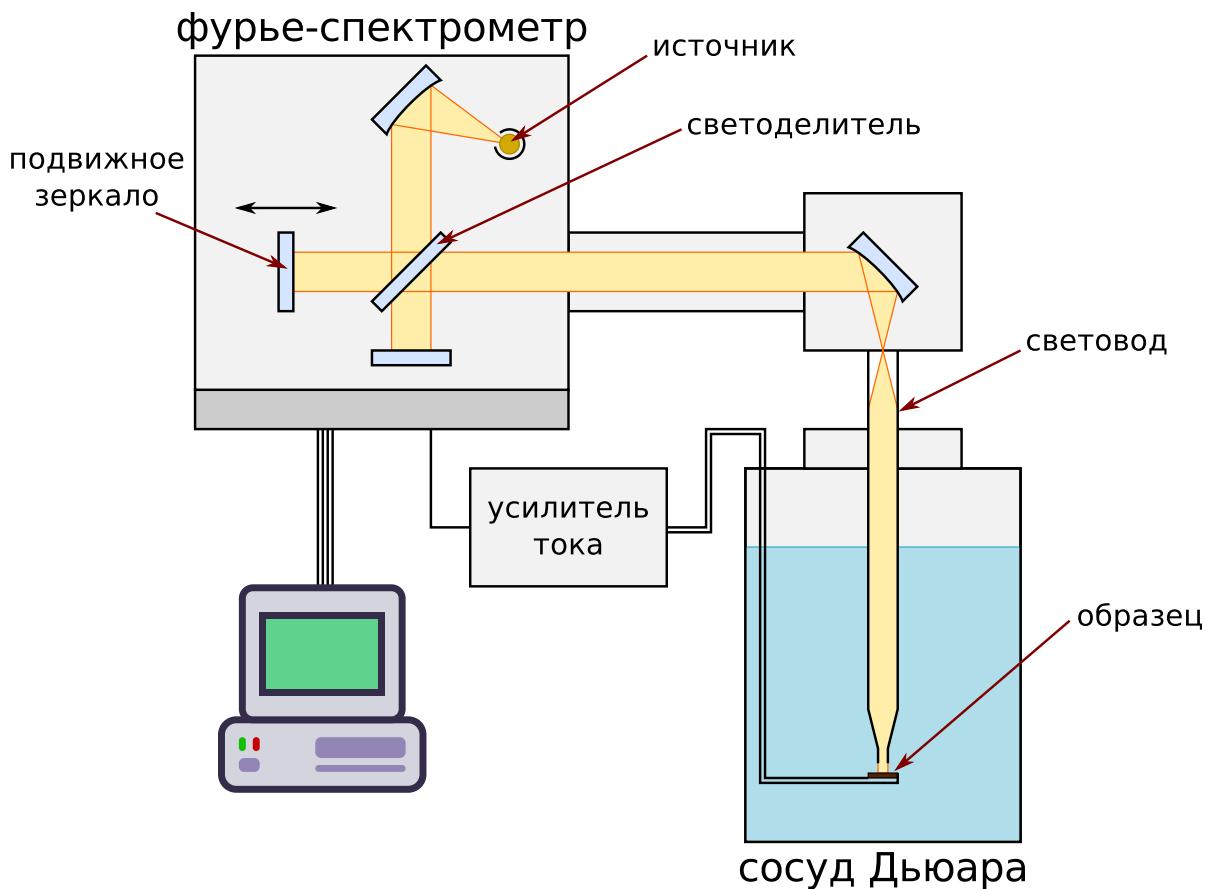


Рис. 3.2: Схема установки для измерения фотопроводимости.

по полированной трубе из нержавеющей стали. Измерения спектров фотопроводимости проводились с помощью фурье-спектрометра Bruker Vertex 80v. При этом использовался майларовый светоделитель толщиной 3 мкм, что в сочетании с фильтром (окном световодной вставки) из чёрного или «белого» (прозрачного) полиэтилена обеспечивало чувствительность установки в диапазоне $50\text{--}2000\text{ см}^{-1}$ (спектры пропускания фильтров изображены на рис. 3.3). Источником излучения служил глобар. В качестве источника смещения и предварительного усилителя использовался малошумящий токовый предуслитель SR570 фирмы «Stanford Research Systems», с выхода которого сигнал поступал на аналого-цифровой преобразователь спектрометра.

Измерения проводились для трёх нелегированных образцов с квантовой ямой шириной 30 нм и различной долей кадмия в яме (образцы 091225-1, 100708-1 и 100707-1 в таблице 3.1). Сопротивление образцов при $T = 4,2\text{ К}$ составляло 0,1–5 МОм.

На рис. 3.4 представлены спектры фотопроводимости исследуемых образцов, измеренные при $T = 4,2\text{ К}$ с использованием теплого фильтра из чёрного полиэтилена (прозрачного в дальнем и среднем ИК диапазонах, но отсекающего коротковолновое излучение глобара в видимой и ближней ИК области). В спектре самого узконаправленного

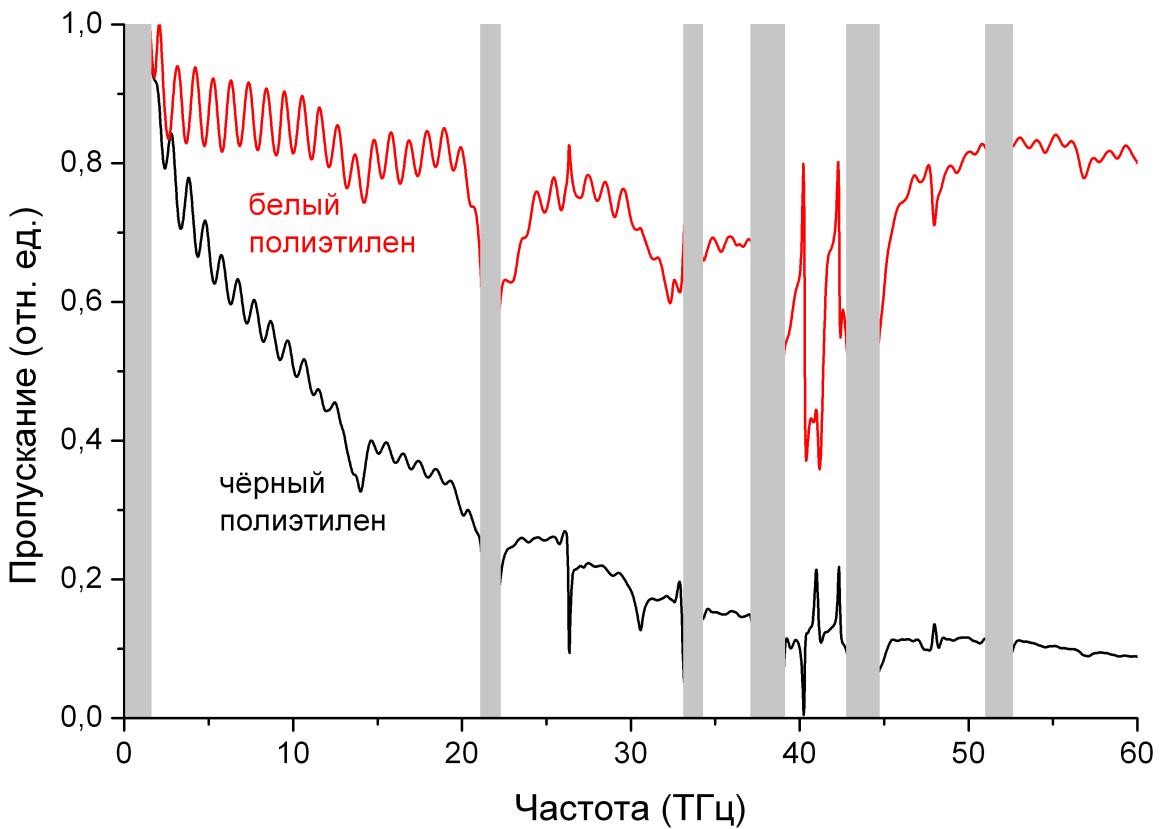


Рис. 3.3: Спектры пропускания излучения фильтра из белого полиэтилена (красный) и из чёрного полиэтилена (чёрный). Закрашенные полосы — области низкой чувствительности, обусловленные поглощением в полиэтиленовом окне используемого пироэлектрического приёмника и/или майларовом светоделителе фурье-спектрометра.

го образца 091225-1, наблюдается две мощных полосы фотопроводимости в области 2–9 ТГц, разделенных провалом в области 4 ТГц, обусловленным фононным поглощением излучения в верхнем барьере слое $Cd_yHg_{1-y}Te$ [70]. Минимум при 8,5 ТГц, наблюдавшийся в спектрах всех исследованных образцов, связан, очевидно, с сильным отражением в области остаточных лучей от подложки GaAs [71]. Далее с ростом частоты сигнал фотопроводимости «осциллирует» около постоянного уровня, что соответствует постоянству межзонной плотности состояний в двумерных системах. Эти осцилляции, как и резкие провалы в спектре фотопроводимости в области частот свыше 20 ТГц, связаны, очевидно, с полосами поглощения в полиэтилене (рис. 3.3). В спектре фотопроводимости образца 100708-1 с большим содержанием Cd в КЯ наблюдается лишь коротковолновая мощная полоса от 4,5 до 9 ТГц. Наконец, в самом широкозонном из образцов 100707-1 помимо относительно слабой фотопроводимости в области 4,5–7,5 ТГц наблюдается фотопроводимость с четко выраженной красной границей около

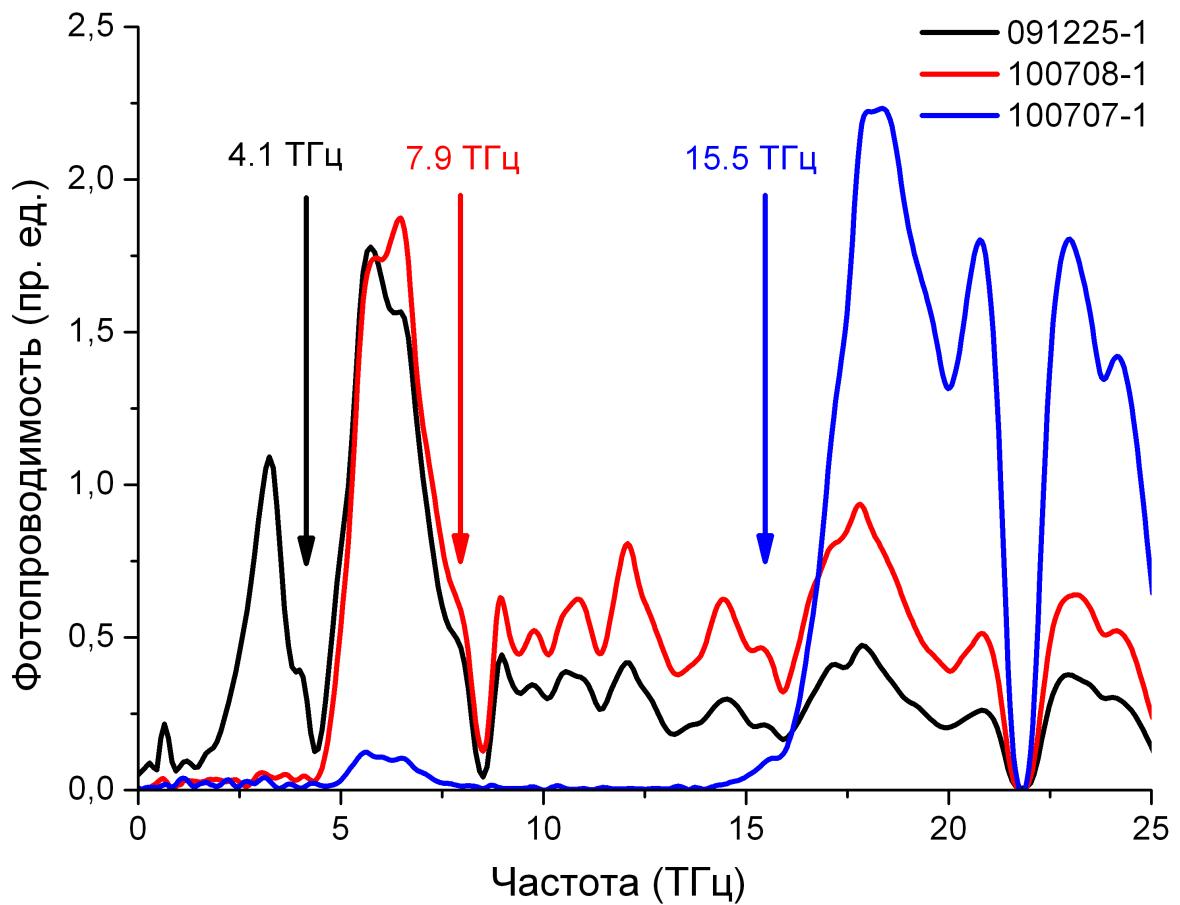


Рис. 3.4: Спектры ФП в образцах $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}/\text{Cd}_y\text{Hg}_{1-y}\text{Te}$ полученные при использовании в качестве окна световодной вставки чёрного полиэтилена. Стрелками отмечено рассчитанное положение красной границы межзонной ФП.

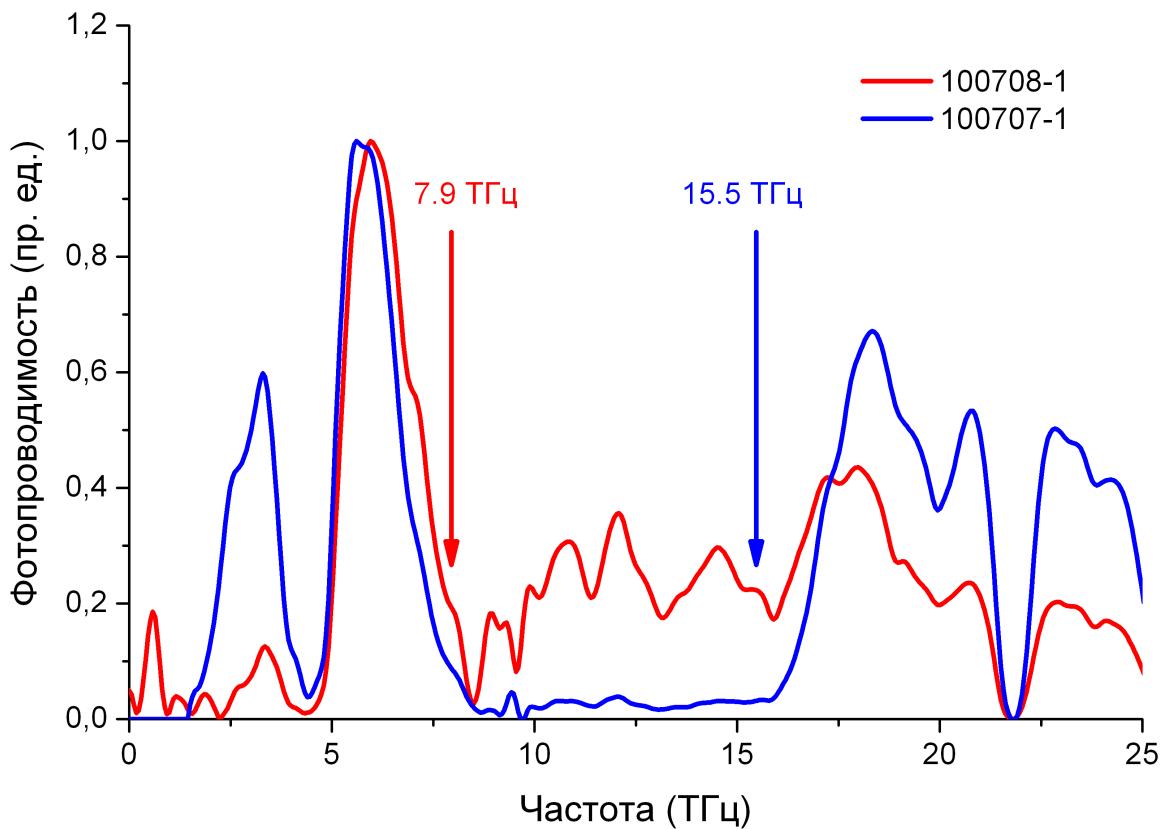


Рис. 3.5: Спектры ФП в образцах $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}/\text{Cd}_y\text{Hg}_{1-y}\text{Te}$ полученные при использовании в качестве окна световодной вставки белого полиэтилена. Стрелками отмечено рассчитанное положение красной границы межзонной ФП.

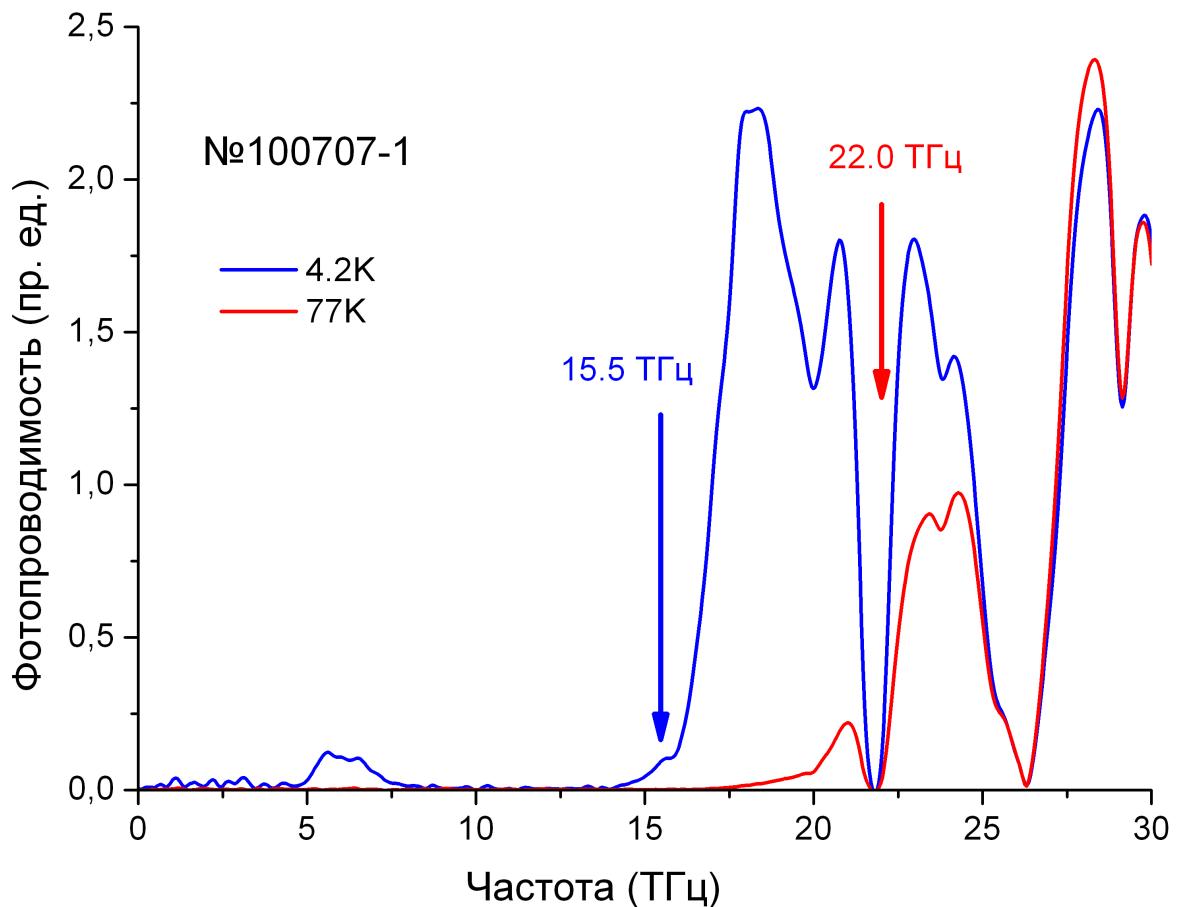


Рис. 3.6: Спектры фотопроводимости для образца 100707-1, измеренные с фильтрами из чёрного полиэтилена при $T = 4,2\text{ К}$ и $T = 77\text{ К}$. Стрелками отмечено рассчитанное положение красной границы межзонной ФП.

15,5 ТГц, которую естественно связать с «включением» межзонных оптических переходов.

На рис. 3.5 представлены спектры фотопроводимости образцов 100707-1 и 100708-1, измеренные с использованием фильтра из прозрачного в видимой и ближней ИК «белого» полиэтилена. Из сопоставления спектров на рис. 3.4, 3.5 видно, что засветка образцов коротковолновым излучением глобара приводит в появлению в спектрах на рис. 3.5 тех же полос длинноволновой ФП, которые исходно (т.е. при использовании фильтра из чёрного полиэтилена) наблюдались в спектре ФП образца 091225-1.

Спектры фотопроводимости для образца 100707-1, измеренные при температуре $T = 4,2$ К и $T = 77$ К с фильтрами из чёрного полиэтилена, приведены на рис. 3.6. Хорошо видно, что ширина запрещённой зоны увеличивается с температурой. При температуре 77 К не наблюдалось длинноволнового сигнала ФП.

Поскольку в спектре образца 100707-1 межзонная ФП определенно отделена от этих длинноволновых полос большим спектральным интервалом (9–15 ТГц, см. рис. 3.5), естественно предположить, что наблюдаемые мощные длинноволновые полосы ФП связаны не с межзонными оптическими переходами, а с фотовозбуждением неких центров или ловушек.

3.2.2 Исследование зоны проводимости с помощью циклотронного резонанса

Исследование циклотронного резонанса (ЦР) в слабых магнитных полях позволяет получить информацию о плотности состояний носителей заряда вблизи уровня Ферми. Такие исследования применительно к гетероструктурам с квантовыми ямами $\text{HgTe}/\text{Cd}_y\text{Hg}_{1-y}\text{Te}$ уже проводились в работах [72—74], однако полученные в них экспериментальные данные не сопоставлялись с результатами расчётов, а зависимость циклотронной массы от толщины ямы и концентрации носителей не была изучена достаточно подробно. В данной работе мы исследуем ЦР в образцах 091217-1 ($d_{\text{QW}} = 7$ нм) и 091223-1 ($d_{\text{QW}} = 8$ нм) при различных значениях концентрации электронов.

Спектры ЦР изучались при температуре 4,2 К с помощью установки, схема которой представлена на рис. 3.7. В эксперименте использовались разнообразные монохроматические источники, такие как квантовые каскадные лазеры (ККЛ) терагерцового диапазона и лампы обратной волны (ЛОВ) (частоты: 0,44–1,13 ТГц). Излучение по полированному металлическому световоду подводилось к образцу размером 5×5 мм², расположенному внутри сверхпроводящего соленоида при температуре жидкого гелия. Для регистрации прошедшего через образец излучения использовались приёмни-

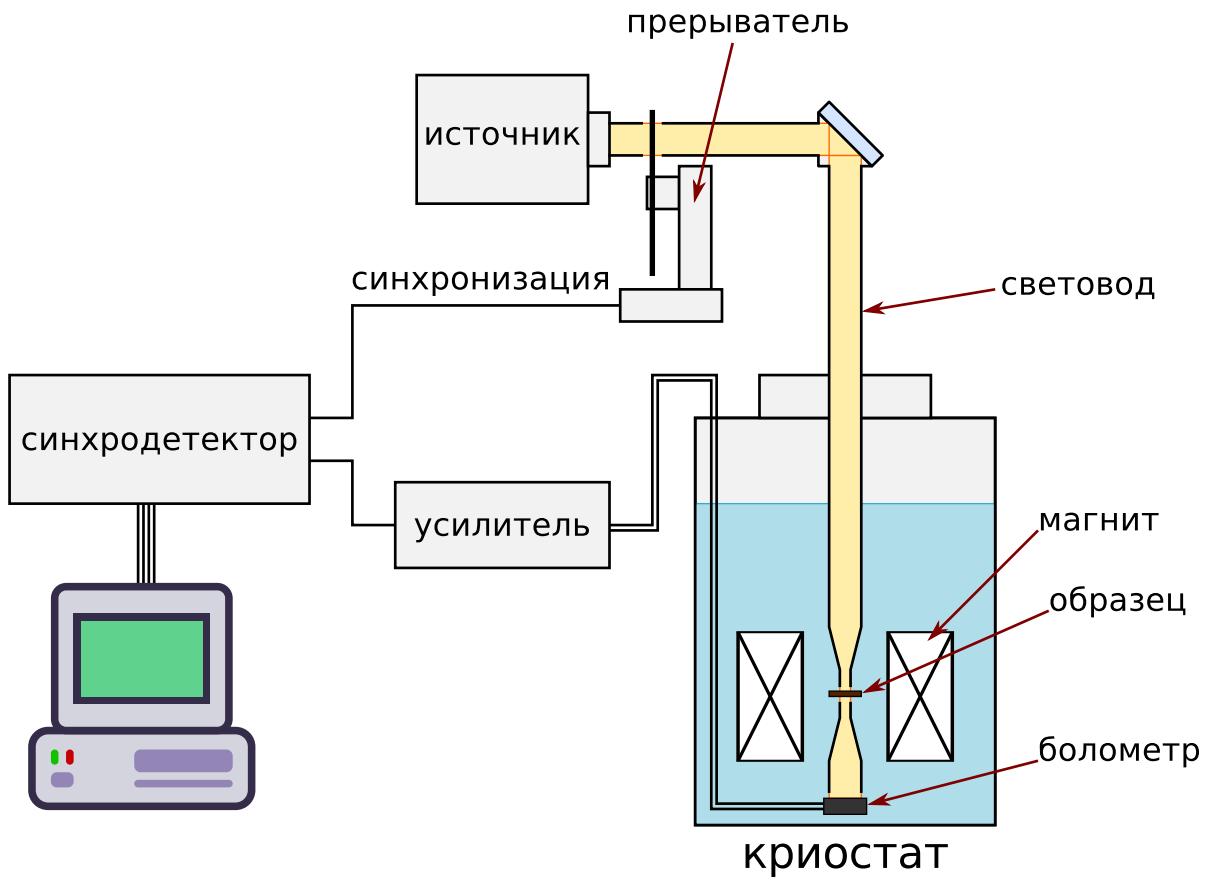


Рис. 3.7: Схема установки для измерения циклотронного резонанса с помощью узкополосного источника при автоматической развертке магнитного поля.

ки Ge:Ga и n-GaAs. При измерениях с монохроматическими источниками для регистрации сигнала использовалась стандартная схема синхронного детектирования с модуляцией излучения, попадающего на образец, при помощи прерывателя. Все измерения проводились в фарадеевской конфигурации: плоскость образца была перпендикулярна магнитному полю и направлению распространения излучения. Запись спектров ЦР осуществлялась при автоматической развертке магнитного поля.

В этом разделе мы также представляем измерения ЦР сделанные А. А. Ластовкиным и А. В. Иконниковым как с использованием ККЛ так и методами фурье-спектроскопии [A1]. В ходе эксперимента имелась возможность подсвечивать исследуемые структуры излучением инфракрасного или синего светодиода, что позволяло изменять концентрацию носителей в квантовой яме. Светодиод располагался в жидком гелии близи образца. Концентрация двумерных электронов определялась одновременно со спектром пропускания путём магнитотранспортных измерений в конфигурации ван дер Пау (для образцов с четырьмя контактами по углам) или по двухконтактной схеме (для образцов с двумя полосковыми контактами по краям).

Теоретическая зависимость циклотронной массы от концентрации носителей вычислялась на основе результатов расчётов закона дисперсии зоны проводимости $E_c(\mathbf{k}_\perp)$ (см. главу 2). При этом считалось, что зона проводимости обладает аксиальной симметрией, что является достаточно точным приближением для гетероструктур с квантовыми ямами на основе $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ (см., например, работу [9]). В этом случае помимо энергии Ферми E_F можно ввести волновое число Ферми k_F :

$$E_F = E_c(k_F).$$

Энергия и волновое число Ферми определяются концентрацией носителей в зоне проводимости.

Циклотронная масса по определению равна:

$$m_c = \frac{eB}{\hbar c \omega},$$

где B — магнитное поле, а ω — частота пика ЦР. Циклотронная масса и концентрация носителей в зоне двукратно вырожденной по спину связаны с k_F следующими выражениями:

$$\begin{aligned} m_c &= \frac{\hbar k_F}{v(k_F)}; \\ n &= \frac{k_F^2}{2\pi}; \end{aligned}$$

$v(k_F)$ — групповая скорость электрона на уровне Ферми, которая задаётся выражением

$$v(k_F) = \frac{1}{\hbar} \left. \frac{\partial E_c}{\partial k} \right|_{k_F}.$$

Отсюда получаем

$$m_c = \frac{\sqrt{2\pi}\hbar}{v(k_F(n))} \sqrt{n}.$$

В широкозонных квантовых ямах (например, GaAs/AlGaAs) с параболическим законом дисперсии электронов циклотронная масса не зависит от концентрации носителей. В узкозонных квантовых ямах на основе $\text{Cd}_x\text{Hg}_{1-x}\text{Te}$ из-за сильной непараболичности масса должна расти с увеличением концентрации. В этом разделе мы изучаем два узкозонных образца 091217-1 и 091223-1 (см. таблицу 3.1).

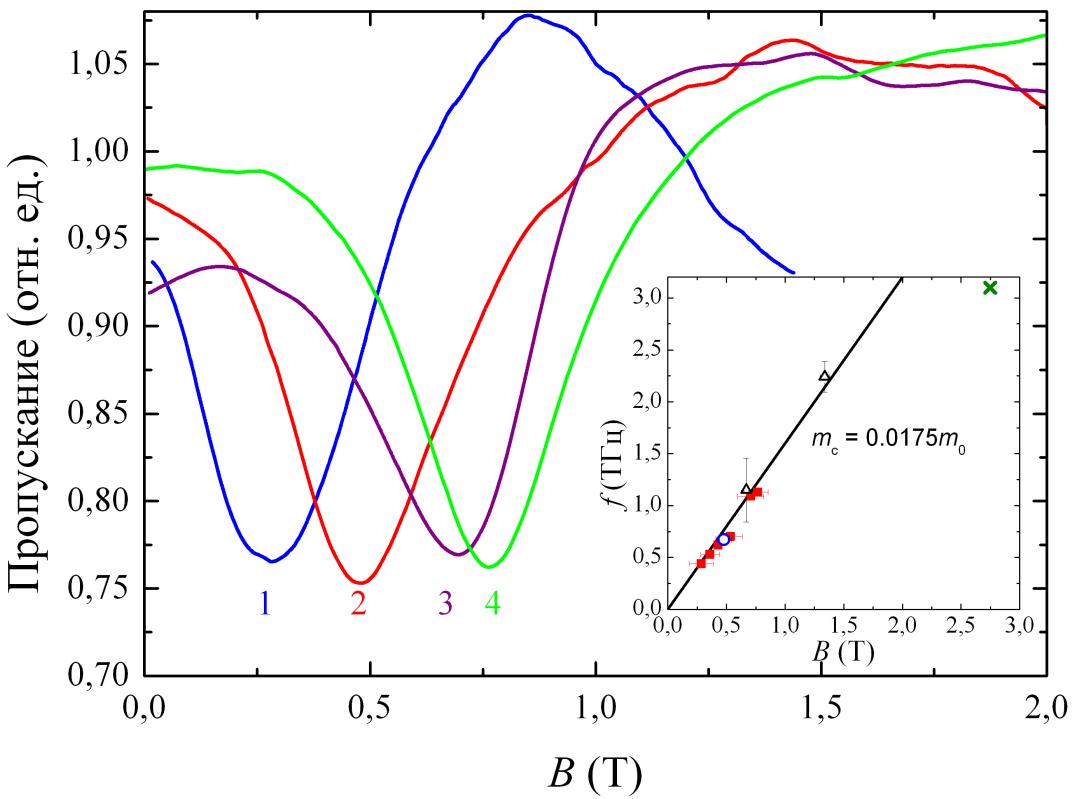


Рис. 3.8: Типичные спектры ЦР в образце 091217-1 при $n_s = 2,2 \times 10^{11} \text{ см}^{-2}$ измеренные с помощью ЛОВ; f , THz: 1 — 0,44, 2 — 0,68, 3 — 1,09, 4 — 1,13. На вставке: положения линий ЦР, измеренные различными методами (ЛОВ — горизонтальные «засечки», фурье-спектрометр — вертикальные «засечки», 3,1 ТГц ККЛ — крест); m_0 — масса свободного электрона.

На рисунке 3.8 приведены спектры ЦР образца 091217-1 при концентрации двухмерных электронов $n_s = 2,2 \cdot 10^{11} \text{ см}^{-2}$, измеренной при различных частотах излучения ЛОВ. Данные о положении линии циклотронного резонанса, полученные различными экспериментальными методами, представлены на вставке. Хорошо видно, что все данные, кроме полученных с помощью 3,1 ТГц ККЛ ложатся на прямую, выходящую из начала координат, которая соответствует квазиклассическому случаю, когда резонансное поле (или частота) определяются циклотронной массой носителей на уровне Ферми. Для результатов, полученных с помощью 3,1 ТГц ККЛ при больших магнитных полях, когда (согласно результатам расчётов) заполнено только три уровня Ландау, квазиклассическое приближение, по-видимому, не работает.

На рисунке 3.9 представлены спектры ЦР образца 091217-1, измеренные А. А. Ластовкиным и А. В. Иконниковым с помощью ККЛ, работающего на частоте 2,61 ТГц,

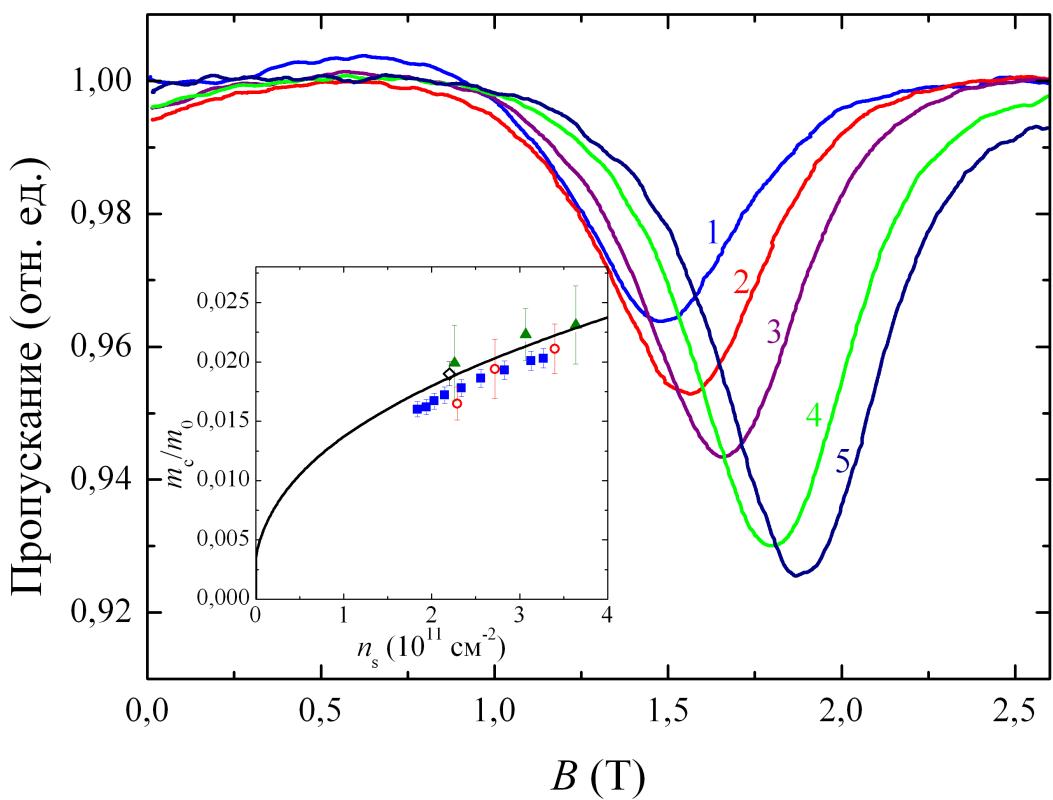


Рис. 3.9: Спектры ЦР электронов в образце 091217-1, измеренные А. А. Ластовкиным и А. В. Иконниковым с помощью ККЛ на частоте 2,61 ТГц при различных значениях концентрации электронов n_s (10^{11} см^{-2}): 1 — 1,89, 2 — 2,06, 3 — 2,39, 4 — 2,88, 5 — 3,32. На вставке: рассчитанная зависимость циклотронной массы на уровне Ферми от концентрации (сплошная линия) и экспериментальные значения циклотронной массы, полученные с помощью 2,61 ТГц ККЛ (квадраты), ЛОВ (треугольники) и фурье-спектрометра (круги); m_0 — масса свободного электрона.

при различных значениях концентрации электронов. Видно, что интегральная интенсивность линии ЦР увеличивается с ростом концентрации носителей. Сама линия при этом сдвигается вправо, что указывает на увеличение циклотронной массы. На вставке показаны значения циклотронной массы, измеренные с помощью различных методов, представленные для сравнения вместе с теоретической зависимостью циклотронной массы на уровне Ферми от концентрации носителей. Легко видеть, что экспериментально определённая зависимость m_c от концентрации носителей в целом хорошо согласуется с расчётом; однако, в среднем, расчётные значения циклотронной массы слегка превышают измеренные.

На рисунке 3.10 представлены спектры ЦР образца 091223-1, измеренные с

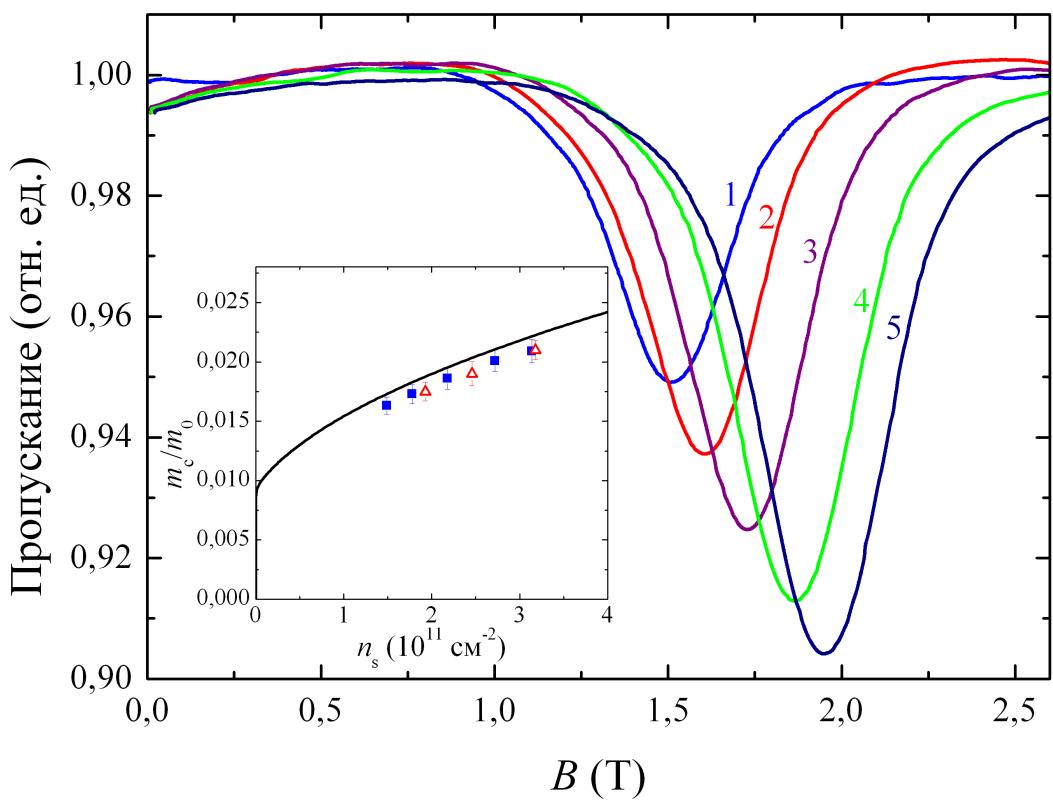


Рис. 3.10: Спектры ЦР электронов в образце 091223-1, измеренные А. А. Ластовкиным и А. В. Иконниковым с помощью ККЛ на частоте 2,61 ТГц при различных значениях концентрации электронов n_s (10^{11} см^{-2}): 1 — 1,51, 2 — 1,82, 3 — 2,24, 4 — 2,82, 5 — 3,18. На вставке: рассчитанная зависимость циклотронной массы на уровне Ферми от концентрации (сплошная линия) и экспериментальные значения циклотронной массы, полученные с помощью 2,61 ТГц ККЛ (квадраты), ЛОВ (треугольники) и фурье-спектрометра (круги); m_0 — масса свободного электрона.

А. А. Ластовкиным и А. В. Иконниковым помостью ККЛ, излучающего на частоте 2,61 ТГц. Аналогично образцу 091217-1 (рис 3.9), интегральная интенсивность линии ЦР увеличивается с ростом концентрации, а сама линия сдвигается вправо, что соответствует увеличению циклотронной массы. Полные данные об экспериментальной и теоретической зависимости циклотронной массы на уровне Ферми от концентрации носителей показана на вставке. Видно, что теоретическая оценка циклотронной массы снова слегка превосходит экспериментальные данные для измерений как с помощью ЛОВ так и с помощью ККЛ.

Сравнение значений циклотронной массы для двух образцов (рис. 3.9 и 3.10) показывает, что при одинаковой концентрации электронов циклотронная масса увеличи-

вается с толщиной квантовой ямы, в то время как хорошо известно, что для материалов с неинвертированной зонной структурой имеет место противоположная зависимость.

В целом, полученные результаты хорошо согласуются с расчётом, выполненными в квазиклассическом приближении. Такое поведение связано с высокой концентрацией носителей в зоне проводимости, что соответствует большому числу заполненных уровней Ландау при резонансном магнитном поле. Изучение ЦР гетероструктур на основе $\text{Cd}_x\text{Hg}_{1-x}\text{Te}$ в квантующих магнитных полях требует либо образцов с меньшей концентрацией носителей, либо больших магнитных полей, а следовательно, больших частот излучения.

3.3 Уровни Ландау в квантовых ямах $\text{HgTe}/\text{Cd}_y\text{Hg}_{1-y}\text{Te}$

Магнитное квантование энергетического спектра в гетероструктурах $\text{HgCdTe}/\text{CdHgTe}$ с квантовыми ямами исследовалось по спектрам магнитопоглощения в терагерцовом диапазоне методом фурье-спектроскопии в постоянном магнитном поле (схема экспериментальной установки приведена на рисунке 3.11). Измерения проводились в Национальной лаборатории сильных магнитных полей (LNCMI) в Гренобле (магнитное поле B до 11 Т) и в лаборатории Шарля Кулона (LCC) в Университете Монпелье 2 (UM2) (поле до 16 Т).

В ходе эксперимента излучение фурье-спектрометра (спектральное разрешение 0,5 мэВ) с помощью параболического зеркала через полиэтиленовый фильтр направлялось в металлический световод, по которому достигало образца, расположенного в гелиевом криостате в постоянном поле сверхпроводящего магнита. Прошедшее через образец излучение регистрировалось с помощью болометра, расположенного при $T = 4,2$ К на вставке непосредственно за образцом (измерения в Гренобле) либо ниже, вне магнитного поля (измерения в Монпелье). Измерения проводились в геометрии Фарадея.

Все представленные спектры были нормированы на пропускание образца при $B = 0$. Спектры полученные в Гренобле были также поделены на отношение фонового сигнала (без образца) при ненулевом и нулевом магнитном поле. Последнее было сделано для того, чтобы исключить наклон, вызванный влиянием поля на болометр.

Результаты измерений сопоставляются с результатами расчётов энергии уровней Ландау, выполненных в аксиальном приближении методом описанным в главе 2.

Для того чтобы достичь лучшего согласования данных теории и эксперимента об

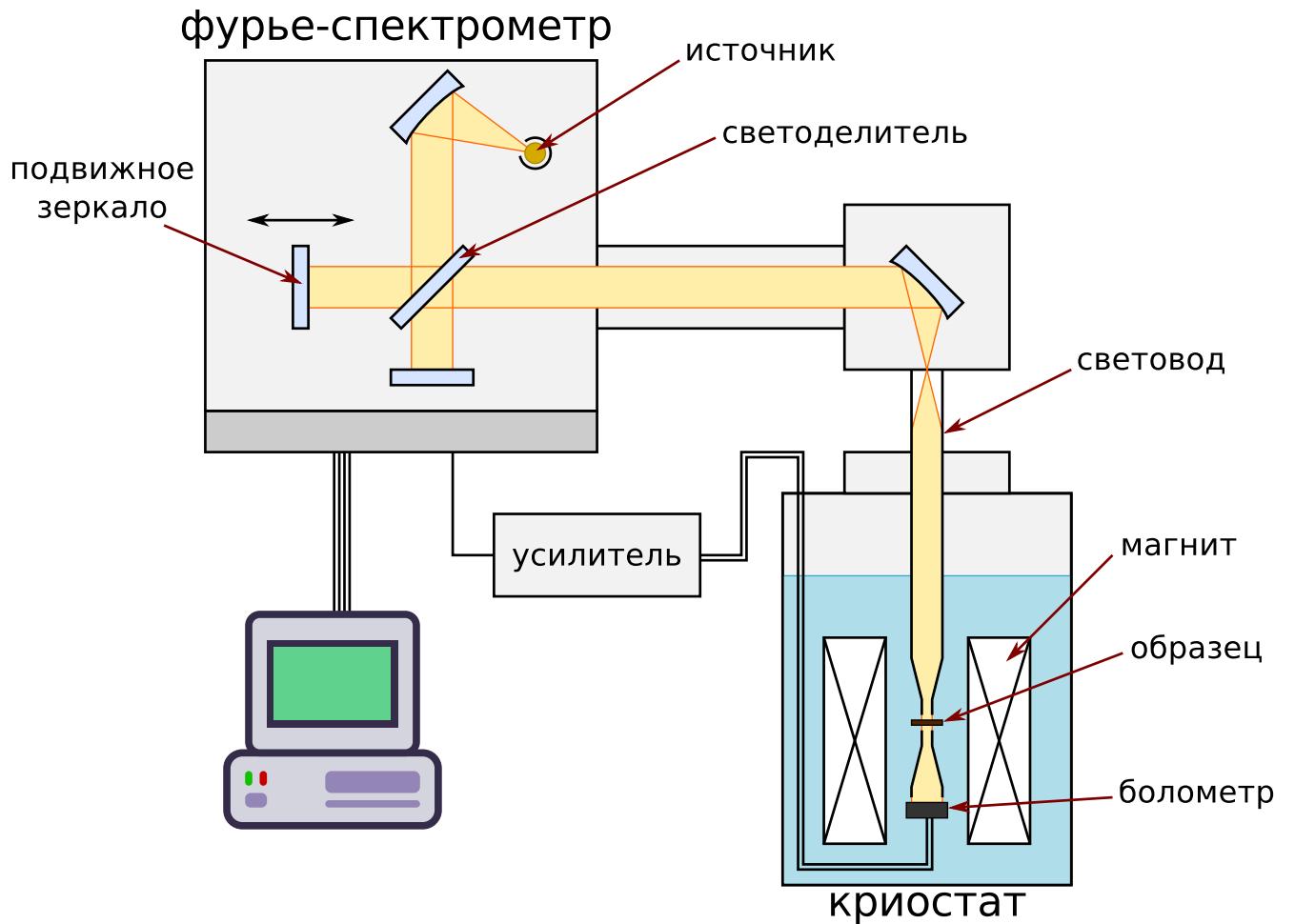


Рис. 3.11: Схема установки для измерения циклотронного резонанса с помощью фурье-спектрометра.

энергии переходов мы изменили некоторые параметры модели. Новые значения параметров перечислены в таблице 3.2.

Первый из них — разрыв валентной зоны между CdTe и HgTe $VBO = E_v(HgTe) - E_v(CdTe)$. Поскольку этот параметр не может быть измерен непосредственно он обычно вычисляется путём сопоставления экспериментальных данных с результатами расчётов. Значение, которое мы используем, лежит в диапазоне погрешности, указанном в работе [53] (570 ± 60 мэВ).

Второй изменённый параметр — параметр Кейна $E_p = 2m_0P^2/\hbar^2$. Как было отмечено в разделе 1.6, значение E_p зависит от базисных функций и может быть изменено поскольку эти функции выбираются произвольно (так чтобы другие параметры согласовывались с зонным спектром объёмного полупроводника). Мы меняли параметры E_p и F одновременно, так чтобы оставалась неизменной эффективная масса m_c

Таблица 3.2: Значения подгоночных параметров, использованные для интерпретации эксперимента.

Параметры	CdTe	HgTe
E_v (eV)	-0,62	0
E_p (eV)	20,8	20,8
F	-0,64	1,77

в зоне проводимости объёмного полупроводника, задаваемая следующей формулой:

$$\frac{1}{m_c} = \frac{1}{m_0} \left((2F + 1) + \frac{E_p}{3E_g} + \frac{E_p}{6(E_g + \Delta)} \right).$$

На последующих рисунках результаты расчётов, полученные с исходными параметрами (таблица 2.5) обозначены пунктирными линиями, а результаты полученные с изменёнными параметрами (таблица 3.2) обозначены сплошными линиями.

3.3.1 Циклотронный резонанс и межзонные переходы в квантующих магнитных полях в образцах с нормальной зонной структурой

На рис. 3.12 приведены рассчитанные зависимости энергии уровней Ландау от магнитного поля для образца с неинвертированной зонной структурой (расчёты выполнены для образца 110623). Кроме того, на рисунке показаны переходы, которые должны наблюдаться в спектрах ЦР при небольшой концентрации носителей. В рамках электродипольного приближения в геометрии Фарадея разрешены только переходы при которых номер уровня Ландау N меняется на единицу. Эти переходы мы, вслед за авторами работы [4], будем обозначать маленькими греческими буквами. Линии α в спектрах поглощения относятся к переходам между уровнями Ландау с $N = 0$ и $N = 1$, линии β — к переходам между $N = -2$ и $N = -1$, а линии γ — к переходам между $N = -1$ и $N = 0$. Знак минус после буквенного обозначения означает, что переход идёт с уменьшением N на единицу. Отметим, что переход β^- может наблюдаться только в образцах р-типа и не может происходить одновременно с γ^- .

Спектры пропускания, измеренные для образца 110623, ($d_{QW} = 5,6$ нм) для различных значений магнитного поля изображены на рис. 3.13, а для образца 110624 ($d_{QW} = 5,9$ нм) — на рис. 3.14. На рис. 3.14 видны линии переходов α^- , (от 40 до 50 мэВ) и β (от 50 до 70 мэВ). Кроме того, в слабых магнитных полях видна неизвестная линия между 25 и 32 мэВ, которая обозначена как U_1 . Пунктирные линии изоб-

ражены для удобства, а заштрихованные области соответствуют полосам остаточных лучей, где образцы абсолютно непрозрачны (от 16 до 21 мэВ для $\text{Cd}_x\text{Hg}_{1-x}\text{Te}$ и от 30 до 37 мэВ для подложки GaAs).

На рис. 3.16 показано положение наблюдаемых переходов в образце 110624 в зависимости от магнитного поля. Переход α не наблюдается, а линия α^- видна как ниже так и выше области остаточных лучей от 0,5 до 11 Т. В ходе предварительных измерений образцы 110623 и 110624 продемонстрировали отрицательную фотопроводимость при облучении видимым светом. Поэтому неконтролируемая засветка в ходе измерений с помощью фурье-спектрометра могла привести к сдвигу уровня Ферми в запрещённую зону, в результате чего должны наблюдаться лишь межзонные переходы α^- и β . Как видно из рис. 3.16, эти линии лучше всего согласуются с экспериментальными результатами.

Неизвестная линия U_1 (самая сильная линия в спектре) может наблюдаться начи-

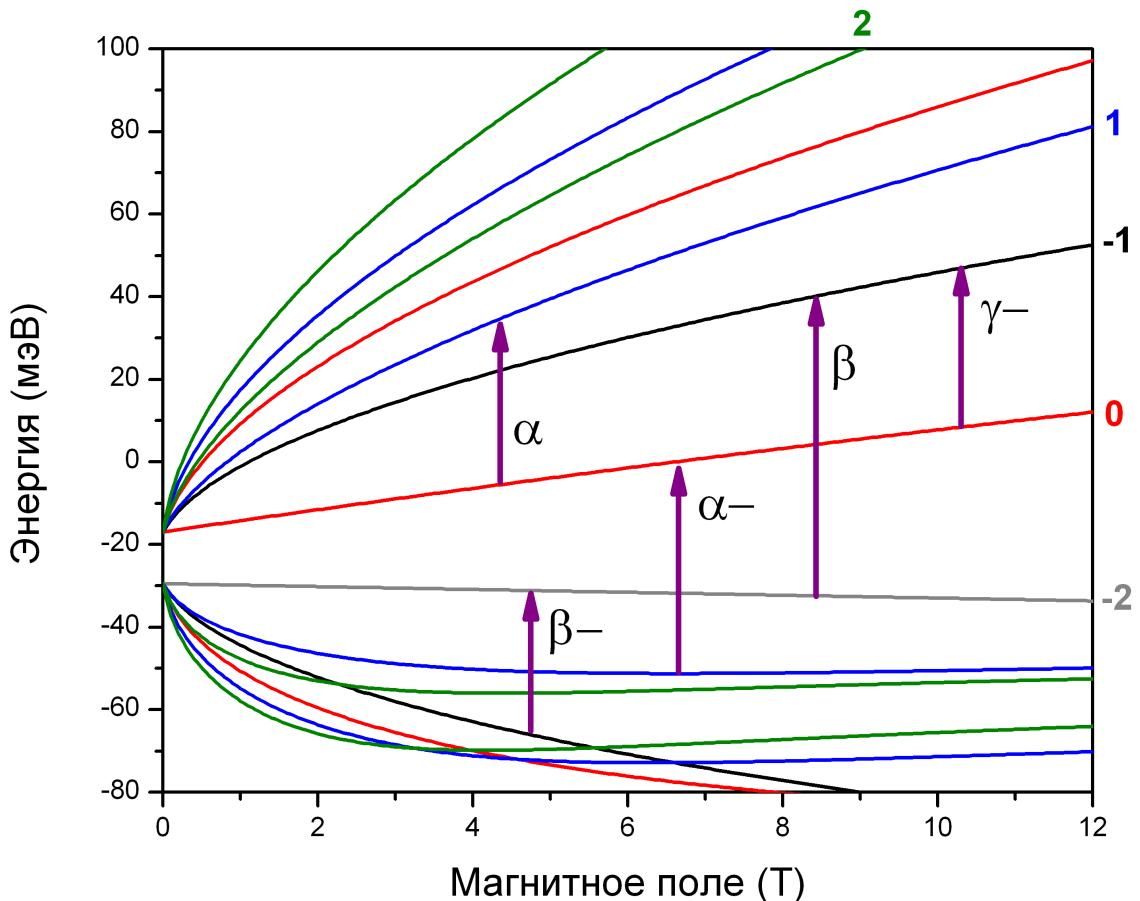


Рис. 3.12: Рассчитанная дисперсия уровней Ландау для образца 110623. Стрелками отмечены некоторые разрешённые переходы.

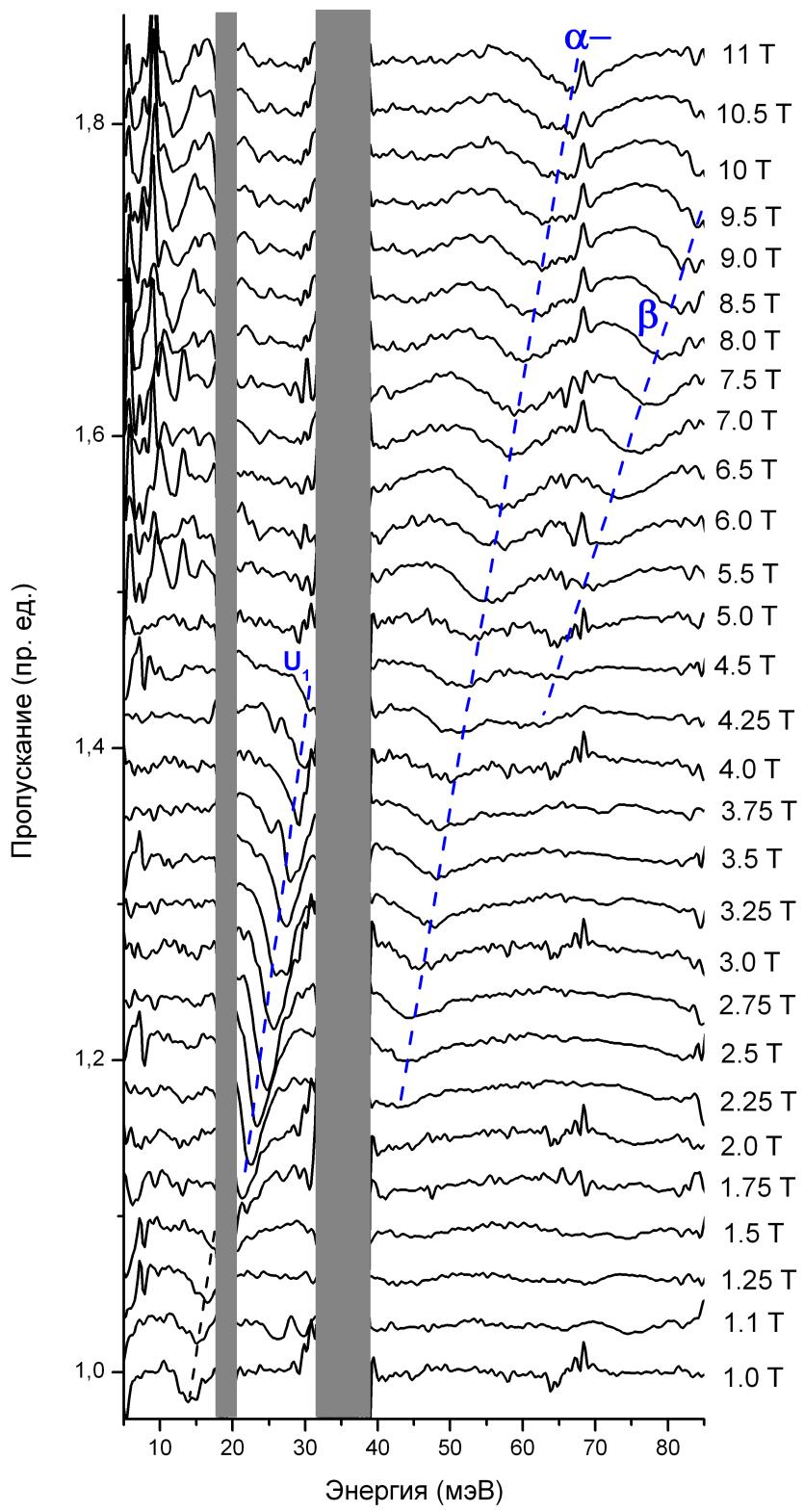


Рис. 3.13: Спектры пропускания образца 110623, измеренные с помощью фурье-спектрометра. Обозначения наблюдаемых линий соответствуют обозначениям переходов на рис. 3.12. Обозначения U_1 и U_2 соответствуют неизвестной линии перехода. Заштрихованные полосы — области остаточных лучей. Спектры сдвинуты по вертикали для наглядности.

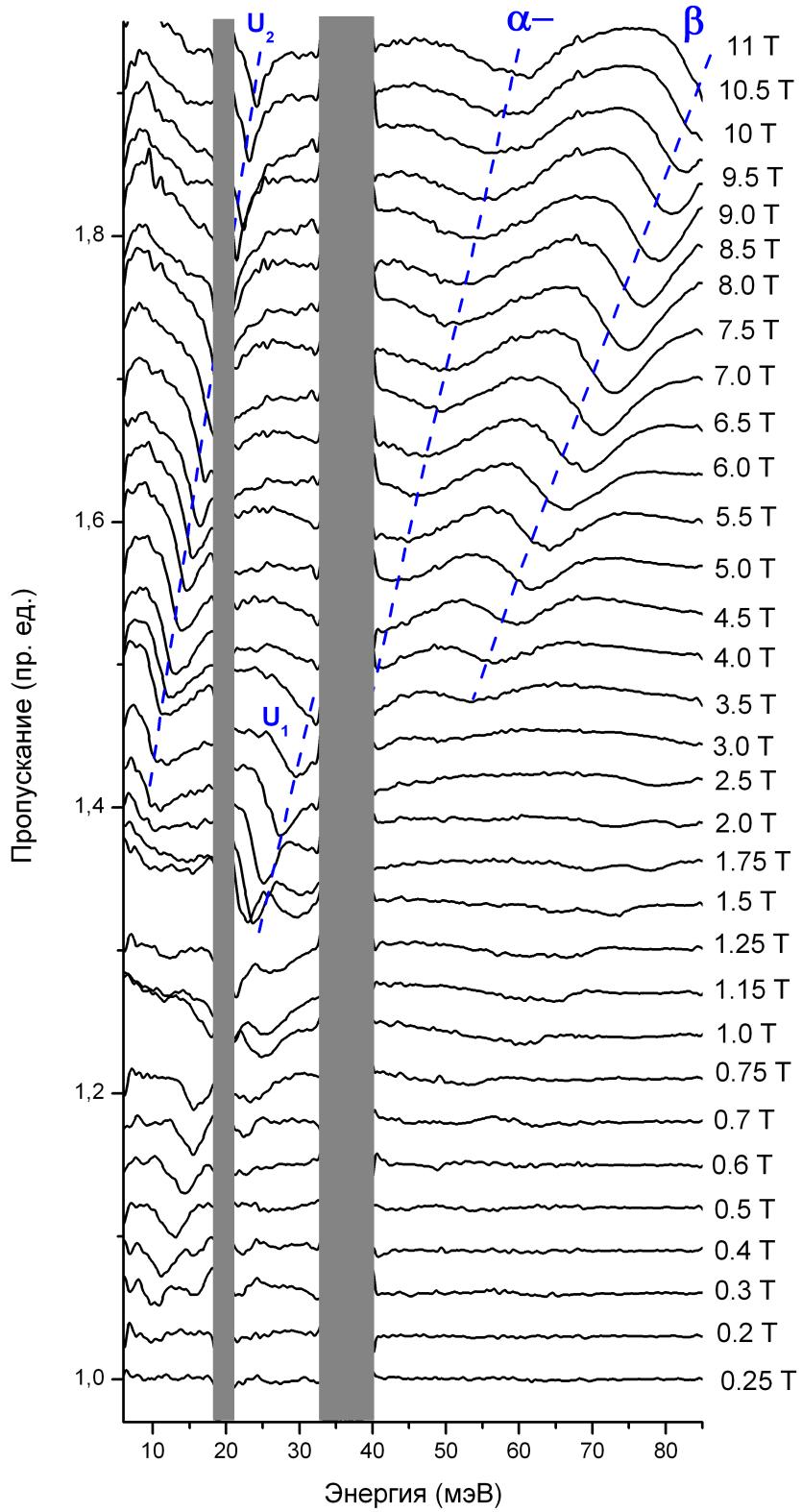


Рис. 3.14: Спектры пропускания образца 110624, измеренные с помощью фурье-спектрометра. Обозначения наблюдаемых линий соответствуют обозначениям переходов на рис. 3.12. Обозначение U_1 соответствует неизвестной линии перехода. Заштрихованные полосы — области остаточных лучей. Спектры сдвинуты по вертикали для наглядности.

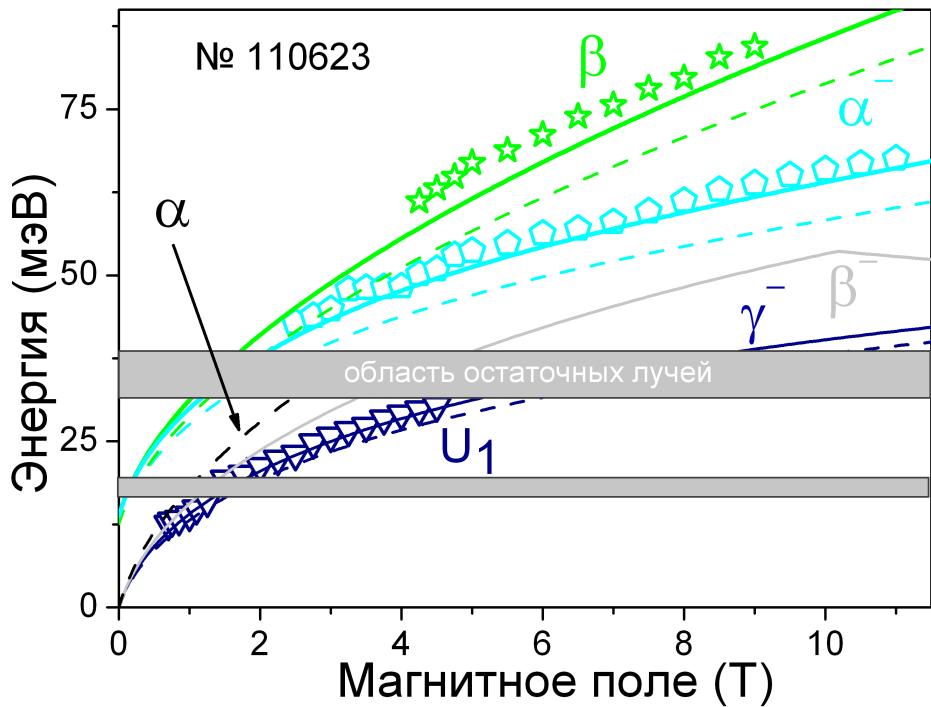


Рис. 3.15: Положение пиков наблюдаемых переходов в образце 110623. Сплошные линии — результаты расчётов с изменёнными параметрами (таблица 3.2). Пунктирные линии — результаты расчётов с исходными параметрами(таблица 2.5).

ная с очень слабых магнитных полей (0,3 Т) до 3,5 Т ниже второй области остаточных лучей. Её возможная природа обсуждается ниже. Вторая неизвестная линия, обозначенная U_2 , видна от 3 до 11 Т. В работе [A2] эта низкочастотная линия связывалась с переходами с участием примесных состояний.

На рис. 3.15 показано положение наблюдаемых переходов в образце 110623 в зависимости от магнитного поля. Как и в образце 110624 (рис. 3.16) видны линии α^- и β . Неизвестная линия U_1 также наблюдается в полях от 2 до 4,5 Т. Линия α^- видна над областью остаточных лучей вплоть до 11 Т. Переход β наблюдается от 4 до 9 Т и его энергия хорошо согласуется с результатами расчётов. Переход U_1 также виден ниже области остаточных лучей вплоть до слабых полей (0,6 Т).

Для обоих образцов с неинвертированной зонной структурой (110623 и 110624) имеет место хорошее согласование между экспериментальным положением линии U_1 и теоретическим результатом для линии γ^- . Однако, даже без учёта того факта, что мы не видим переход α , начинающийся с того же уровня что и γ^- , рассчитанная сила осциллятора для перехода γ^- на пять порядков меньше чем у переходов α^- и β , а сле-

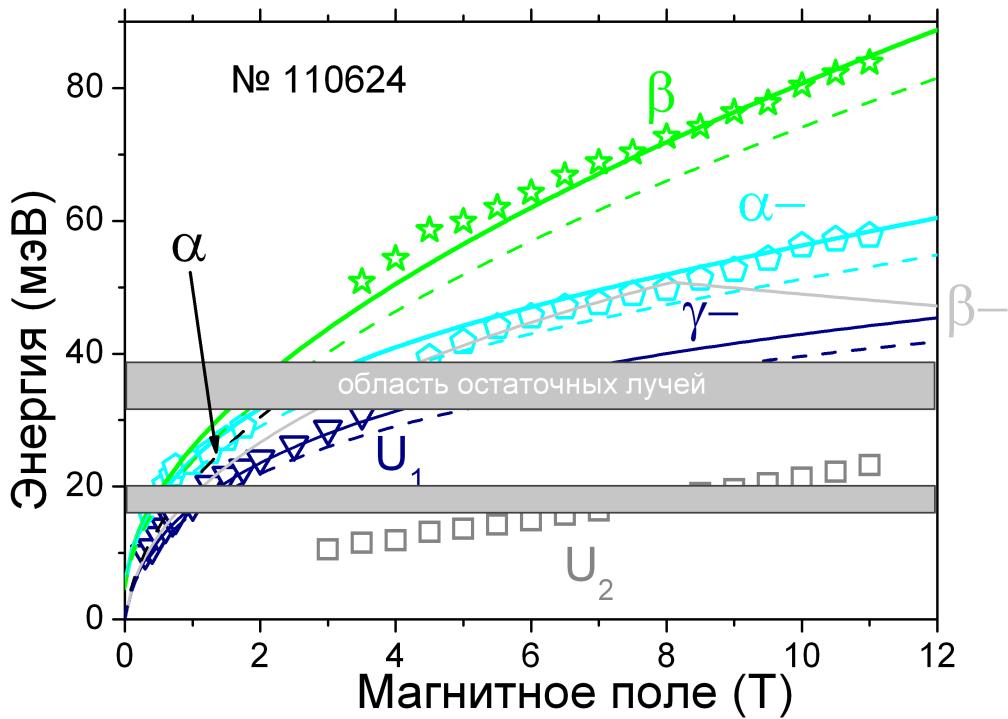


Рис. 3.16: Положение пиков наблюдаемых переходов в образце 110624. Сплошные линии — результаты расчётов с изменёнными параметрами (таблица 3.2). Пунктирные линии — результаты расчётов с исходными параметрами(таблица 2.5).

довательно, этот переход не должен наблюдаться в нашей конфигурации эксперимента. С другой стороны, теоретическая линия β^- также близка к экспериментальному положению линии U_1 . Сила осциллятора β^- сравнима с таковой для других наблюдаемых линий α^- и β . Более того, в обоих образцах переход β^- исчезает, когда появляется переход β , как и ожидается при пересечении уровня Ферми и уровня Ландау с $N = -2$. Однако, при такой интерпретации согласование теории и эксперимента не очень хорошо для обоих образцов и поэтому мы не можем утверждать, что U_1 соответствует β^- .

Другая возможность состоит в том, что вместо перехода γ^- или β^- линия U_1 связана с переходом между уровнями примесей или дефектов, привязанными к соответствующим уровням Ландау. Флуктуации ширины квантовой ямы также могли бы привести к нарушению правил отбора в этих образцах с очень узкими ямами (около 9 размеров элементарной ячейки), что сделало бы возможным запрещённые (в идеальной яме) переходы.

3.3.2 Циклотронный резонанс и межзонные переходы в квантующих магнитных полях в образцах с инвертированной зонной структурой

На рис. 3.17 приведены рассчитанные зависимости энергии уровней Ландау от магнитного поля для образца с инвертированной зонной структурой (расчёты выполнены для образца 091223-1). Переходы, которые должны наблюдаться в спектрах ЦР при небольшой концентрации носителей в рамках электродипольного приближения в геометрии Фарадея показаны стрелками. Как уже было отмечено в разделе 2.4.3, структура уровней Ландау для неинвертированных и инвертированных образцов вблизи критической толщины ямы качественно отличается лишь положением уровня с $N = 0$ и $N = -2$, ближайших к запрещённой зоне. В образцах с неинвертированной зонной структурой уровень с $N = 0$ принадлежит зоне проводимости, а $N = -2$ — валентной зоне. В образцах с инвертированной зонной структурой — наоборот, $N = 0$ принадлежит валентной зоне, а $N = -2$ — зоне проводимости.

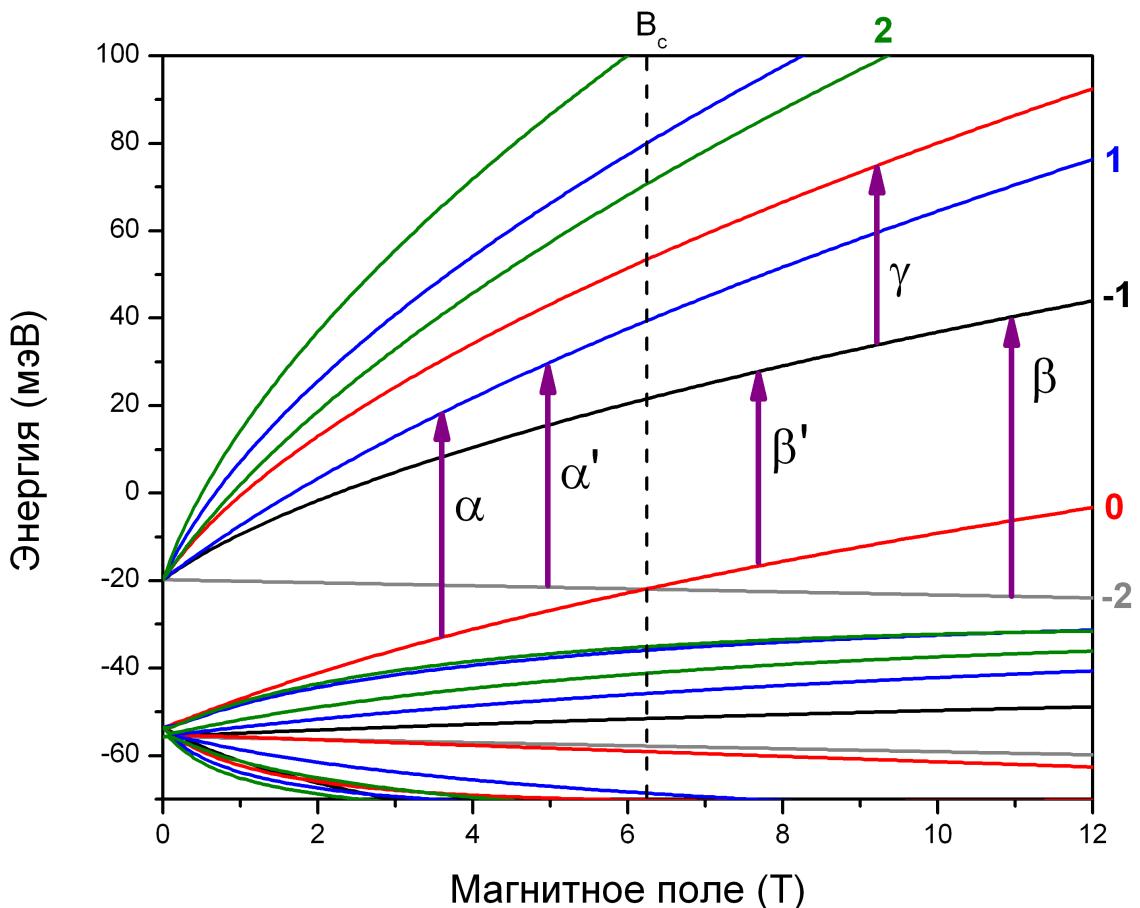


Рис. 3.17: Рассчитанная дисперсия уровней Ландау для образца 091223-1 с инвертированной зонной структурой. Стрелками отмечены некоторые разрешённые переходы.

Мы будем использовать одни и те же обозначения для переходов в обоих типов образцов, а именно: α — переход с $N = 0$ на $N = 1$, β — переход с $N = -2$ на $N = -1$ и т.д. В отличие от образцов с нормальной зонной структурой, переход α здесь является межзонным, так как начинается с уровня $N = 0$, принадлежащего валентной зоне. Переход β , соответственно, является внутризонным переходом в зоне проводимости.

Согласно последним данным [50], линия α расщепляется вблизи точки пересечения уровней Ландау с $N = 0$ и $N = -2$ в критическом магнитном поле B_c . Согласно интерпретации данной в работе [50], которая представляется наиболее вероятной, расщепление связано с тем, что уровни Ландау с $N = 0$ и $N = -2$ взаимодействуют и вместо пересечения для них имеет место антипересечение. Такое взаимодействие, помимо появления энергетической щели между уровнями, должно привести к смешиванию их волновых функций, в результате чего переходы с обоих уровней $N = 0, -2$ на уровень с $N = 1$ оказываются разрешёнными вблизи $B = B_c$. Действительно, из-за того что компонента $N = 0$ присутствует в обоих уровнях правила отбора разрешают переход в $N = 1$ с любого из них. То же самое верно и для компоненты $N = -2$, так что переходы с обоих уровней разрешены и на уровень с $N = -1$. Последнее означает, что помимо линии α ($0 \rightarrow 1$) должна расщепиться ещё и линия β ($-2 \rightarrow -1$), однако, расщепление этой линии не было обнаружено в работе [50].

В рамках аксиальной модели невозможно учесть взаимодействие уровней Ландау с разными значениями квантового числа N . Тем не менее, мы всё же можем использовать наши расчёты для интерпретации эксперимента, поскольку взаимодействие уровней, может оказаться заметное влияние на их энергию только вблизи точки пересечения $B = B_c$. Для обозначения запрещённых в рамках аксиальной модели переходов мы введём следующие обозначения: α' для перехода $-2 \rightarrow 1$ и β' для перехода $0 \rightarrow -1$. Переход β' не является запрещённым правилами отбора по квантовому числу N . Однако, его начальный и конечный уровни совпадают с таковыми для перехода γ^- , который, является запрещённым согласно расчётам его силы осциллятора (см. предыдущий раздел). Мы будем использовать обозначение β' вместо γ^- , чтобы подчеркнуть тот факт, что переход связан с подмешиванием волновых функций уровня $N = -2$ к уровню $N = 0$.

Расщепление линии α в работе [50] было обнаружено методом фурье-спектроскопии в стационарном магнитном поле, который позволяет получить подробную информацию о поведении линий ЦР в широком диапазоне частот и магнитных полей. С помощью данного метода нами было исследовано три образца $\text{HgTe}/\text{Cd}_y\text{Hg}_{1-y}\text{Te}$ с

инвертированной зонной структурой и толщиной ямы 7 нм для одного из них и 8 нм для двух других, отличающихся составом и степенью легирования барьеров (образцы 091217-1, 091222-1 и 091223-1, см. таблицу 3.1).

Спектры пропускания измеренные для образца 091217-1 ($d_{QW} = 7$ нм) для различных значений магнитного поля изображены на рис. 3.18. На рис. 3.19 показано положение наблюдаемых переходов в образце 091217-1 в зависимости от магнитного поля. В слабых магнитных полях (до 3 Т) видна линия поглощения, обозначенная закрашенными квадратами, которая линейно зависит от B . Эта линия связана с циклотронным резонансом и двумерном электронном газе в квазиклассическом пределе.

Линия, начинающаяся от 4 Т и обозначенная на рис. 3.19 треугольниками, соответствует переходу γ с уровня $N = -1$ на $N = 0$ в зоне проводимости. Она наблюдается как выше так и ниже полосы остаточных лучей подложки GaAs. Линия внутризонного поглощения β (с $N = -2$ на $N = -1$ в зоне проводимости), обозначенная звёздочками, видна в диапазоне от 4,5 до 11 Т. Линия, обозначенная кругами и наблюдаемая в том же диапазоне (4,5–11 Т) связана с переходом α .

Для того, чтобы переход был возможен, нужно чтобы начальный уровень Ландау был заполнен электронами хотя бы частично, а на конечном уровне были свободные состояния. В полях меньше 4 Т конечные уровни $N = 1$ и $N = -1$ для переходов α и β , по-видимому, полностью заняты электронами, и потому эти переходы не видны в слабых полях. В данном образце расчётная величина критического поля B_c составляет 3,25 Т, и мы не можем наблюдать расщепление линий α и β , так как данные переходы в интересующей нас области запрещены принципом Паули.

В образце 091222-1 значение критического поля B_c составляет примерно 6 Т. Спектры пропускания данного образца приведены на рис. 3.20, а также (для полей близких к критическому) на рис. 3.21. В области, где, согласно расчётам, должен наблюдаться переход α видны два близких пика, обозначенные квадратами и кругами, которые мы связываем с расщепление этого перехода. Хорошо видно, что с ростом магнитного поля интенсивность более низкочастотного пика растёт, а интенсивность более высокочастотного — убывает. Это связано с тем, что вдали от критического поля в волновой функции уровня $N = -2$ практически отсутствует добавка волновых функций состояния $N = 0$ и вероятность перехода α' (которому соответствует низкочастотный пик) мала. По мере приближения к критическому полю эта добавка растёт пока энергии переходов α и α' (вычисленные в аксиальном приближении) не совпадут по достижении этого поля. Выше критического поля переходу α' соответствует более

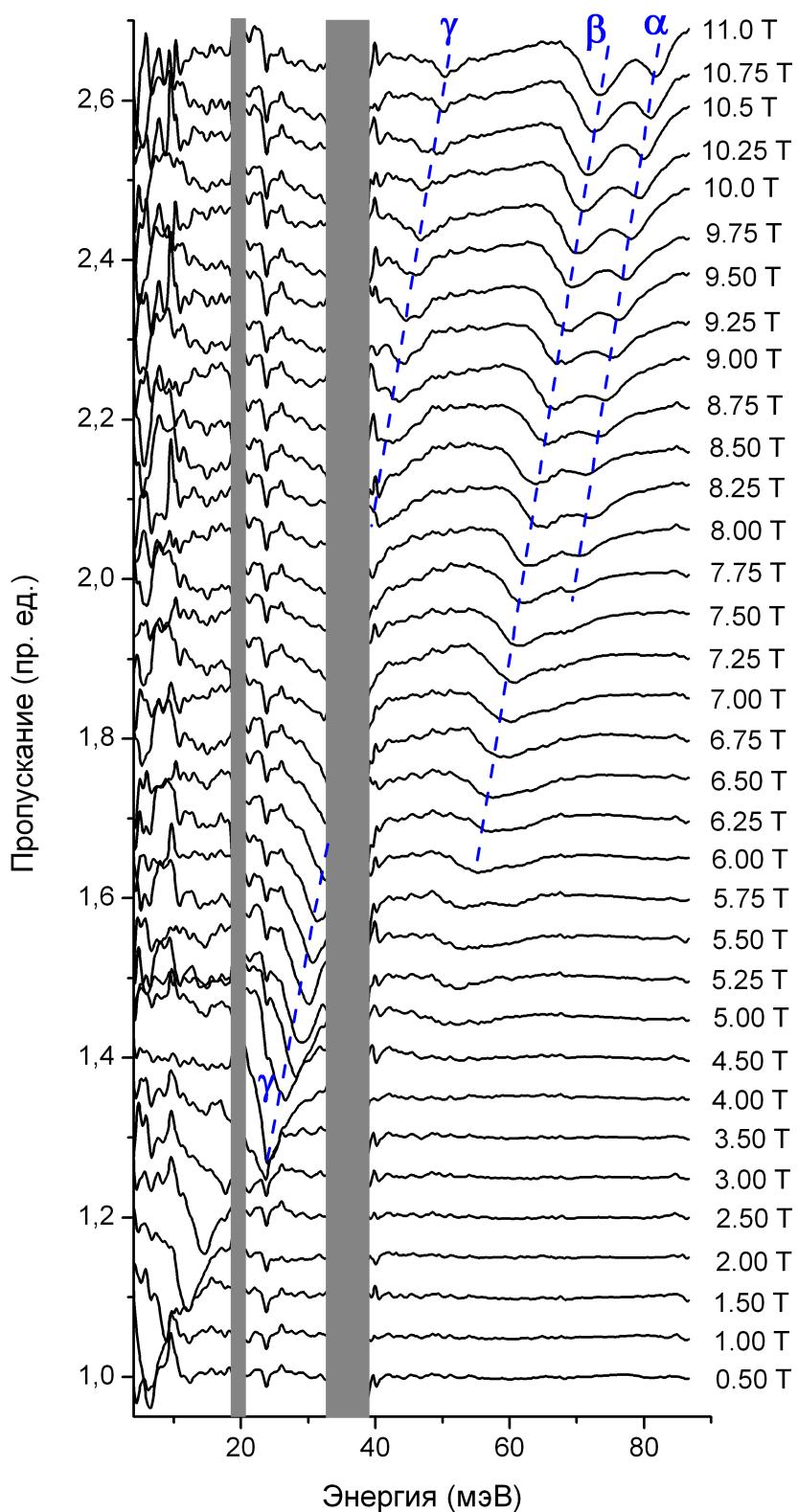


Рис. 3.18: Измеренные спектры пропускания образца 091217-1. Обозначения наблюдаваемых линий соответствуют обозначениям переходов на рис. 3.17. Заштрихованные полосы — области остаточных лучей. Спектры сдвинуты по вертикали для наглядности.

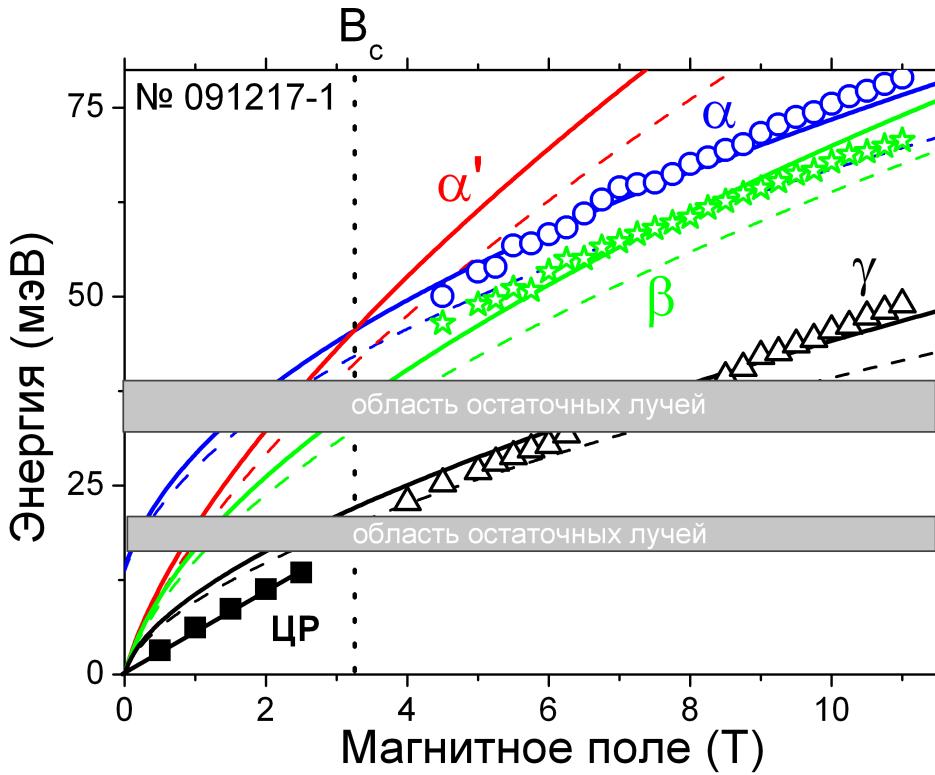


Рис. 3.19: Положение пиков наблюдаемых переходов в образце 091217-1. Сплошные линии — результаты расчётов с изменёнными параметрами (таблица 3.2). Пунктирные линии — результаты расчётов с исходными параметрами (таблица 2.5).

высокочастотный пик и его интенсивность начинает убывать, в то время как интенсивность низкочастотного пика (α при $B > B_c$) растёт.

На рис. 3.22 показано положение пиков ЦР в образце 091222-1. Закрашенные звёздочки и круги соответствуют экспериментальным точкам, полученным в магнитных полях до 16 Т в Teralab Монпелье, остальные точки получены в полях до 11 Т в LNCMI в Гренобле.

Линия ЦР в квазиклассическом пределе (закрашенные квадраты) и линия γ (треугольники) обнаружены приблизительно при тех же значениях магнитного поля что и в образце 091217-1. Линия внутризонного поглощения β (с $N = -2$ на $n = -1$), обозначенная на рис. 3.22 звёздочками, видна в диапазоне от 8 до 16 Т. Даже если расщепление этой линии, вызванное антипересечением уровней Ландау, имеет место, мы не могли его наблюдать, поскольку в окрестности $B = B_c$ линия не видна из-за заполнения уровня $N = -1$ электронам.

Линии α и α' , обозначенные на рис. 3.22 кругами и квадратами, видны в диапазоне от 4,5 до 12 Т. Их антипересечение происходит в критическом поле $B_c = 6$ Т и энергии

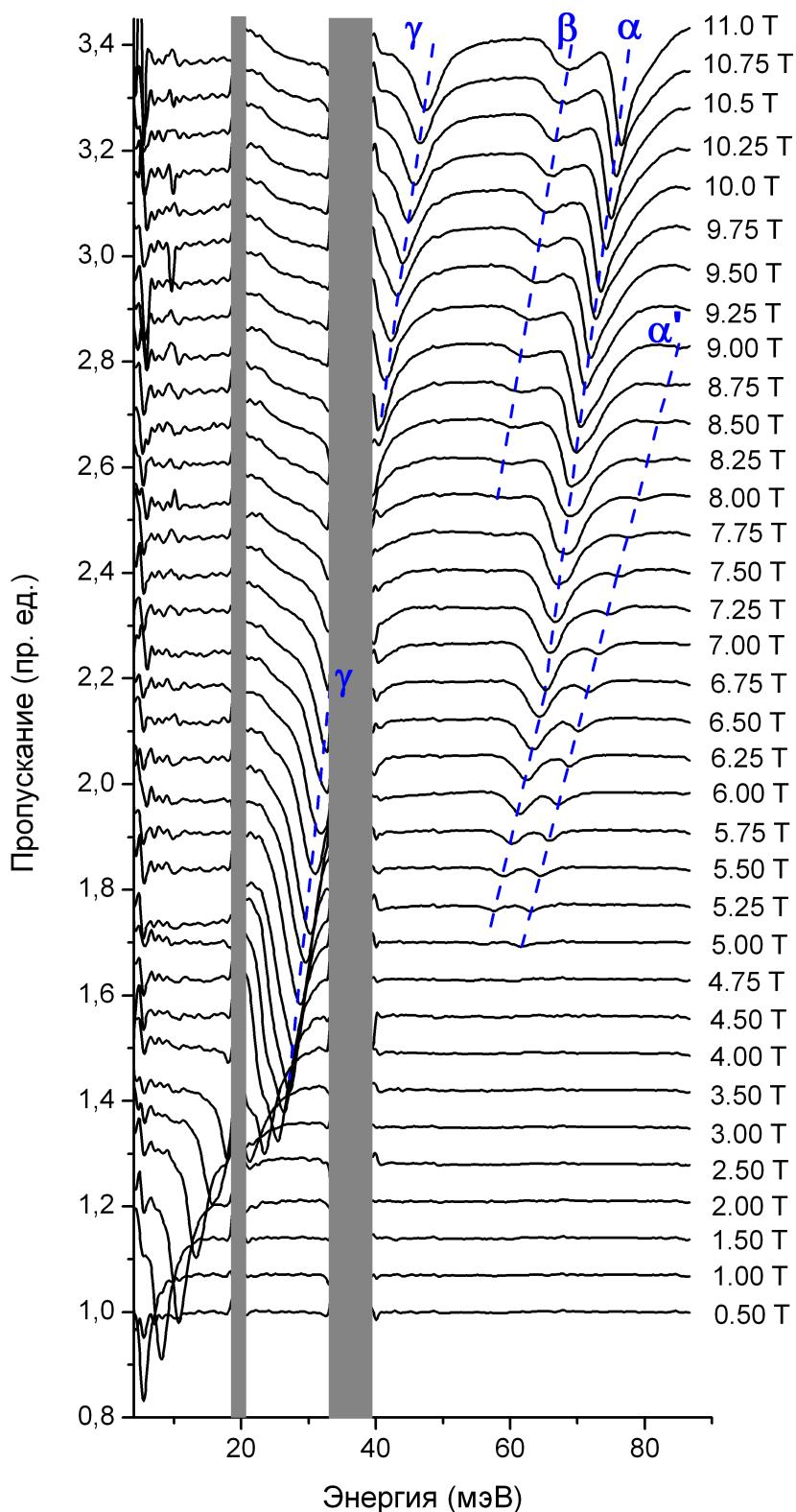


Рис. 3.20: Спектры пропускания образца 091222-1, измеренные с помощью фурье-спектрометра. Заштрихованные полосы — области остаточных лучей. Спектры сдвинуты по вертикали для наглядности.

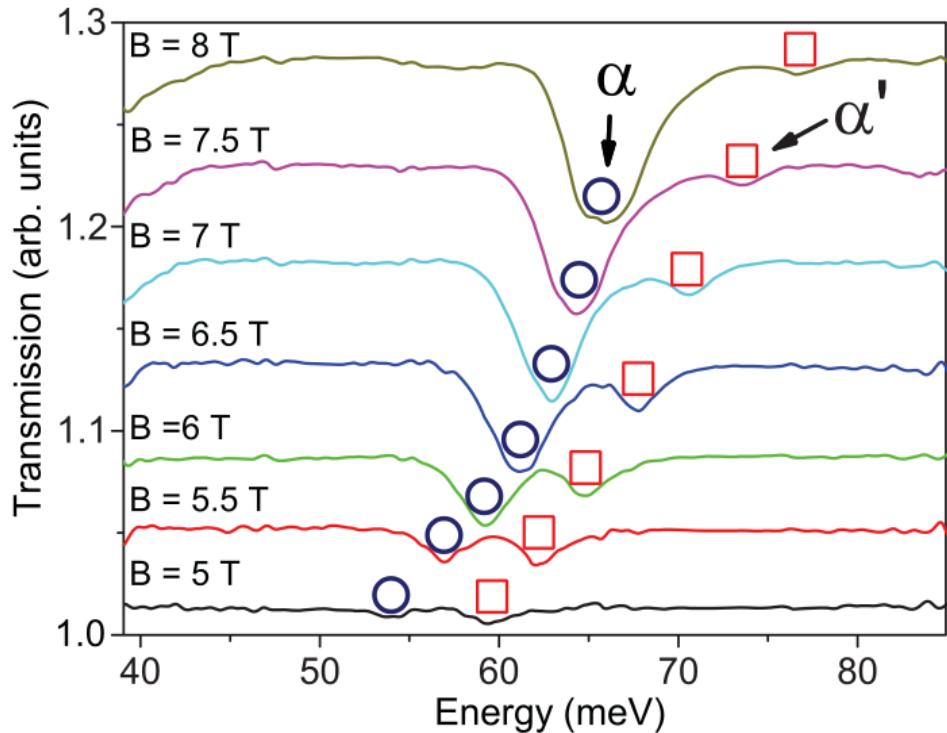


Рис. 3.21: Спектры пропускания образца 091222-1, вблизи критического поля. Обозначения наблюдаемых линий соответствуют обозначениям переходов на рис. 3.17. Спектры сдвинуты по вертикали для наглядности.

фотона 60 мэВ.

Образец 091223-1 имеет параметры схожие с 091222-1 (см. таблицу 3.1) и меньшую концентрацию носителей. Спектры пропускания для этого образца показаны на рис. 3.23.

Результаты измерений магнитопоглощения для этого образца при магнитных полях близких к критическому ($B_c = 6$ Т) представлены на рис. 3.24 в виде гистограммы, где более тёплый цвет означает более сильное поглощение. Видны линии поглощения, соответствующие переходам α , β и γ , причём линии α и β расщеплены в окрестности критического поля. Это расщепление позволяет нам увидеть запрещённые переходы α^- и β^- как линии поглощения, исчезающие вдали от $B = B_c$.

Увеличение интенсивности линий, соответствующих запрещённым переходам по мере приближения к критическому полю, а также совпадение величины расщепления для разных спектральных линий (около 4 мэВ) ясно свидетельствует о том, что для уровней Ландау с $N = 0$ валентной зоны и $N = -2$ зоны проводимости имеет место антипересечение. Обсуждение причин этого расщепления проводится в разделе 3.3.4.

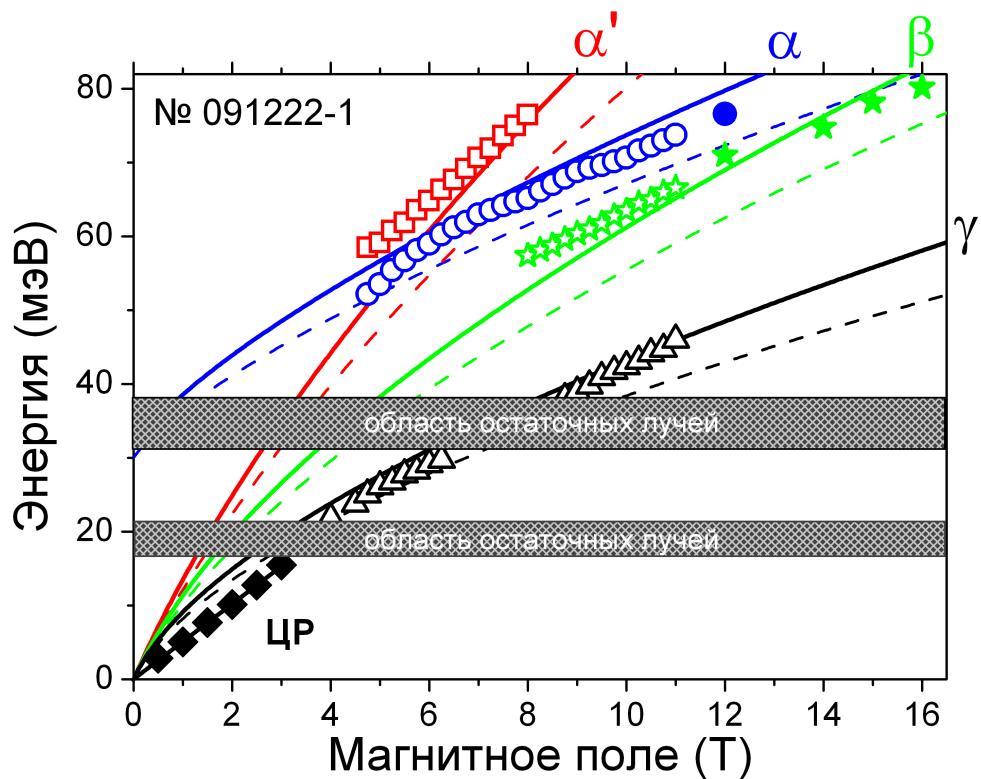


Рис. 3.22: Положение пиков наблюдаемых переходов в образце 091222-1. Измерения проводились методом фурье-спектроскопии.

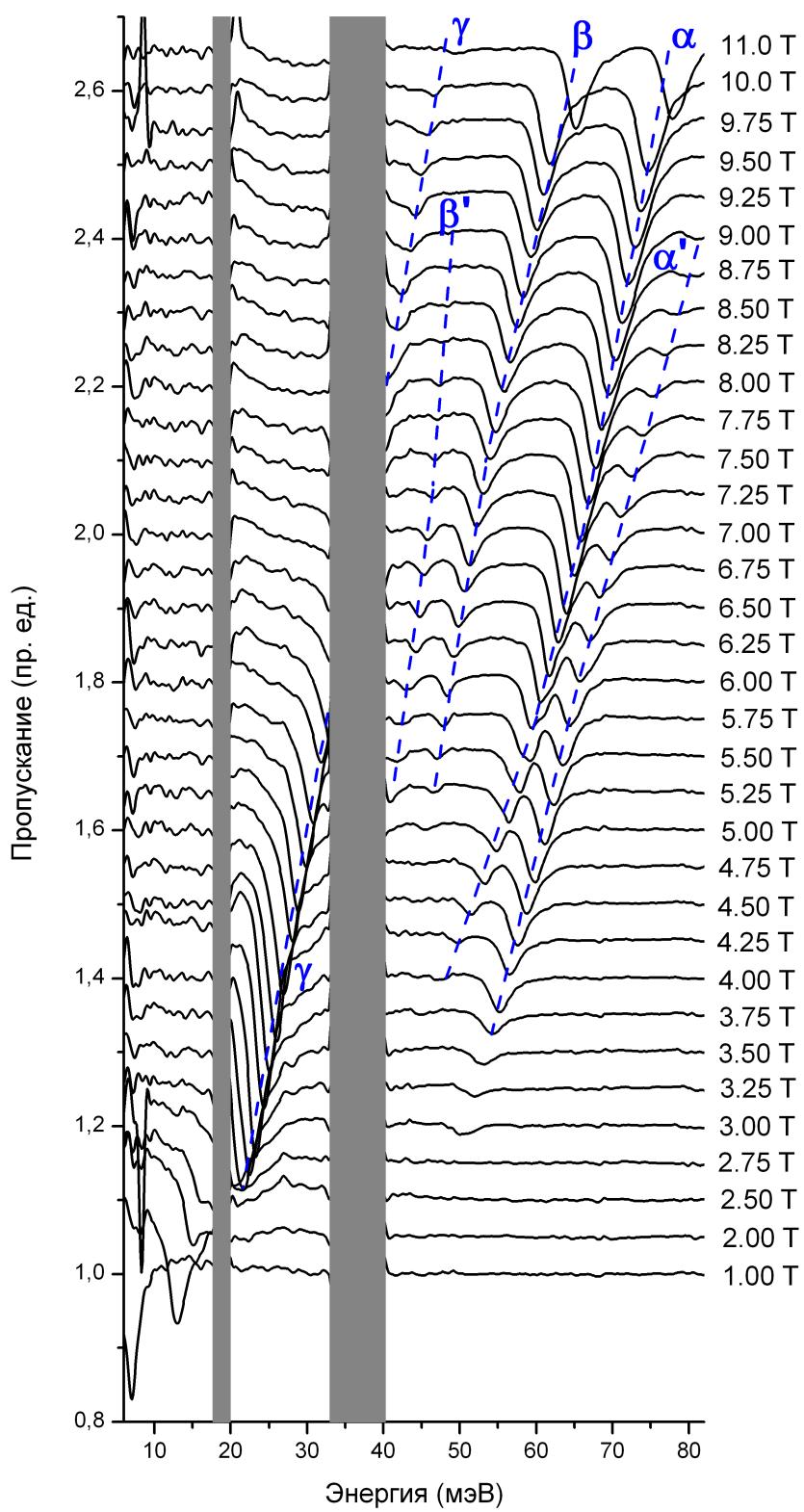


Рис. 3.23: Спектры пропускания образца 091223-1, измеренные с помощью фурье-спектрометра. Спектры сдвинуты по вертикали для наглядности.

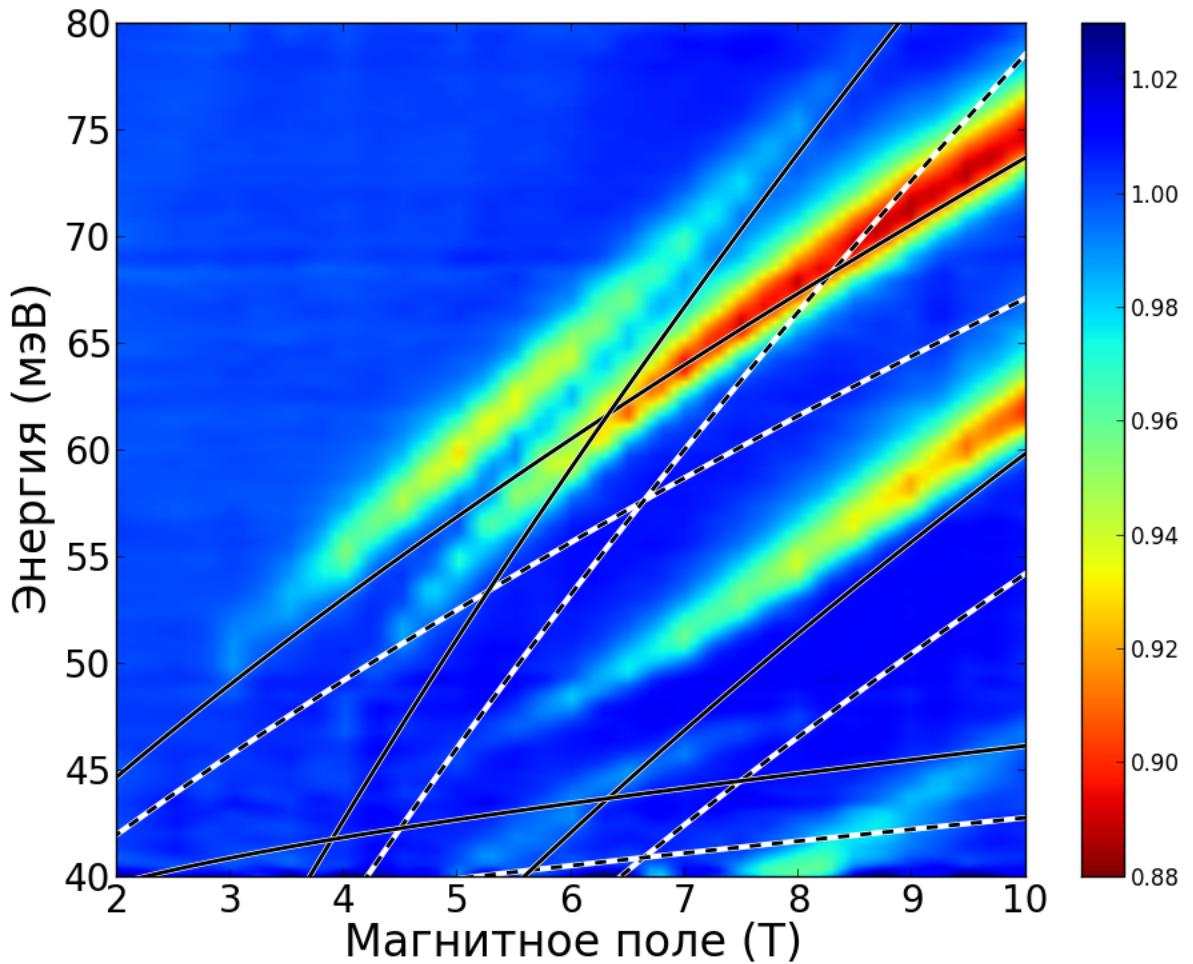


Рис. 3.24: Гистограмма магнитопоглощения в образце 091223-1. Более «тёплый» (красный) цвет обозначает более сильное поглощение. Сплошные линии — результаты расчётов с изменёнными параметрами (таблица 3.2). Пунктирные линии — результаты расчётов с исходными параметрами(таблица 2.5).

3.3.3 Циклотронный резонанс и межзонные переходы в квантующих магнитных полях для образца в полуметаллическом состоянии

Согласно расчётом зонной структуры, в образце 110615 зона проводимости и валентная зона перекрываются. Если уровень Ферми находится в области этого перекрытия, то он пересекает сразу две зоны, в результате чего в образце одновременно в равновесии существуют электронный и дырочный двумерные газы. Такое состояние (известное как двумерный полуметалл) имело место в образце 110615 во время измерений ЦР. Ранее сообщалось о наблюдении ЦР электронов и дырок в образцах такого типа в слабых магнитных полях [74], где измерения спектров проводились при развертке магнитного поля с помощью низкочастотного узкополосного источника. В данном разделе мы представляем результаты измерения магнитопоглощения в двумерном полуметалле в квантующих магнитных полях с помощью фурье-спектрометра.

На рис. 3.25 изображена рассчитанная зависимость энергии уровней Ландау от

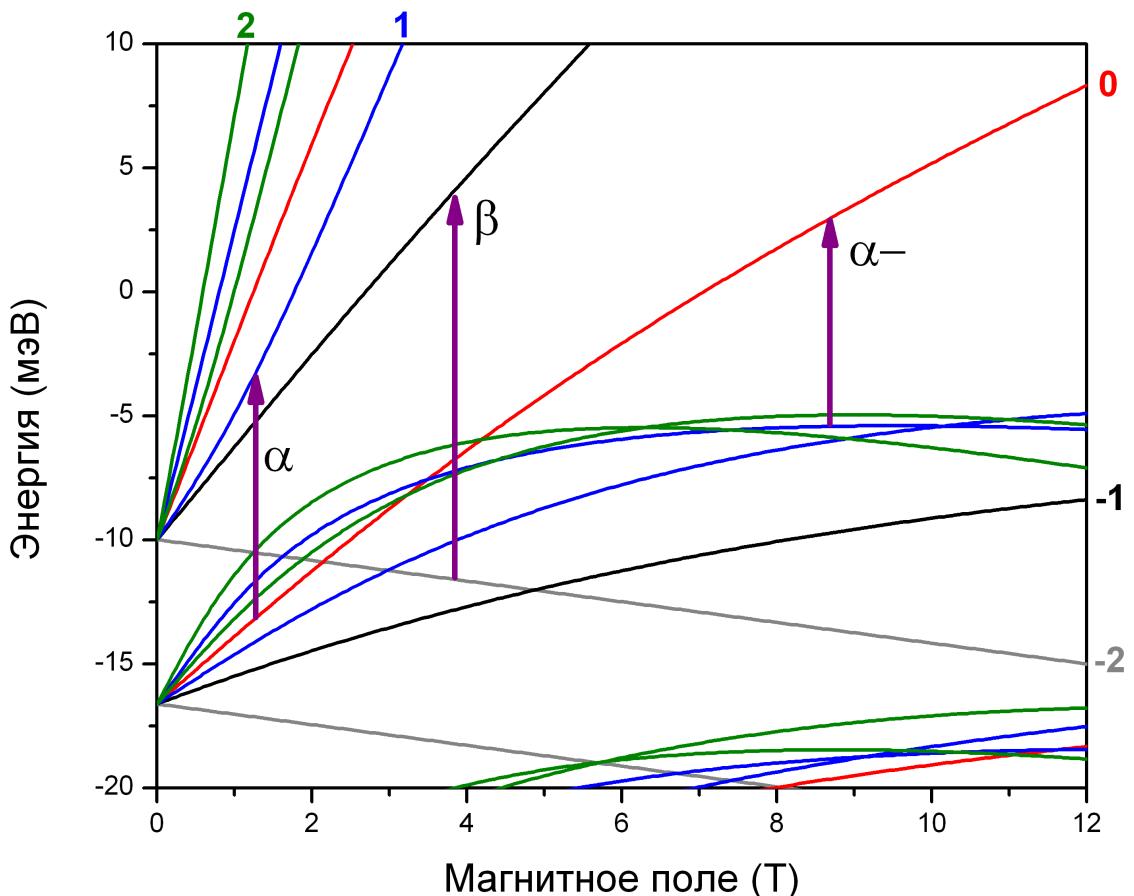


Рис. 3.25: Рассчитанная дисперсия уровней Ландау для образца 110615. Стрелками отмечены некоторые разрешённые переходы.

магнитного поля в образце 110615. Первое заметное отличие данного образца от других исследованных нами образцов с инвертированной зонной структурой состоит в том, что верхняя подзона валентной зоны так же как и зона проводимости содержит уровень Ландау с $N = -2$, т.е. является дырочно-подобной. Это связано с тем, что из-за большой ширины ямы электрон-подобная подзона, которая в образцах с нормальной зонной структурой является частью зоны проводимости, оказывается ниже не только верхней, но и следующей дырочно-подобной подзоны размерного квантования. Хорошо видно, что энергия всех уровней Ландау валентной зоны, кроме уровня с $N = -2$, растёт с ростом поля. Более того, их энергия довольно быстро превышает энергию дна зоны проводимости. Такое поведение является следствием перекрытия зон в данном образце. В отличие от образцов с инвертированной зонной структурой и шириной ямы близкой к критической, здесь уровень Ландау с $N = -2$ из зоны проводимости пересекает не только уровень с $N = 0$ но и другие уровни валентной зоны (все, кроме другого уровня с $N = -2$).

Спектры пропускания, измеренные в образце 110615 ($d_{QW} = 20,2$ нм) для различных значений магнитного поля, изображены на рис. 3.26.

На рис. 3.27 приведено положение пиков ЦР в образце 110615. Сплошными линиями показаны результаты расчётов энергии переходов, которые на рис. 3.25 обозначены стрелками и греческими буквами. Здесь, как и в других образцах с инвертированной зонной структурой, наблюдается межзонный переход α (с уровня $N = 0$ валентной зоны на уровень $N = 1$ зоны проводимости) и циклотронный резонанс электронов β (переход с уровня $N = -2$ на уровень $N = -1$ зоны проводимости). Энергия этих переходов хорошо согласуется с результатами расчётов.

Кроме того, в спектрах видна низкочастотная линия, начинающаяся в районе 7 Т. Мы связываем её с переходом α^- , который в образцах с инвертированной зонной структурой является циклотронным резонансом дырок, так как происходит между двумя уровнями валентной зоны: $N = 1$ и $N = 0$. Поскольку данный переход происходит внутри валентной зоны, он должен быть более чувствителен к её особенностям, в частности — к гофрировке (зависимости энергии зоны от направления вектора \mathbf{k}). Аксиальная модель, используемая нами при расчётах, не учитывает гофрировку и поэтому описывает валентную зону с меньшей точностью чем зону проводимости. Это, на наш взгляд, является причиной того, что рассогласование теории и эксперимента для линии α^- существенно выше, чем для двух других линий.

Таким образом, в образце 110615, находящемся в состоянии двумерного полуме-

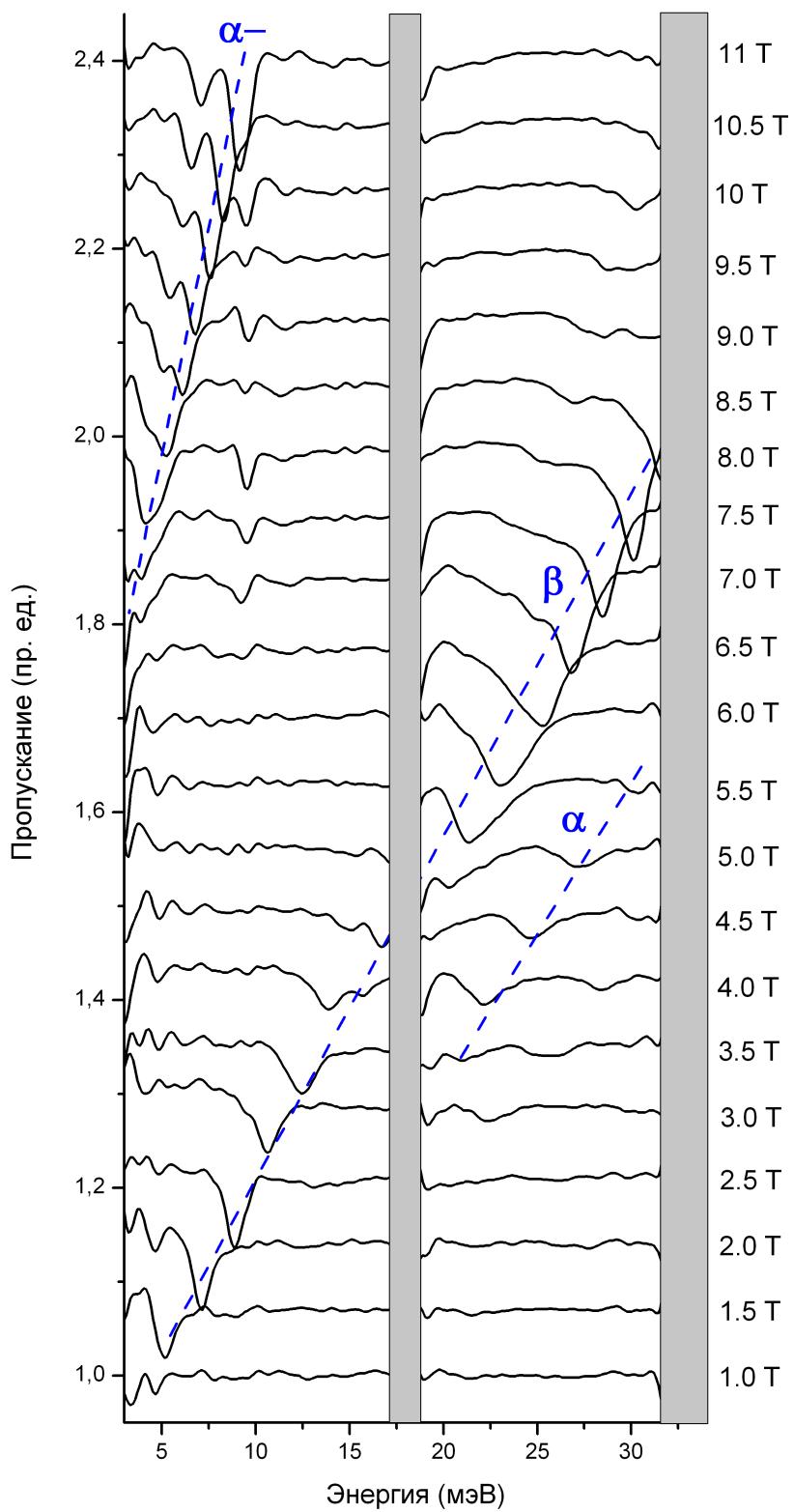


Рис. 3.26: Спектры пропускания образца 110615, измеренные с помощью фурье-спектрометра. Обозначения наблюдаемых линий соответствуют обозначениям переходов на рис. 3.25. Заштрихованные полосы — области остаточных лучей. Спектры сдвинуты по вертикали для наглядности.

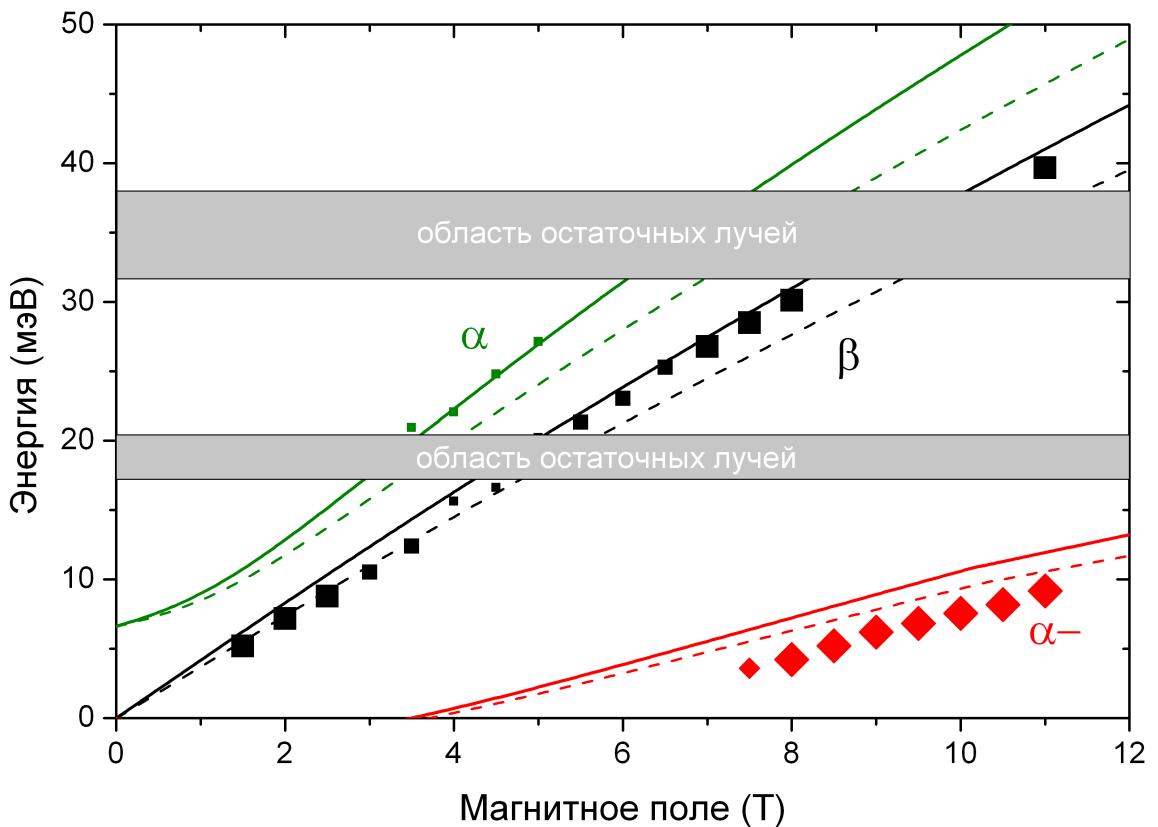


Рис. 3.27: Положение пиков наблюдаемых переходов в образце 110615. Сплошные линии — результаты расчётов с изменёнными параметрами (таблица 3.2). Пунктирные линии — результаты расчётов с исходными параметрами(таблица 2.5).

талла, одновременно наблюдался ЦР электронов (β) и дырок (α^-). Позднее этот результат был подтверждён в работе [75].

3.3.4 Причина антипересечения уровней Ландау

Результаты экспериментов, приведённые в разделе 3.3.2, однозначно указывают 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 имеет место антипересечение.

В рамках аксиального приближения уровни Ландау с разными номерами N не могут взаимодействовать, а значит антипересечение вызвано влиянием анизотропных членов. Обозначим элементы гамильтониана, приводящие к взаимодействию уровней Ландау с $N = 0$ и $N = -2$, как $\hat{H}_{\text{a.c.}}$. Они должны удовлетворять следующему условию:

$$\left\langle N = 0 \left| \hat{H}_{\text{a.c.}} \right| N = -2 \right\rangle \neq 0.$$

Нам известен вид волновых функций состояний $|N = 0\rangle$ и $|N = -2\rangle$ в аксиальном приближении (формулы (2.44) и (2.46)). Используя выражения для них, а также свойства операторов \hat{a} и \hat{a}^\dagger (2.39) и их связь с оператором квазимпульса (2.38), можно получить следующее выражение¹:

$$\hat{H}_{\text{a.c.}} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \hat{k}_+ & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \hat{k}_+ & 0 & 0 \\ 1 & \hat{k}_- & 0 & 1 & \hat{k}_- & \hat{k}_+^2 + \hat{k}_-^2 & 1 & \hat{k}_- \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \hat{k}_+ & 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (3.1)$$

Сравнение данного выражения с гамильтонианом Кейна (раздел 2.2) показывает, что никакие из учтённых нами членов (даже в анизотропном приближении) не удовлетворяют данному условию, однако ему удовлетворяют поправки связанные с отсутствием центра инверсии в объёме (bulk inversion asymmetry, BIA). Поправки BIA, заданные выражением (2.31), совпадают с (3.1) для элемента $H_{2,6}$ и поэтому взаимодействие уровней Ландау с $N = 0$ и $N = -2$ вызвано следующими членами:

$$\hat{H}_{\text{a.c.}}^{(\text{BIA})} = \chi \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \hat{k}_+ B_8 \hat{k}_z + \hat{k}_z B_8 \hat{k}_+ & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \hat{k}_- B_8 \hat{k}_z + \hat{k}_z B_8 \hat{k}_- & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (3.2)$$

Численный коэффициент, не зависящий от материальных параметров и компонент квазимпульса, мы обозначили как χ . Его значение определяется направлением роста гетероструктуры: оно равно 0,5 для структур, выращенных на плоскости (001) и 0,4 для

¹ Данная матрица схематически представляет зависимость элементов гамильтониана от компонент квазимпульса. Размерность её элементов различна и не совпадает с размерностью элементов гамильтониана. В гамильтониане на месте числа 1 должна стоять некоторая величина, не зависящая от \hat{k}_\pm .

плоскости (013).

Поправка к энергии уровней Ландау с $N = 0$ и $N = -2$, обусловленная членами (3.2), в магнитном поле близком к критическому была получена нами с помощью теории возмущений. Если считать значения параметра B_8 для HgTe таким же как у CdTe, т.е. равными $-22,41 \text{ эВ}\cdot\text{\AA}^2$ (см. таблицу 2.5 или работу [18]), то рассчитанное таким образом расщепление уровней Ландау для образца 091223-1 составит 1 мэВ, в то время как полученное в эксперименте расщепление линий ЦР равно 4 мэВ. Для того, чтобы получить совпадение экспериментального и теоретического расщепления величину B_8 для HgTe следует выбрать равной $-60 \text{ эВ}\cdot\text{\AA}^2$.

Расщепление уровней Ландау, вызванное поправкой BIA, может отсутствовать в гетероструктурах, выращенных на атомных плоскостях, для которых коэффициент χ в формуле (3.2) равен нулю. Для того, чтобы найти эти плоскости мы применим преобразование поворота, описанное в разделе 2.1.2, к блоку $\mathbf{H}^{(cv)}$ (см. выражение (2.26)). Запишем поправку BIA в новых координатах с помощью метода инвариантов:

$$\hat{H}_{(\text{BIA})}^{(\Gamma_6\Gamma_8)} = \sum_{j=1}^3 \mathbf{U}_j^{(\Gamma_6\Gamma_8; \Gamma_5)'} \left(\hat{\mathbf{q}}^T \left[B_8^+ \mathbf{Q}_j^{(\Gamma_5)'} \right] \hat{\mathbf{q}} \right)$$

Согласно формуле (3.2), величина χ является коэффициентом перед оператором вида $\hat{k}_+ \hat{k}_z$ в нижнем правом углу этой матрицы, то есть:

$$\chi = i \frac{1}{2} \sum_{j=1}^3 \left(\mathbf{U}_j^{(\Gamma_6\Gamma_8; \Gamma_5)'} \right)_{2,4} \left[\left(\mathbf{Q}_j^{(\Gamma_5)'} \right)_{xz} - i \left(\mathbf{Q}_j^{(\Gamma_5)'} \right)_{yz} \right].$$

Применяя формулы (2.13), получаем:

$$\chi = \frac{1}{2} e^{-2i\gamma} \left(\cos(2\alpha) \cos(2\beta) + i \sin(2\alpha) \cos(\beta) \left(\frac{3}{2} \sin^2(\beta) - 1 \right) \right). \quad (3.3)$$

Из формулы (3.3) следует, что коэффициент χ , а с ним и расщепление уровней Ландау, равен нулю для углов $\alpha = 0, \beta = \frac{\pi}{4}$ и $\alpha = \frac{\pi}{4}, \beta = \arctan \sqrt{2}$, что соответствует гетероструктурам, выращенным на атомных плоскостях (011) и (111). Поэтому если какой-то другой эффект даёт вклад в наблюдаемое взаимодействие уровней Ландау, он может быть обнаружен путём измерений в образцах, выращенных на указанных выше плоскостях.

Таким образом, антипересечение уровней Ландау, наблюдаемое как расщепление

двух спектральных линий (α и β) объясняется влиянием эффектов, вызванных отсутствием центра инверсии в объёмном кристалле. Предсказано, что это влияние преенебрежимо мало для квантовых ям, выращенных на плоскостях (011) и (111).

Обусловленное отсутствием симметрии инверсии в кристалле взаимодействие зон Γ_6 и Γ_8 должно приводить также к сравнимым по величине (т.е. порядка нескольких мэВ) расщеплениям в спектре и в отсутствие магнитного поля при толщине квантовой ямы близкой к критической (см., например, [76]).

3.4 Усиление терагерцового излучения на межзонных переходах в квантовой яме

Как уже было отмечено во Введении, интерес к узкозонным гетероструктурам на основе КРТ проявляется в связи с возможностью генерации излучения терагерцового диапазона. В этом разделе мы вычисляем населённость состояний в квантовой яме в условиях оптической накачки, используя результаты измерений времени жизни носителей, сделанных для образца 091225-1 (см. таблицу 3.1) С. В. Морозовым и О. Драченко методом спектроскопии накачка–зондирование (римп–probe) [A3].

Из условия стационарного процесса $G = n/\tau$ (G — коэффициент генерации фотоносителей, n — концентрация, τ — время жизни) можно оценить концентрацию неравновесных двумерных носителей для фиксированных энергии кванта и мощности падающего излучения. В нашем случае для оценки неравновесной концентрации в качестве предполагаемого источника мы будем использовать характеристики оптического импульсного генератора на разностной частоте (СОЛАР). Энергия в импульсе для длины волны 17 мкм составляет $E_{\text{pulse}} = 0,3$ мДж. Таким образом, при длительности импульса $\tau_{\text{pulse}} \approx 10$ нс и диаметре пучка 5 мм (площадь S) для данной длины волны падающего излучения без дополнительной фокусировки можно получить плотность потока фотонов с энергией $\hbar\omega$ на 1 см² как

$$\Phi = \frac{E_{\text{pulse}}}{\hbar\omega\tau_{\text{pulse}}S}.$$

С учетом того, что в невырожденном (линейном) случае квантовая яма поглощает $\alpha \approx 1\%$ от падающего излучения, коэффициент генерации фотоионизованных носителей

$$G = \frac{\alpha E_{\text{pulse}}}{\hbar\omega\tau_{\text{pulse}}S}.$$

Следовательно, для стационарного процесса

$$n = G\tau = \frac{\alpha E_{\text{pulse}}\tau}{\hbar\omega\tau_{\text{pulse}}S}.$$

В нашем случае для оценки n возьмем $\tau = 5 \times 10^{-11}$ с, которое было определено для подобной структуры в экспериментах по измерению времени жизни методом спектроскопии накачка–зондирование. Исходя из приведенных оценок получаем $n \approx 2 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$.

Однако структура, в которой проводились исследования методом спектроскопии накачка–зондирование, не является оптимальной для получения инверсной населенности в связи с особенностями энергетического спектра дырок. Аналогично зонной структуре, изображённой на рис. 2.7, в спектре дырок данного образца основной максимум расположен не в точке $k = 0$, что может приводить к эффекту «ухода» фотовозбужденных дырок при $k \approx 0$ в боковой максимум. Таким образом, прямая излучательная рекомбинация будет подавлена вплоть до заполнения всех состояний в боковом максимуме. С другой стороны, проведенные нами расчеты в данной гетеросистеме свидетельствуют о возможности получения структур с ярко выраженными прямозонными свойствами.

На рис. 3.28 приведен результат расчета зонного спектра структуры HgTe/Cd_{0,7}Hg_{0,3}Te с квантовой ямой шириной 5,6 нм. Видно, что в данной модельной структуре как минимум в зоне проводимости E_1 , так и максимум в валентной зоне H_1 расположены в точке $k = 0$. Двумерная проводимость σ для неравновесных носителей в такой структуре была вычислена по следующей формуле:

$$\begin{aligned} \text{Re}(\sigma) = & \frac{2e\mu n}{1 + \left(\frac{E}{\hbar}\right)^2 \left(\frac{\mu m_0 m_c}{e}\right)^2} + \\ & + \frac{\hbar e^2}{2\pi m_0^2 E} \sum_m \int_{v \rightarrow c} d^2 \mathbf{k}_\perp |\xi \mathbf{p}(\mathbf{k}_\perp)|^2 \delta(E_v(\mathbf{k}_\perp) + E - E_c(\mathbf{k}_\perp)) - \\ & - \frac{\hbar e^2}{2\pi m_0^2 E} \sum_m \int_{c \rightarrow v} d^2 \mathbf{k}_\perp |\xi \mathbf{p}(\mathbf{k}_\perp)|^2 \delta(E_v(\mathbf{k}_\perp) + E - E_c(\mathbf{k}_\perp)), \end{aligned} \quad (3.4)$$

где μ — подвижность, n — концентрация неравновесных носителей, m_0 — масса свободного электрона, m_c — эффективная масса (считается одинаковой в зоне проводимости и в валентной зоне), ξ — вектор поляризации излучения, E_v — энергия состояния в валентной зоне, E_c — энергия состояния в зоне проводимости, $E = \hbar\omega$ — энергия

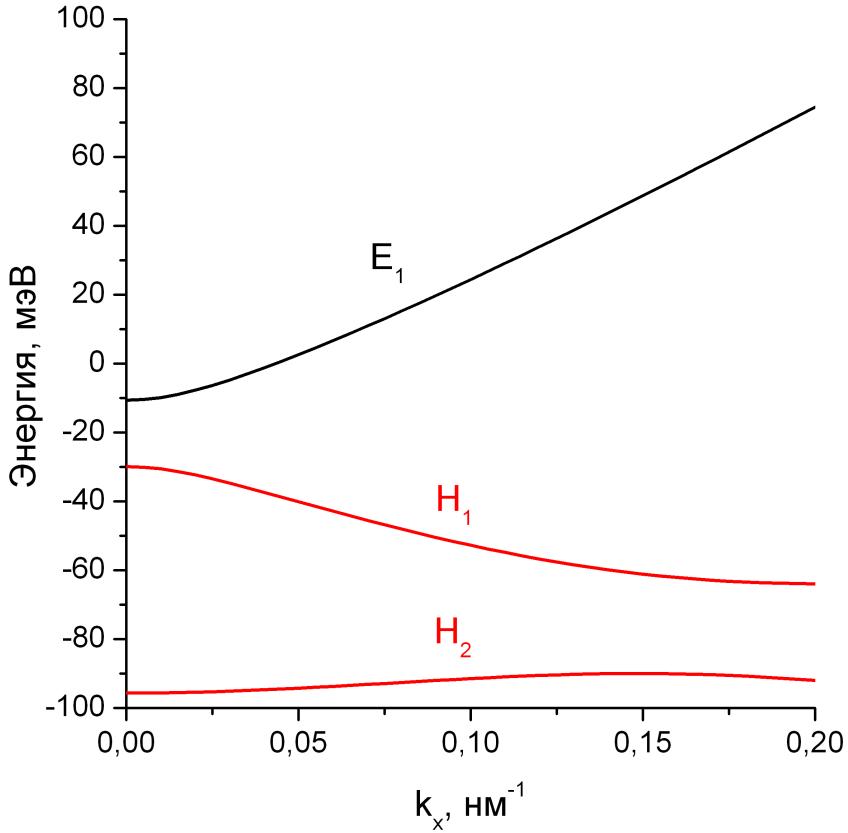


Рис. 3.28: Рассчитанная зонная структура квантовой ямы $\text{HgTe}/\text{Cd}_{0,7}\text{Hg}_{0,3}\text{Te}$ толщиной 5,6 нм при $T = 4,2 \text{ К}$. E_1 — зона проводимости, а H_1 и H_2 — валентная зона.

фотона, \mathbf{p} — матричный элемент импульса:

$$\mathbf{p}(\mathbf{k}_\perp) = \langle v, \mathbf{k}_\perp | \hat{\mathbf{p}} | c, \mathbf{k}_\perp \rangle,$$

где состояния в зоне проводимости и в валентной зоне обозначены как c и v соответственно.

Первое слагаемое в формуле (3.4) отвечает за поглощение Друде. Во втором слагаемом интеграл берётся по той области k -пространства, где состояния в валентной зоне заняты электронами, а в зоне проводимости — свободны (т.е. переход идёт с поглощением фотона). Интеграл в третьем слагаемом берётся по области где состояния в валентной зоне свободны, а в зоне проводимости — заняты электронами (т.е. переход идёт с испусканием фотона). Суммирование по t ведётся по всем возможным переходам. Поскольку зона проводимости и валентная зона двукратно вырождены по спину, необходимо учитывать четыре различных перехода. При расчётах использовалось значение подвижности $\mu = 1,5 \times 10^5$ (полученное в магнитотранспортных измерениях).

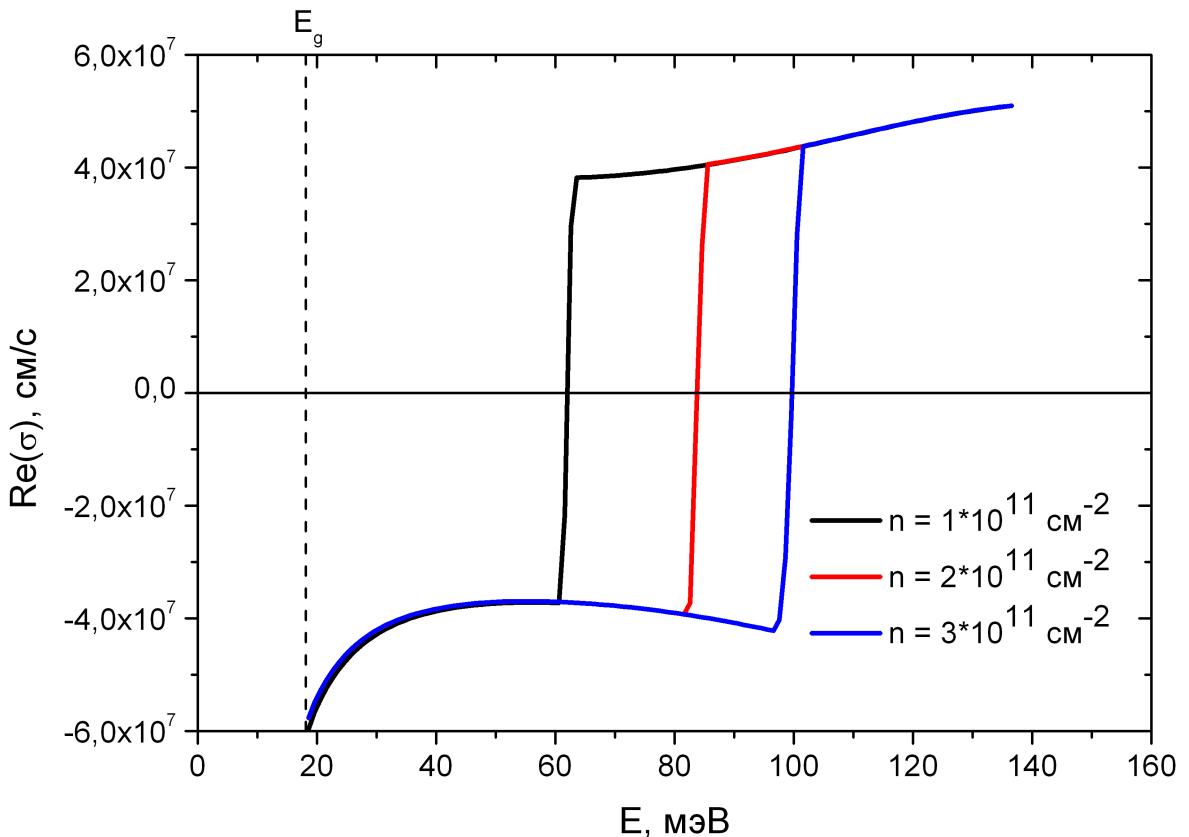


Рис. 3.29: Спектр двумерной проводимости σ для структуры с квантовой ямой $\text{HgTe}/\text{Cd}_{0,7}\text{Hg}_{0,3}\text{Te}$ толщиной 5,6 нм при температуре $T = 4,2$ К при различных концентрациях неравновесных носителей n .

Анализ результатов расчётов σ (рис. 3.29) показал наличие усиления (отрицательной проводимости) в терагерцовом диапазоне для концентраций $(1-3)\times 10^{11} \text{ см}^{-2}$. Из зависимостей, приведенных на рис. 3.29, отчетливо видно, что для разных значений концентрации неравновесных носителей проводимость меняет знак при энергии кванта от 60 до 100 мэВ, что соответствует диапазону частот от 14 до 24 ТГц. При этом область отрицательных значений проводимости соответствует области усиления, а область положительных значений — области поглощения.

Таким образом, мы продемонстрировали возможность усиления терагерцового излучения на межзонных переходах в квантовых ямах на основе $\text{Cd}_x\text{Hg}_{1-x}\text{Te}$ в условиях оптической накачки.

Заключение

Основные результаты работы:

1. Разработана модель для вычисления электронных и дырочных состояний в квантовых ямах $Hg_{1-x}Cd_xTe / Cd_yHg_{1-y}Te$, выращенных на плоскости (013). Проведены расчёты энергетических спектров и волновых функций электронов и дырок в квантовых ямах таких гетероструктур в отсутствие магнитного поля и в квантующих магнитных полях. Показано, что в квантовых ямах $HgTe/Cd_{0.7}Hg_{0.3}Te$ (013) шириной больше 12.5 нм, выращенных на буферном слое CdTe, имеет место перекрытие зоны проводимости с боковым максимумом валентной зоны.
2. Экспериментально исследована фотопроводимость нелегированных узкозонных гетероструктур $Hg_{1-x}Cd_xTe / Cd_yHg_{1-y}Te$ с квантовыми ямами в терагерцовом диапазоне при температурах жидкого гелия или азота. Впервые продемонстрирован фотоотклик, связанный с межзонными переходами. Обнаружено, что при температуре жидкого гелия в спектре фотопроводимости наблюдается интенсивная низкочастотная полоса, связанная с фотоионизацией локализованных центров (примесей, дефектов).
3. В магнитных полях до 16 Т экспериментально исследованы спектры магнитопоглощения в узкозонных квантовых ямах $Hg_{1-x}Cd_xTe / Cd_yHg_{1-y}Te$ как с инвертированной так и (впервые) с нормальной зонной структурой. В образцах с нормальной зонной структурой помимо ЦР электронов и межзонных переходов обнаружены линии поглощения, связанные с примесными переходами. В полуметаллической квантовой яме впервые одновременно наблюдался ЦР электронов и дырок в квантующих магнитных полях. Антипересечение нижнего уровня Ландау зоны проводимости и верхнего уровня Ландау валентной зоны в образце с инвертированной зонной структурой (наблюдавшееся ранее в образцах, выращенных на плоскости (001)) обнаружено для структур, выращенных на плоскости (013) по расщеплению двух спектральных линий: циклотронного резонанса

и межзонного перехода.

4. Продемонстрировано систематическое рассогласование наблюдаемого положения линий ЦР как в квазиклассических так и в квантующих магнитных полях с результатами расчётов, выполненного с использованием общепринятого набора материальных параметров для гетероструктур $Hg_{1-x}Cd_xTe / Cd_yHg_{1-y}Te$. Показано, что наилучшее согласование экспериментальных данных с результатами расчётов достигается при значениях параметров $VBO = 0,62$ эВ и $E_p = 20,8$ эВ, отличных от используемых в литературе.
5. Показано, что антипересечение нижнего уровня Ландау зоны проводимости и верхнего уровня Ландау валентной зоны в образцах $Hg_{1-x}Cd_xTe / Cd_yHg_{1-y}Te$ (013) с инвертированной зонной структурой может быть описано в рамках разработанного метода расчёта энергетического спектра с учётом поправок, обусловленных отсутствием центра инверсии в объёмном кристалле.
6. Показано, что в квантовой яме $HgTe/Cd_{0,7}Hg_{0,3}Te$ толщиной 5,6 нм с нормальной зонной структурой при концентрации неравновесных носителей $(1-3) \times 10^{11} \text{ см}^{-2}$ возможно усиление излучения с частотой 5–24 ТГц за счёт межзонных переходов.

Приложение

A Выражения для матриц \mathbf{U} в модели Кейна

Все выражения получены на основе данных из книги [63].

Таблица A.1: Матрицы \mathbf{U} для блоков $\Gamma_6 \times \Gamma_6$ ($\mathbf{H}^{(cc)}$) и $\Gamma_7 \times \Gamma_7$ ($\mathbf{H}^{(ss)}$).

Представление			Базис	
T_d	O_h	$O(3)$	Компактно	Явно
Γ_1	Γ_1^+	D_0^+	$\frac{1}{\sqrt{2}}$	$\frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$
Γ_4	Γ_4^+	D_1^+	$\frac{1}{\sqrt{2}} \sigma_x$ $\frac{1}{\sqrt{2}} \sigma_y$ $\frac{1}{\sqrt{2}} \sigma_z$	$\frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$ $\frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$ $\frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$

Таблица A.2: Матрицы \mathbf{U} для блока $\Gamma_6 \times \Gamma_7$ ($\mathbf{H}^{(cs)}$).

Представление			Базис	
T_d	O_h	$O(3)$	Компактно	Явно
Γ_1	Γ_1^-	D_0^-	$\frac{1}{\sqrt{2}}$	$\frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$
Γ_5	Γ_4^-	D_1^-	$\frac{1}{\sqrt{2}} \sigma_x$ $\frac{1}{\sqrt{2}} \sigma_y$ $\frac{1}{\sqrt{2}} \sigma_z$	$\frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$ $\frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$ $\frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$

Таблица А.3: Матрицы \mathbf{U} для блока $\Gamma_6 \times \Gamma_8$ ($\mathbf{H}^{(cv)}$).

Представление			Базис			
T_d	O_h	$O(3)$	Компактно		Явно	
Γ_3	Γ_3^-	$[D_2^-]_{1-2}$	$\frac{\sqrt{3}}{2}(T_{xx} - T_{yy})$		$\frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ -1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$	
			$\frac{3}{2}T_{zz}$		$\frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \end{pmatrix}$	
Γ_4	Γ_5^-	$[D_2^-]_{3-5}$	$\sqrt{3}T_{yz}$		$\frac{i}{2\sqrt{2}} \begin{pmatrix} -1 & 0 & -\sqrt{3} & 0 \\ 0 & \sqrt{3} & 0 & 1 \end{pmatrix}$	
			$\sqrt{3}T_{zx}$		$\frac{1}{2\sqrt{2}} \begin{pmatrix} -1 & 0 & \sqrt{3} & 0 \\ 0 & \sqrt{3} & 0 & -1 \end{pmatrix}$	
			$\sqrt{3}T_{xy}$		$\frac{i}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & -1 \\ -1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$	
Γ_5	Γ_4^-	D_1^-	$\frac{3}{2}T_x$		$\frac{1}{2\sqrt{2}} \begin{pmatrix} -\sqrt{3} & 0 & 1 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & \sqrt{3} \end{pmatrix}$	
			$\frac{3}{2}T_y$		$\frac{-i}{2\sqrt{2}} \begin{pmatrix} \sqrt{3} & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & \sqrt{3} \end{pmatrix}$	
			$\frac{3}{2}T_z$		$\frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$	

Таблица А.4: Матрицы \mathbf{U} для блока $\Gamma_8 \times \Gamma_8$ ($\mathbf{H}^{(vv)}$) (часть 1).

Представление			Базис			
T_d	O_h	$O(3)$	Компактно		Явно	
Γ_1	Γ_1^+	D_0^+	$\frac{1}{2}$		$\frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$	
Γ_2	Γ_2^+	$[D_3^+]_1$	$\frac{i}{\sqrt{3}}(J_x J_y J_z + J_z J_y J_x)$		$\frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \\ -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$	
Γ_3	Γ_3^+	$[D_2^+]_{1-2}$	$\frac{1}{6}(2J_z^2 - J_x^2 - J_y^2)$		$\frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$	
			$\frac{1}{\sqrt{12}}(J_x^2 - J_y^2)$		$\frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$	

Таблица А.5: Матрицы \mathbf{U} для блока $\Gamma_8 \times \Gamma_8$ ($\mathbf{H}^{(vv)}$) (часть 2).

Представление			Базис			
T_d	O_h	$O(3)$	Компактно		Явно	
Γ_4	Γ_4^+	D_1^+	$\frac{J_x}{\sqrt{5}}$	$\frac{1}{2\sqrt{5}} \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{3} & 0 & 0 \\ \sqrt{3} & 0 & 2 & 0 \\ 0 & 2 & 0 & \sqrt{3} \\ 0 & 0 & \sqrt{3} & 0 \end{pmatrix}$		
			$\frac{J_y}{\sqrt{5}}$	$\frac{i}{2\sqrt{5}} \begin{pmatrix} 0 & -\sqrt{3} & 0 & 0 \\ \sqrt{3} & 0 & -2 & 0 \\ 0 & 2 & 0 & -\sqrt{3} \\ 0 & 0 & \sqrt{3} & 0 \end{pmatrix}$		
			$\frac{J_z}{\sqrt{5}}$	$\frac{1}{2\sqrt{5}} \begin{pmatrix} 3 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -3 \end{pmatrix}$		
Γ'_4	Γ'^+_4	$[D_3^+]_{2-4}$	$\left(\frac{J_x}{\sqrt{5}}\right)^3$	$\frac{1}{40\sqrt{5}} \begin{pmatrix} 0 & 7\sqrt{3} & 0 & 6 \\ 7\sqrt{3} & 0 & 20 & 0 \\ 0 & 20 & 0 & 7\sqrt{3} \\ 6 & 0 & 7\sqrt{3} & 0 \end{pmatrix}$		
			$\left(\frac{J_y}{\sqrt{5}}\right)^3$	$\frac{i}{40\sqrt{5}} \begin{pmatrix} 0 & -7\sqrt{3} & 0 & 6 \\ 7\sqrt{3} & 0 & -20 & 0 \\ 0 & 20 & 0 & -7\sqrt{3} \\ -6 & 0 & 7\sqrt{3} & 0 \end{pmatrix}$		
			$\left(\frac{J_z}{\sqrt{5}}\right)^3$	$\frac{1}{40\sqrt{5}} \begin{pmatrix} 27 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -27 \end{pmatrix}$		

Таблица А.6: Матрицы \mathbf{U} для блока $\Gamma_8 \times \Gamma_8$ ($\mathbf{H}^{(vv)}$) (часть 3).

Представление			Базис			
T_d	O_h	$O(3)$	Компактно			
			Явно			
$\Gamma_5 \quad \Gamma_5^+ \quad [D_2^+]_{3-5}$		$\frac{\{J_y, J_z\}}{2\sqrt{3}}$	$\frac{i}{2}$	$\begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \end{pmatrix}$		
			$\frac{1}{2}$	$\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \end{pmatrix}$		
			$\frac{i}{2}$	$\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & -1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$		
$\Gamma'_5 \quad \Gamma'^+_5 \quad [D_3^+]_{5-7}$		$\frac{\{J_x, J_y^2 - J_z^2\}}{\sqrt{12}}$	$\frac{1}{4}$	$\begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 & -\sqrt{3} \\ -1 & 0 & \sqrt{3} & 0 \\ 0 & \sqrt{3} & 0 & -1 \\ -\sqrt{3} & 0 & -1 & 0 \end{pmatrix}$		
			$\frac{i}{4}$	$\begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 & \sqrt{3} \\ 1 & 0 & \sqrt{3} & 0 \\ 0 & -\sqrt{3} & 0 & -1 \\ -\sqrt{3} & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$		
			$\frac{1}{2}$	$\begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$		

Таблица А.7: Матрицы \mathbf{U} для блока $\Gamma_8 \times \Gamma_7$ ($\mathbf{H}^{(vs)}$).

Представление			Базис	
T_d	O_h	$O(3)$	Компактно	Явно
Γ_3	Γ_3^+	$[D_2^+]_{1-2}$	$\frac{3}{2}T_{zz}^\dagger$	$\frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \\ 0 & -1 \\ 0 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$
Γ_4	Γ_4^+	D_1^+	$\frac{\sqrt{3}}{2}(T_{xx}^\dagger - T_{yy}^\dagger)$	$\frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$
Γ_5	Γ_5^+	$[D_2^+]_{3-5}$	$\frac{3}{2}T_x^\dagger$	$\frac{1}{2\sqrt{2}} \begin{pmatrix} -\sqrt{3} & 0 \\ 0 & -1 \\ 1 & 0 \\ 0 & \sqrt{3} \end{pmatrix}$
			$\frac{3}{2}T_y^\dagger$	$\frac{i}{2\sqrt{2}} \begin{pmatrix} \sqrt{3} & 0 \\ 0 & 1 \\ 1 & 0 \\ 0 & \sqrt{3} \end{pmatrix}$
			$\frac{3}{2}T_z^\dagger$	$\frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \\ 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$
			$\sqrt{3}T_{yz}^\dagger$	$\frac{i}{2\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -\sqrt{3} \\ \sqrt{3} & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$
			$\sqrt{3}T_{zx}^\dagger$	$\frac{1}{2\sqrt{2}} \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & \sqrt{3} \\ \sqrt{3} & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$
			$\sqrt{3}T_{xy}^\dagger$	$\frac{i}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \\ 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$

Б Выражения для матриц \mathbf{Q} и \mathbf{K}

Все выражения получены на основе данных из книги [63]. Матрицы \mathbf{K} представлены только матрицами 3×3 . Матрицы \mathbf{Q} представлены матрицами 4×4 и 3×3 следующим образом:

$$\mathbf{Q} = \begin{pmatrix} & \\ & \\ & \\ & 4 \times 4 \\ & \\ & \end{pmatrix} \quad \text{или} \quad \mathbf{Q} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & & & \\ 0 & & & \\ 0 & & 3 \times 3 \\ 0 & & & \end{pmatrix}$$

Таблица Б.1: Матрицы \mathbf{Q} и \mathbf{K} (часть 1)

Представление			Базис	
T_d	O_h	$O(3)$	Компактно	Явно
$\Gamma_1^{(1)}$	$\Gamma_1^{+(1)}$	D_0^+	1	$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$
$\Gamma_1^{(k^2)}$	$\Gamma_1^{+(k^2)}$	D_0^+	$\frac{1}{\sqrt{3}}\hat{k}^2$	$\frac{1}{\sqrt{3}}\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$
$\Gamma_3^{(k^2)}$	$\Gamma_3^{+(k^2)}$	$[D_2^+]_{1-2}$	$\frac{1}{\sqrt{6}}(2\hat{k}_z^2 - \hat{k}_x^2 - \hat{k}_y^2)$	$\frac{1}{\sqrt{6}}\begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 2 \end{pmatrix}$
			$\frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{k}_x^2 - \hat{k}_y^2)$	$\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$
$\Gamma_4^{(k^2)}$	$\Gamma_4^{+(k^2)}$	D_1^+	$\frac{1}{\sqrt{2}}[\hat{k}_y, \hat{k}_z]$	$\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & -1 & 0 \end{pmatrix}$
			$\frac{1}{\sqrt{2}}[\hat{k}_z, \hat{k}_x]$	$\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$
			$\frac{1}{\sqrt{2}}[\hat{k}_x, \hat{k}_y]$	$\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$

Таблица Б.2: Матрицы \mathbf{Q} и \mathbf{K} (часть 2)

Представление			Базис	
T_d	O_h	$O(3)$	Компактно	Явно
$\Gamma_5^{(k)}$	$\Gamma_4^{-(k)}$	D_1^-	$\frac{1}{\sqrt{2}}\{\hat{k}_x, 1\}$	$\frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$
			$\frac{1}{\sqrt{2}}\{\hat{k}_y, 1\}$	$\frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$
			$\frac{1}{\sqrt{2}}\{\hat{k}_z, 1\}$	$\frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$
$\Gamma'_5^{(k)}$	$\Gamma'_4^{-(k)}$	D_1^-	$\frac{1}{\sqrt{2}}[\hat{k}_x, 1]$	$\frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$
			$\frac{1}{\sqrt{2}}[\hat{k}_y, 1]$	$\frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$
			$\frac{1}{\sqrt{2}}[\hat{k}_z, 1]$	$\frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ -1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$

Таблица Б.3: Матрицы \mathbf{Q} и \mathbf{K} (часть 3)

Представление			Базис	
T_d	O_h	$O(3)$	Компактно	Явно
$\Gamma_5^{(k^2)}$	$\Gamma_5^{+(k^2)}$	$[D_2^+]_{3-5}$	$\frac{1}{\sqrt{2}}\{\hat{k}_y, \hat{k}_z\}$	$\frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$
			$\frac{1}{\sqrt{2}}\{\hat{k}_z, \hat{k}_x\}$	$\frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$
			$\frac{1}{\sqrt{2}}\{\hat{k}_x, \hat{k}_y\}$	$\frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$

В Инварианты и параметры в гамильтониане Кейна

В следующих таблицах мы указываем соответствие между инвариантами и параметрами в гамильтониане, используемом при расчётах. Инварианты сгруппированы по блокам гамильтониана и обозначены с помощью представлений групп точечной симметрии кристаллов (тетраэдрической T_d и кубической O_h) и полной группы трёхмерных вращений $O(3)$. Параметры, соответствующие каждому инварианту перечислены в последнем столбце, где

$$\alpha = \frac{\hbar^2}{2m_0}.$$

Таблица B.1: Основная часть

Блок	Представление		Коэффициент
	базиса	оператора	
	$T_d, O_h, O(3)$	$T_d, O_h, O(3)$	
c, c	$\Gamma_1, \Gamma_1^+, D_0^+$	$\Gamma_1^{(1)}, \Gamma_1^{+(1)}, D_0^+$	$\sqrt{2} \cdot E_c$
c, v	$\Gamma_1, \Gamma_1^+, D_0^+$	$\Gamma_1^{(k^2)}, \Gamma_1^{+(k^2)}, D_0^+$	$\sqrt{6}\alpha \cdot (2F + 1)$
c, s	$\Gamma_5, \Gamma_4^-, D_1^-$	$\Gamma_5^{(k)}, \Gamma_4^{-(k)}, D_1^-$	$\sqrt{\frac{2}{3}} \cdot P$
v, v	$\Gamma_5, \Gamma_4^-, D_1^-$	$\Gamma_5^{(k)}, \Gamma_4^{-(k)}, D_1^-$	$-\frac{1}{\sqrt{3}} \cdot P$
	$\Gamma_1, \Gamma_1^+, D_0^+$	$\Gamma_1^{(1)}, \Gamma_1^{+(1)}, D_0^+$	$2 \cdot E_v$
	$\Gamma_1, \Gamma_1^+, D_0^+$	$\Gamma_1^{(k^2)}, \Gamma_1^{+(k^2)}, D_0^+$	$-2\sqrt{3}\alpha \cdot \gamma_1$
v, s	$-,-, D_2^+$	$-,-, D_2^+$	$2\sqrt{6}\alpha \cdot \frac{1}{5}(2\gamma_2 + 3\gamma_3)$
	$\Gamma_3, \Gamma_3^+, -$	$\Gamma_3^{(k^2)}, \Gamma_3^{+(k^2)}, -$	$\frac{6\sqrt{6}}{5}\alpha \cdot (\gamma_2 - \gamma_3)$
	$\Gamma_5, \Gamma_5^+, -$	$\Gamma_5^{(k^2)}, \Gamma_5^{+(k^2)}, -$	$-\frac{4\sqrt{6}}{5}\alpha \cdot (\gamma_2 - \gamma_3)$
s, s	$-,-, D_2^+$	$-,-, D_2^+$	$2\sqrt{6}\alpha \cdot \frac{1}{5}(2\gamma_2 + 3\gamma_3)$
	$\Gamma_3, \Gamma_3^+, -$	$\Gamma_3^{(k^2)}, \Gamma_3^{+(k^2)}, -$	$\frac{6\sqrt{6}}{5}\alpha \cdot (\gamma_2 - \gamma_3)$
	$\Gamma_5, \Gamma_5^+, -$	$\Gamma_5^{(k^2)}, \Gamma_5^{+(k^2)}, -$	$-\frac{4\sqrt{6}}{5}\alpha \cdot (\gamma_2 - \gamma_3)$
	$\Gamma_1, \Gamma_1^+, D_0^+$	$\Gamma_1^{(1)}, \Gamma_1^{+(1)}, D_0^+$	$\sqrt{2} \cdot (E_v - \Delta)$
	$\Gamma_1, \Gamma_1^+, D_0^+$	$\Gamma_1^{(k^2)}, \Gamma_1^{+(k^2)}, D_0^+$	$-\sqrt{6}\alpha \cdot \gamma_1$

Таблица В.2: Коммутаторы и поправки, связанные с отсутствием центра инверсии

Блок	Представление		Коэффициент
	базиса	оператора	
	$T_d, O_h, O(3)$	$T_d, O_h, O(3)$	
c, c	$\Gamma_4, \Gamma_4^+, D_1^+$	$\Gamma_4^{(k^2)}, \Gamma_4^{+(k^2)}, D_1^+$	$i\alpha \cdot \frac{1}{2}$
c, v	$\Gamma_5, \Gamma_4^-, D_1^-$	$\Gamma_5^{(k^2)}, \Gamma_4^{+(k^2)}, D_1^+$	$i\sqrt{\frac{2}{3}} \cdot B_8$
c, s	$\Gamma_5, \Gamma_4^-, D_1^-$	$\Gamma_5^{(k^2)}, \Gamma_4^{+(k^2)}, D_1^+$	$-i\frac{1}{\sqrt{3}} \cdot B_8$
v, v	$\Gamma_4, \Gamma_4^+, D_1^+$	$\Gamma_4^{(k^2)}, \Gamma_4^{+(k^2)}, D_1^+$	$-2\sqrt{10}i\alpha \cdot \kappa$
v, s	$\Gamma_4, \Gamma_4^+, D_1^+$	$\Gamma_4^{(k^2)}, \Gamma_4^{+(k^2)}, D_1^+$	$-2\sqrt{2}i\alpha \cdot \kappa$
s, s	$\Gamma_4, \Gamma_4^+, D_1^+$	$\Gamma_4^{(k^2)}, \Gamma_4^{+(k^2)}, D_1^+$	$-4i\alpha \cdot \kappa$

Таблица В.3: Деформация

Блок	Представление		Коэффициент
	базиса	оператора	
	$T_d, O_h, O(3)$	$T_d, O_h, O(3)$	
c, c	$\Gamma_1, \Gamma_1^+, D_0^+$	$\Gamma_1^{(k^2)}, \Gamma_1^{+(k^2)}, D_0^+$	$\sqrt{6} \cdot a_c$
v, v	$\Gamma_1, \Gamma_1^+, D_0^+$	$\Gamma_1^{(k^2)}, \Gamma_1^{+(k^2)}, D_0^+$	$2\sqrt{3} \cdot a_v$
	$-, -, D_2^+$	$-, -, D_2^+$	$-2\sqrt{6} \cdot \frac{1}{5} \left(b + \frac{\sqrt{3}}{2}d \right)$
	$\Gamma_3, \Gamma_3^+, -$	$\Gamma_3^{(k^2)}, \Gamma_3^{+(k^2)}, -$	$-3\sqrt{2} \cdot \frac{1}{5}(\sqrt{3}b - d)$
	$\Gamma_5, \Gamma_5^+, -$	$\Gamma_5^{(k^2)}, \Gamma_5^{+(k^2)}, -$	$2\sqrt{2} \cdot \frac{1}{5}(\sqrt{3}b - d)$
v, s	$-, -, D_2^+$	$-, -, D_2^+$	$-2\sqrt{6} \cdot \frac{1}{5} \left(b + \frac{\sqrt{3}}{2}d \right)$
	$\Gamma_3, \Gamma_3^+, -$	$\Gamma_3^{(k^2)}, \Gamma_3^{+(k^2)}, -$	$-3\sqrt{2} \cdot \frac{1}{5}(\sqrt{3}b - d)$
	$\Gamma_5, \Gamma_5^+, -$	$\Gamma_5^{(k^2)}, \Gamma_5^{+(k^2)}, -$	$2\sqrt{2} \cdot \frac{1}{5}(\sqrt{3}b - d)$
s, s	$\Gamma_1, \Gamma_1^+, D_0^+$	$\Gamma_1^{(k^2)}, \Gamma_1^{+(k^2)}, D_0^+$	$\sqrt{6} \cdot a_v$

Г Обозначения

- \hbar — постоянная планка;
- m_0 — масса свободного электрона;
- e — элементарный заряд (положительная величина);
- c — скорость света;
- $\mathbf{A} * \mathbf{B}$ — скалярное произведение Гильберта—Шмидта:

$$\mathbf{A} * \mathbf{B} = \sum_{ij} A_{ij} B_{ij};$$

- $\mathbf{A} \otimes \mathbf{B}$ — прямое произведение матриц:

$$(\mathbf{A} \otimes \mathbf{B}) = \begin{pmatrix} A_{11}\mathbf{B} & A_{12}\mathbf{B} & \dots \\ A_{21}\mathbf{B} & A_{22}\mathbf{B} & \dots \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix};$$

- $[\hat{A}, \hat{B}]$ — коммутатор:

$$[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A};$$

- $\{\hat{A}, \hat{B}\}$ — антисимметрический оператор:

$$\{\hat{A}, \hat{B}\} = \hat{A}\hat{B} + \hat{B}\hat{A}.$$

Список литературы

1. Bernevig, B. A. *Quantum Spin Hall Effect and Topological Phase Transition in HgTe Quantum Wells* / B. A. Bernevig, T. L. Hughes, S.-C. Zhang // Science. — 2006. — Vol. 314, no. 5806. — Pp. 1757–1761.
2. König, M. *Quantum Spin Hall Insulator State in HgTe Quantum Wells* / M. König, S. Wiedmann, C. Brüne, A. Roth, H. Buhmann, L. W. Molenkamp, X.-L. Qi, S.-C. Zhang // Science. — 2007. — Vol. 318, no. 5851. — Pp. 766–770.
3. Meyer, J. R. *Magneto-optical properties of HgTe-CdTe superlattices* / J. R. Meyer, R. J. Wagner, F. J. Bartoli, C. A. Hoffman, M. Dobrowolska, T. Wojtowicz, J. K. Furdyna, L. R. Ram-Mohan // Phys. Rev. B. — 1990. — Nov. — Vol. 42, issue 14. — Pp. 9050–9062.
4. Schultz, M. *Crossing of conduction- and valence-subband Landau levels in an inverted HgTe/CdTe quantum well* / M. Schultz, U. Merkt, A. Sonntag, U. Rössler, R. Winkler, T. Colin, P. Helgesen, T. Skauli, S. Løvold // Phys. Rev. B. — 1998. — June. — Vol. 57, issue 23. — Pp. 14772–14775.
5. Schulman, J. N. *The CdTe/HgTe superlattice: Proposal for a new infrared material* / J. N. Schulman, T. C. McGill // Applied Physics Letters. — 1979. — Vol. 34, no. 10. — Pp. 663–665.
6. Rogalski, A. *HgCdTe infrared detector material: history, status and outlook* / A. Rogalski // Reports on Progress in Physics. — 2005. — Vol. 68, no. 10. — P. 2267.
7. Zhang, X. C. *Rashba splitting in n-type modulation-doped HgTe quantum wells with an inverted band structure* / X. C. Zhang, A. Pfeuffer-Jeschke, K. Ortner, V. Hock, H. Buhmann, C. R. Becker, G. Landwehr // Phys. Rev. B. — 2001. — May. — Vol. 63, issue 24. — P. 245305.

8. Gui, Y. S. *Giant spin-orbit splitting in a HgTe quantum well* / 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, L. W. Molenkamp // Phys. Rev. B. — 2004. — Sept. — Vol. 70, issue 11. — P. 115328.
9. Novik, E. G. *Band structure of semimagnetic $Hg_{1-y}Mn_yTe$ quantum wells* / E. G. Novik, A. Pfeuffer-Jeschke, T. Jungwirth, V. Latussek, C. R. Becker, G. Landwehr, H. Buhmann, L. W. Molenkamp // Phys. Rev. B. — 2005. — July. — Vol. 72, issue 3. — P. 035321.
10. Mikhailov, N. N. *Growth of $Hg_{1-x}Cd_xTe$ nanostructures by molecular beam epitaxy with ellipsometric control* / N. N. Mikhailov, R. N. Smirnov, S. A. Dvoretsky, Y. G. Sidorov, V. A. Shvets, E. V. Spesivtsev, R. S. V. // Int. J. Nanotechnology. — 2006. — Vol. 3, issue 1. — Pp. 120–130.
11. Dvoretsky, S. *Growth of HgTe Quantum Wells for IR to THz Detectors* / S. Dvoretsky, N. Mikhailov, Y. Sidorov, V. Shvets, S. Danilov, B. Wittman, S. Ganichev // Journal of Electronic Materials. — 2010. — Vol. 39, no. 7. — Pp. 918–923.
12. Büttner, B. *Single valley Dirac fermions in zero-gap HgTe quantum wells* / B. Büttner, C. X. Liu, G. Tkachov, E. G. Novik, C. Brune, H. Buhmann, E. M. Hankiewicz, P. Recher, B. Trauzettel, S. C. Zhang, L. W. Molenkamp // Nature Physics. — Vol. 7, no. 5. — Pp. 418–422.
13. Gusev, G. M. *Quantum Hall Effect near the Charge Neutrality Point in a Two-Dimensional Electron-Hole System* / G. M. Gusev, E. B. Olshanetsky, Z. D. Kvon, N. N. Mikhailov, S. A. Dvoretsky, J. C. Portal // Phys. Rev. Lett. — 2010. — Apr. — Vol. 104, issue 16. — P. 166401.
14. Квон, З. Д.. *Двумерная электронно-дырочная система в квантовой яме на основе $HgTe$* / З. Д. Квон, Е. Б. Ольшанецкий, Д. А. Козлов, Н. Н. Михайлов, С. А. Дворецкий // Письма в ЖЭТФ. — 2008. — Т. 87, № 9. — С. 588—591.
15. Bastard, G. *Theoretical investigations of superlattice band structure in the envelope-function approximation* / G. Bastard // Phys. Rev. B. — 1982. — June. — Vol. 25, issue 12. — Pp. 7584–7597.
16. Burt, M. G. *The justification for applying the effective-mass approximation to microstructures* / M. G. Burt // J. Phys.: Condens. Matter. — 1992. — Vol. 4. — P. 6651.

17. Los, J. *Generalization of the $k \cdot p$ approach for strained layered semiconductor structures grown on high-index-planes* / J. Los, A. Fasolino, A. Catellani // Phys. Rev. B. — 1996. — Vol. 53. — P. 4630.
19. Luttinger, J. M. *Motion of Electrons and Holes in Perturbed Periodic Fields* / J. M. Luttinger, W. Kohn // Phys. Rev. — 1955. — Feb. — Vol. 97, issue 4. — Pp. 869–883.
20. Dingle, R. *Quantum States of Confined Carriers in Very Thin $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As-GaAs-Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ Heterostructures* / R. Dingle, W. Wiegmann, C. H. Henry // Phys. Rev. Lett. — 1974. — Sept. — Vol. 33, issue 14. — Pp. 827–830.
21. Эфрос, Ал. Л. *Межзонное поглощение света в полупроводниковом шаре* / Ал. Л. Эфрос, А. Л. Эфрос // Физика и техника полупроводников. — 1982. — Т. 16, № 7. — С. 1209—1214.
22. Ландау, Л. Д. *Теоретическая физика в 10 томах, Квантовая механика (нерелятивистская теория)* / Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц ; под ред. Л. П. Питаевского. — М.: Наука, 1989.
23. Mukherji, D. *Band structure of semiconductor superlattices* / D. Mukherji, B. R. Nag // Phys. Rev. B. — 1975. — Nov. — Vol. 12, issue 10. — Pp. 4338–4345.
24. Sai-Halasz, G. A. *A new semiconductor superlattice* / G. A. Sai-Halasz, R. Tsu, L. Esaki // Applied Physics Letters. — 1977. — Vol. 30, no. 12. — Pp. 651–653.
25. Morrow, R. A. *Model effective-mass Hamiltonians for abrupt heterojunctions and the associated wave-function-matching conditions* / R. A. Morrow, K. R. Brownstein // Phys. Rev. B. — 1984. — July. — Vol. 30, issue 2. — Pp. 678–680.
26. Leibler, L. *Effective-mass theory for carriers in graded mixed semiconductors* / L. Leibler // Phys. Rev. B. — 1975. — Nov. — Vol. 12, issue 10. — Pp. 4443–4451.
27. Foreman, B. A. *Connection Rules versus Differential Equations for Envelope Functions in Abrupt Heterostructures* / B. A. Foreman // Phys. Rev. Lett. — 1998. — Apr. — Vol. 80, issue 17. — Pp. 3823–3826.
28. Klipstein, P. C. *Operator ordering and interface-band mixing in the Kane-like Hamiltonian of lattice-matched semiconductor superlattices with abrupt interfaces* / P. C. Klipstein // Phys. Rev. B. — 2010. — June. — Vol. 81, issue 23. — P. 235314.

29. Тахтамиров, Э. Е. *Обобщение метода эффективной массы для полупроводниковых структур с атомарно резкими гетеропереходами* / Э. Е. Тахтамиров, В. А. Волков // ЖЭТФ. — 1999. — Т. 116, № 5. — С. 1843—1870.
30. Foreman, B. A. *First-principles envelope-function theory for lattice-matched semiconductor heterostructures* / B. A. Foreman // Phys. Rev. B. — 2005. — Oct. — Vol. 72, issue 16. — P. 165345.
31. Foreman, B. A. *Valence-band mixing in first-principles envelope-function theory* / B. A. Foreman // Phys. Rev. B. — 2007. — July. — Vol. 76, issue 4. — P. 045327.
32. Bastard, G. *Superlattice band structure in the envelope-function approximation* / G. Bastard // Phys. Rev. B. — 1981. — Nov. — Vol. 24, issue 10. — Pp. 5693—5697.
33. Bastard, G. *Wave Mechanics Applied to Semiconductor Heterostructures* / G. Bastard. — Les Editions de Physique, 1991.
34. Foreman, B. A. *Effective-mass Hamiltonian and boundary conditions for the valence bands of semiconductor microstructures* / B. A. Foreman // Phys. Rev. B. — 1993. — Aug. — Vol. 48, issue 7. — Pp. 4964—4967.
35. Foreman, B. A. *Elimination of spurious solutions from eight-band $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ theory* / B. A. Foreman // Phys. Rev. B. — 1997. — Nov. — Vol. 56, issue 20. — R12748—R12751.
36. White, S. R. *Electronic Properties of Flat-Band Semiconductor Heterostructures* / S. R. White, L. J. Sham // Phys. Rev. Lett. — 1981. — Sept. — Vol. 47, issue 12. — Pp. 879—882.
37. Schuurmans, M. F. H. *Simple calculations of confinement states in a quantum well* / M. F. H. Schuurmans, G. W. 't Hooft // Phys. Rev. B. — 1985. — June. — Vol. 31, issue 12. — Pp. 8041—8048.
38. Ram-Mohan, L. R. *Transfer-matrix algorithm for the calculation of the band structure of semiconductor superlattices* / L. R. Ram-Mohan, K. H. Yoo, R. L. Aggarwal // Phys. Rev. B. — 1988. — Sept. — Vol. 38, issue 9. — Pp. 6151—6159.
39. Ko, D. Y. K. *Matrix method for tunneling in heterostructures: Resonant tunneling in multilayer systems* / D. Y. K. Ko, J. C. Inkson // Phys. Rev. B. — 1988. — Nov. — Vol. 38, issue 14. — Pp. 9945—9951.

40. Tsuneya, A. *Hole Subband at GaAs/AlGaAs Heterojunctions and Quantum Wells* / T. Ando // Journal of the Physical Society of Japan. — 1985. — Vol. 54, no. 4. — Pp. 1528–1536.
41. Ekenberg, U. *Calculation of hole subbands at the GaAs-Al_xGa_{1-x}As interface* / U. Ekenberg, M. Altarelli // Phys. Rev. B. — 1984. — Sept. — Vol. 30, issue 6. — Pp. 3569–3572.
42. Baumgartner, M. *Hole sub-bands on silicon surfaces* / M. Baumgartner, G. Abstreiter, E. Bangert // Journal of Physics C: Solid State Physics. — 1984. — Vol. 17, no. 9. — P. 1617.
43. Broido, D. A. *Effective masses of holes at GaAs-AlGaAs heterojunctions* / D. A. Broido, L. J. Sham // Phys. Rev. B. — 1985. — Jan. — Vol. 31, issue 2. — Pp. 888–892.
44. Winkler, R. *General approach to the envelope-function approximation based on a quadrature method* / R. Winkler, U. Rössler // Phys. Rev. B. — 1993. — Sept. — Vol. 48, issue 12. — Pp. 8918–8927.
45. Kane, E. *Band Structure of Indium Antimonide* / E. O. Kane // J. Phys. Chem. Solids. — 1957. — Vol. 1. — P. 249.
46. Dresselhaus, G. *Cyclotron Resonance of Electrons and Holes in Silicon and Germanium Crystals* / G. Dresselhaus, A. F. Kip, C. Kittel // Phys. Rev. — 1955. — Apr. — Vol. 98, issue 2. — Pp. 368–384.
47. Raichev, O. E. *Effective Hamiltonian, energy spectrum, and phase transition induced by in-plane magnetic field in symmetric HgTe quantum wells* / O. E. Raichev // Phys. Rev. B. — 2012. — Jan. — Vol. 85, issue 4. — P. 045310.
48. Groves, S. *Band Structure of Gray Tin* / S. Groves, W. Paul // Phys. Rev. Lett. — 1963. — Sept. — Vol. 11, issue 5. — Pp. 194–196.
49. Гельмонт, Б.Л.. / Б. Гельмонт, В. Иванов-Омский, И. Цидильковский // Успехи физических наук. — 1976. — Т. 120, вып. 3. — С. 337.
50. Orlita, M. *Fine structure of zero-mode Landau levels in HgTe/Hg_xCd_{1-x}Te quantum wells* / M. Orlita, K. Masztalerz, C. Faugeras, M. Potemski, E. G. Novik, C. Brüne, H. Buhmann, L. W. Molenkamp // Phys. Rev. B. — 2011. — Mar. — Vol. 83, issue 11. — P. 115307.

51. Yang, Z. *Optical properties of HgTe/CdTe superlattices in the normal, semimetallic, and inverted-band regimes* / Z. Yang, Z. Yu, Y. Lansari, S. Hwang, J. W. Cook, J. F. Schetzina // Phys. Rev. B. — 1994. — Mar. — Vol. 49, issue 12. — Pp. 8096–8108.
52. von Truchseß, M. *Magneto-optics and valence-band discontinuity in a HgTe-Hg_{1-x}Cd_xTe superlattice* / M. von Truchseß, V. Latussek, F. Goschenhofer, C. R. Becker, G. Landwehr, E. Batke, R. Sizmann, P. Helgesen // Phys. Rev. B. — 1995. — June. — Vol. 51, issue 24. — Pp. 17618–17623.
53. Becker, C. R. *Band structure and its temperature dependence for type-III HgTe/Hg_{1-x}Cd_xTe superlattices and their semimetal constituent* / C. R. Becker, V. Latussek, A. Pfeuffer-Jeschke, G. Landwehr, L. W. Molenkamp // Phys. Rev. B. — 2000. — Oct. — Vol. 62, issue 15. — Pp. 10353–10363.
54. Ortner, K. *Valence band structure of HgTe/Hg_{1-x}Cd_xTe single quantum wells* / K. Ortner, X. C. Zhang, A. Pfeuffer-Jeschke, C. R. Becker, G. Landwehr, L. W. Molenkamp // Phys. Rev. B. — 2002. — Aug. — Vol. 66, issue 7. — P. 075322.
55. Zhang, X. C. *Absence of magneto-intersubband scattering in n-type HgTe quantum wells* / X. C. Zhang, A. Pfeuffer-Jeschke, K. Ortner, C. R. Becker, G. Landwehr // Phys. Rev. B. — 2002. — Jan. — Vol. 65, issue 4. — P. 045324.
56. Becker, C. R. *Inverted band structure of type-III HgTe/Hg_{1-x}Cd_xTe superlattices and its temperature dependence* / C. R. Becker, V. Latussek, G. Landwehr, L. W. Molenkamp // Phys. Rev. B. — 2003. — July. — Vol. 68, issue 3. — P. 035202.
57. Schulman, J. N. *Light hole interband transitions in HgTe-HgCdTe superlattices* / J. N. Schulman, O. K. Wu, E. A. Patten, J. W. Han, Y. Lansari, L. S. Kim, J. J. W. Cook, J. F. Schetzina // Applied Physics Letters. — 1988. — Vol. 53, no. 24. — Pp. 2420–2422.
58. Guldner, Y. *Magneto-Optical Investigations of a Novel Superlattice: HgTe-CdTe* / Y. Guldner, G. Bastard, J. P. Vieren, M. Voos, J. P. Faurie, A. Million // Phys. Rev. Lett. — 1983. — Sept. — Vol. 51, issue 10. — Pp. 907–910.

59. Johnson, N. F. *Valence-Band-Offset Controversy in HgTe/CdTe Superlattices: A Possible Resolution* / N. F. Johnson, P. M. Hui, H. Ehrenreich // Phys. Rev. Lett. — 1988. — Oct. — Vol. 61, issue 17. — Pp. 1993–1995.
60. Yoo, K. H. *Room-temperature magnetoabsorption in HgTe/Hg_{0.15}Cd_{0.85}Te superlattices* / K. H. Yoo, R. L. Aggarwal, L. R. Ram-Mohan, O. K. Wu // Journal of Vacuum Science & Technology A: Vacuum, Surfaces, and Films. — 1990. — Vol. 8, no. 2. — Pp. 1194–1199.
18. Winkler, R. *Spin–Orbit Coupling Effects in Two-Dimensional Electron and Hole Systems* / R. Winkler. — Springer Berlin / Heidelberg, 2003.
61. Voon, L. *The K-p Method: Electronic Properties of Semiconductors* / L. Voon, M. Willatzen. — Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 2009.
62. Бир, Г. Л. *Симметрия и деформационные эффекты в полупроводниках* / Г. Л. Бир, Г. Е. Пикус. — М.: Наука, 1972.
63. Koster, G. F. *Properties of the thirty-two point groups* / G. F. Koster. — Cambridge, Mass., M.I.T. Press, 1963.
64. Ландау, Л. Д. *Теоретическая физика в 10 томах, Теория упругости* / Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц ; под ред. Л. П. Питаевского. — М.: Наука, 1989.
65. Варшалович, Д. А.. *Квантовая теория углового момента* / Д. А. Варшалович, А. Н. Москалев, В. К. Херсонский. — Л.: Наука, 1975.
66. Weiler, M. H. *Warping- and inversion-asymmetry-induced cyclotron-harmonic transitions in InSb* / M. H. Weiler, R. L. Aggarwal, B. Lax // Phys. Rev. B. — 1978. — Apr. — Vol. 17, issue 8. — Pp. 3269–3283.
67. Dresselhaus, G. *Spin-Orbit Coupling Effects in Zinc Blende Structures* / G. Dresselhaus // Phys. Rev. — 1955. — Oct. — Vol. 100, issue 2. — Pp. 580–586.
68. Takita, K. *Anomalous magnetoresistance and band crossing in uniaxially compressed HgTe* / K. Takita, K. Onabe, S. Tanaka // physica status solidi (b). — 1979. — Vol. 92, no. 1. — Pp. 297–306.
69. Laurenti, J. P. *Temperature dependence of the fundamental absorption edge of mercury cadmium telluride* / J. P. Laurenti, J. Camassel, A. Bouhemadou, B. Toulouse, R. Legros, A. Lusson // Journal of Applied Physics. — 1990. — Vol. 67, no. 10. — Pp. 6454–6460.

70. Talwar, D. N. *Vibrational properties of HgCdTe system* / D. N. Talwar, M. Vandevyver // Journal of Applied Physics. — 1984. — Vol. 56, no. 6. — Pp. 1601–1607.
71. Ю, П. *Основы физики полупроводников* / П. Ю, М. Кардона. — Москва Физматлит, 2002.
72. Schultz, M. *Rashba spin splitting in a gated HgTe quantum well* / M. Schultz, F. Heinrichs, U. Merkt, T. Colin, T. Skauli, S. Løvold // Semiconductor Science and Technology. — 1996. — Т. 11, № 8. — С. 1168.
73. Квон, З. Д.. *Двумерные электронные системы в квантовых ямах на основе HgTe* / З. Д. Квон, Е. Б. Ольшанецкий, Н. Н. Михайлов, Д. А. Козлов // Физика низких температур. — 2009. — Т. 35, № 1. — С. 10—20.
74. Козлов, Д. А.. *Двумерная электронно-дырочная система в квантовой яме на основе HgTe* / Д. А. Козлов, З. Д. Квон, Н. Н. Михайлов, С. А. Дворецкий, J. C. Portal // Письма в ЖЭТФ. — 2011. — Т. 93, № 3. — С. 186—189.
75. Грешнов, А. А.. *Проявление полуметаллического состояния в циклотронном резонансе низкосимметричных квантовых ям на основе HgTe* / А. А. Грешнов, Ю. Б. Васильев, Н. Н. Михайлов, Г. Ю. Васильева, Д. Смирнов // Письма в ЖЭТФ. — 2013. — Т. 97, № 2. — С. 108—113.
76. Winkler, R. *Robust level coincidences in the subband structure of quasi-2D systems* / R. Winkler, L. Wang, Y. Lin, C. Chu // Solid State Communications. — 2012. — Т. 152, № 23. — С. 2096—2099.
77. Luttinger, J. M. *Quantum Theory of Cyclotron Resonance in Semiconductors: General Theory* / J. M. Luttinger // Phys. Rev. — 1956. — May. — Vol. 102, issue 4. — Pp. 1030–1041.
78. Löwdin, P.-O. *A note on the quantum-mechanical perturbation theory* / P.-O. Löwdin // J. Chem. Phys. — 1951. — Nov. — Vol. 19, no. 11. — Pp. 1396–1401.
79. Leibler, L. *Effective-mass theory for carriers in graded mixed semiconductors. II. Spin effects* / L. Leibler // Phys. Rev. B. — 1977. — July. — Vol. 16, issue 2. — Pp. 863–873.

80. Drachenko, O. *Compact magnetospectrometer for pulsed magnets based on infrared quantum cascade lasers* / O. Drachenko, S. Winnerl, H. Schneider, M. Helm, J. Wosnitza, J. Leotin // Review of Scientific Instruments. — 2011. — Vol. 82, no. 3. — P. 033108.
81. И. М. Цидильковский // Успехи физических наук. — 1992. — Т. 162. — С. 63.

Список публикаций автора

- A1. Ikonnikov, A. V. *Cyclotron resonance and interband optical transitions in HgTe/CdTe(013) quantum well heterostructures* / 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, W. Knap // *Semiconductor Science and Technology*. — 2011. — Vol. 26, no. 12. — P. 125011.
- A2. Zholudev, M. *Magnetospectroscopy of two-dimensional HgTe-based topological insulators around the critical thickness* / 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, W. Knap // *Phys. Rev. B*. — 2012. — Nov. — Vol. 86, issue 20. — P. 205420.
- A3. Морозов, С. В. *Исследования времен жизни и релаксации фотопроводимости в гетероструктурах с квантовыми ямами $Hg_{1-x}Cd_xTe/Cd_yHg_{1-y}Te$* / С. В. Морозов, М. С. Жолудев, А. В. Антонов, В. В. Румянцев, В. И. Гавриленко, В. Я. Алешкин, А. А. Дубинов, Н. Н. Михайлов, С. А. Дворецкий, О. Drachenko, S. Winnerl, H. Schneider, M. Helm // *Физика и техника полупроводников*. — 2012. — Т. 46, № 11. — С. 1388—1392.
- A4. Румянцев, В. В. *Особенности спектров и кинетики релаксации длинноволновой фотопроводимости в узкозонных эпитаксиальных пленках и гетероструктурах с квантовыми ямами на основе $HgCdTe$* / В. В. Румянцев, А. В. Иконников, А. В. Антонов, С. В. Морозов, М. С. Жолудев, К. Е. Спирин, В. И. Гавриленко, С. А. Дворецкий, Н. Н. Михайлов // *Физика и техника полупроводников*. — 2013. — Т. 47, № 11. — С. 1446—1450.
- A5. Иконников, А. В. *Магнитопоглощение в узкозонных эпитаксиальных слоях $HgCdTe$ в терагерцовом диапазоне* / А. В. Иконников, М. С. Жолудев, В. И. Гавриленко, Н. Н. Михайлов, С. А. Дворецкий // *Физика и техника полупроводников*. — 2013. — Т. 47, № 12. — С. 1—6.

- A6. Zholudev, M. S. *Cyclotron resonance in HgCdTe-based heterostructures in strong magnetic fields* / M. S. Zholudev, F. Teppe, M. Orlita, V. Ya. Aleshkin, A. V. Ikonnikov, V. I. Gavrilenko, W. Knap, N. N. Mikhailov, S. A. Dvoretskii // Journal of Physics: Conference Series. — 2013. — Vol. 461, no. 1. — P. 012038.
- A7. Zholudev, M. S. *Cyclotron resonance in HgTe/CdTe-based heterostructures in high magnetic fields* / M. Zholudev, A. Ikonnikov, F. Teppe, M. Orlita, K. Maremyanin, K. Spirin, V. Gavrilenko, W. Knap, S. Dvoretskiy, N. Mihailov // Nanoscale Research Letters. — 2012. — Vol. 7, no. 1. — P. 534.
- A8. Иконников, А. В. *Циклотронный резонанс в узкозонных гетероструктурах на основе HgTe/CdTe(013) в квантующих магнитных полях* / 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. — 2012. — Т. 95, № 8. — С. 452—456.
- A9. Иконников, А. В. *Терагерцовая спектроскопия узкозонных гетероструктур с квантовыми ямами на основе HgTe/CdTe* / А. В. Иконников, А. А. Ластовкин, К. Е. Спирин, М. С. Жолудев, В. В. Румянцев, К. В. Маремьянин, А. В. Антонов, В. Я. Алешкин, В. И. Гавриленко, С. А. Дворецкий, Н. Н. Михайлов, Ю. Г. Садофеев, N. Samal // Письма в ЖЭТФ. — 2010. — Т. 92, № 11. — С. 837—841.
- A10. *Terahertz magnetospectroscopy of narrow-gap HgCdTe-based structures* / M. Zholudev, F. Teppe, W. Knap, M. Orlita, V. Aleshkin, V. Gavrilenko, N. Mikhailov, S. Dvoretskii // 38th International Conference on Infrared, Millimeter and Terahertz Waves. — Mainz, Germany, Sept. 2013.
- A11. *Terahertz magnetospectroscopy of narrow-gap HgCdTe-based structures* / M. Zholudev, M. Orlita, F. Teppe, W. Knap, V. Aleshkin, V. Gavrilenko, N. Mikhailov, S. Dvoretskii // GDR-I 2013 Workshop. — Cargese, France, Mar. 2013.
- A12. *Исследование циклотронного резонанса в полупроводниковых наноструктурах с квантовыми ямами на основе HgCdTe* / А. А. Ластовкин, А. В. Иконников, М. С. Жолудев, В. И. Гавриленко, О. Драченко, M. Helm, J. Wosnitza // Тез. докл. XVII Международного Симпозиума «Нанофизика и наноэлектроника». Т. 2. — Нижний Новгород, 2013. — С. 511—512.

- A13. *Spin Hall Effect influence on transport properties of HgCdTe 2D and 3D semiconductor systems* / F. Terpe, C. Consejo, W. Knap, N. Diakonova, C. B. Морозов, В. И. Гавриленко, В. В. Румянцев, М. С. Жолудев, Н. Н. Михайлов // Тез. докл. XVII Международного Симпозиума «Нанофизика и наноэлектроника». Т. 2. — Нижний Новгород, 2013. — С. 531—532.
- A14. *Квантовый магнитотранспорт в двойной квантовой яме HgTe* / М. В. Якунин, А. В. Суслов, А. П. Савельев, В. Я. Алёшкин, М. С. Жолудев, С. А. Дворецкий, Н. Н. Михайлов // Тез. докл. XVII Международного Симпозиума «Нанофизика и наноэлектроника». Т. 2. — Нижний Новгород, 2013. — С. 658—659.
- A15. *О возможности создания лазера дальнего ИК диапазона на основе соединений кадмий-ртуть-теллур* / В. И. Гавриленко, С. В. Морозов, А. А. Дубинов, М. С. Жолудев, В. В. Румянцев, В. Я. Алёшкин, Н. Н. Михайлов, С. А. Дворецкий // Тез. XI Росс. конф. по физике полупроводников. — Санкт-Петербург, сент. 2013. — С. 44.
- A16. *Магнитооптика дираковских фермионов в узкозонных квантовых ямах HgTe/CdTe* / А. В. Иконников, М. С. Жолудев, F. Terpe, M. Orlita, O. Drachenko, K. E. Спирин, К. В. Маремьянин, В. И. Гавриленко, С. А. Дворецкий, Н. Н. Михайлов // Тез. XI Росс. конф. по физике полупроводников. — Санкт-Петербург, сент. 2013. — С. 101.
- A17. *THz Response of HgTe/CdTe Quantum Wells and Narrow-Gap HgCdTe Films: from Fundamentals to Applications* / V. I. Gavrilenko, S. V. Morozov, V. V. Rumyantsev, M. S. Zholudev, A. V. Antonov, A. A. Dubinov, K. V. Maremyanin, K. E. Kudryavtsev, L. V. Krasilnikova, V. Ya. Aleshkin, N. N. Mikhailov, S. A. Dvoretsky // Abstr. Int. Conf. on Coherent and Nonlinear Optics/lasers, Applications, and technologies. — Moscow, June 2013. — JDB2.
- A18. *Optical study of HgCdTe based narrow-gap heterostructures* / V. I. Gavrilenko, S. V. Morozov, V. V. Rumyantsev, M. S. Zholudev, A. V. Antonov, A. A. Dubinov, K. V. Maremyanin, K. E. Kudryavtsev, L. V. Krasilnikova, V. Ya. Aleshkin, N. N. Mikhailov, S. A. Dvoretsky // Proc. 21st Int. Symp. «Nanostructures: Physics and Technology». — St.Petersburg, June 2013. — Pp. 252–253.
- A19. *Генерация и детектирование терагерцового излучения в узкозонных гетероструктурах с квантовыми ямами на основе HgTe/CdTe и эпитаксиальных слоях CdHgTe* / В. И. Гавриленко, В. В. Румянцев, М. С. Жолудев, А. В. Антонов,

- K. Е. Кудрявцев, Л. В. Красильникова, А. В. Иконников, А. А. Дубинов, С. В. Морозов, В. Я. Алёшкин, Н. Н. Михайлов, С. А. Дворецкий // IX Всероссийский семинар по радиофизике миллиметровых и субмиллиметровых волн. Тезисы докладов. — Нижний Новгород, 2013. — С. 23—24.
- A20. *Terahertz spectroscopy of narrow gap CdHgTe-based structures* / M. S. Zholudev, A. V. Ikonnikov, V. V. Rumyantsev, A. V. Antonov, K. E. Spirin, V. Ya. Aleshkin, V. I. Gavrilenco, F. Teppe, N. Diakonova, W. Knap, M. Orlita, N. N. Mihailov, S. A. Dvoretskii // GDR-I 2012 Workshop. — Tignes, France, Apr. 2012.
- A21. *Циклотронный резонанс и межзонные оптические переходы в гетероструктурах с квантовыми ямами на основе HgTe/CdTe(013)* / А. А. Ластовкин, А. В. Иконников, М. С. Жолудев, К. Е. Спирин, К. В. Маремьянин, В. Я. Алешкин, В. И. Гавриленко, О. Drachenko, M. Helm, J. Wosnitza, M. Goiran, Н. Н. Михайлов, С. А. Дворецкий, F. Teppe, N. Diakonova, C. Consejo, B. Chenaud, W. Knap // Межд. конф. XIV Харитоновские тематические научные чтения «Мощная импульсная электрофизика»: сборник тезисов докладов. — Саров, март 2012. — С. 108.
- A22. *Циклотронный резонанс в гетероструктурах на основе CdHgTe в сильных магнитных полях* / М. С. Жолудев, F. Teppe, M. Orlita, B. Я. Алёшкин, А. В. Иконников, В. И. Гавриленко, W. Knap, Н. Н. Михайлов, С. А. Дворецкий // Тез. докл. российской молодежной конф. по физике и астрономии «Физика.СПб». — С.Петербург, окт. 2012. — С. 145—146.
- A23. *Cyclotron resonance in HgTe/CdTe based heterostructures in quantizing magnetic fields* / A. Ikonnikov, M. Zholudev, A. Lastovkin, K. Maremyanin, K. Spirin, A. Antonov, V. Gavrilenco, M. Orlita, O. Drachenko, M. Helm, M. Goiran, F. Teppe, W. Knap, S. Dvoretskiy, N. Mihailov // Int. Conf. Superlattices, Nanostructures and Nanodevices. Vol. 2. — Dresden, Germany, July 2012. — P. 149.
- A24. *Investigation of THz photoconductivity and carriers lifetime in narrow-gap $Hg_{1-y}Cd_yTe/Cd_xHg_{1-x}Te$ QW and bulk structures with graphene-like energy-momentum law* / S. V. Morozov, V. V. Rumyantsev, V. Ya. Aleshkin, A. V. Antonov, M. S. Joludev, K. E. Kudryavtsev, V. I. Gavrilenco, N. N. Michailov, O. Drachenko, S. Winnerl, H. Schneider, M. Helm // Abstr. 3rd EOS Topical Meeting on Terahertz Science and technology. — Prague, Czech Republic, June 2012. — P. 5317.

- A25. *THz spectroscopy of narrow-gap HgTe/CdHgTe QWs and HgCdTe films* / V. I. Gavrilenko, A. V. Ikonnokov, M. S. Zhuludev, V. V. Rumyantsev, K. E. Spirin, A. A. Lastovkin, K. V. Maremyanin, A. V. Antonov, A. A. Dubinov, S. V. Morozov, V. Ya. Aleshkin, N. N. Mikhailov, S. A. Dvoretsky // Abst. 2nd Int. Conf. "Terahertz and Microwave radiation: Generation, Detection and Applications". — Moscow, июнь 2012. — С. 69.
- A26. *Терагерцовая фотопроводимость в узкозонных структурах на основе твердых растворов $Hg_{1-x}Cd_xTe$ ($x < 0.2$)* / В. В. Румянцев, С. В. Морозов, М. С. Жолудев, К. Е. Кудрявцев, А. В. Антонов, В. И. Гавриленко, С. А. Дворецкий, Н. Н. Михайлов // Труды XXII Международной научно-технической конференции, школы молодых специалистов и выставки по фотоэлектронике и приборам ночного видения. — Москва, май 2012. — С. 129—132.
- A27. *Циклотронный резонанс в гетероструктурах на основе $HgTe/CdTe$ в квантующих магнитных полях* / А. В. Иконников, М. С. Жолудев, К. В. Маремьянин, O. Drachenko, M. Orlita, F. Terpe, K. E. Spirin, Antonov, A. B., A. A. Lastovkin, B. I. Gavrilenko, C. A. Dvorenckij, N. N. Mikhailov, M. Goiran, M. Helm, J. Wosnitza, W. Knap // Тез. докл. XVI Международного Симпозиума «Нанофизика иnanoэлектроника». Т. 1. — Нижний Новгород, 2012. — С. 255—256.
- A28. *Исследования времен жизни и релаксации фотопроводимости в гетероструктурах с квантовыми ямами $Hg_{1-y}Cd_yTe/Cd_xHg_{1-x}Te$* / С. В. Морозов, М. С. Жолудев, А. В. Антонов, В. В. Румянцев, А. А. Дубинов, В. Я. Алешкин, В. И. Гавриленко, С. А. Дворецкий, Н. Н. Михайлов, O. Drachenko, S. Winnerl, H. Schneider, M. Helm // Тез. докл. XVI Международного Симпозиума «Нанофизика и nanoэлектроника». Т. 1. — Нижний Новгород, 2012. — С. 318—319.
- A29. *Узкозонные гетероструктуры с квантовыми ямами на основе $HgTe/CdTe$* / В. И. Гавриленко, К. Е. Спирин, А. В. Иконников, М. С. Жолудев, А. В. Антонов, А. А. Ластовкин, В. В. Румянцев, В. Я. Алешкин, С. А. Дворецкий, Н. Н. Михайлов // Тез. X Росс. конф. по физике полупроводников. — Нижний Новгород, сент. 2011. — С. 51.
- A30. *Циклотронный резонанс в гетероструктурах на основе $HgTe/CdHgTe$ с квантовыми ямами* / А. В. Иконников, А. А. Ластовкин, М. С. Жолудев, К. В. Маремьянин, В. И. Гавриленко, С. А. Дворецкий, Н. Н. Михайлов // Тез. X Росс. конф. по физике полупроводников. — Нижний Новгород, сент. 2011. — С. 88.

- А31. *Терагерцовая фотопроводимость гетероструктур с квантовыми ямами $Hg_{1-x}Cd_xTe/Cd_yHg_{1-y}Te$* / К. Е. Спирин, М. Жолудев, А. Антонов, В. Румянцев, В. Гавриленко, Н. Михайлов, С. А. Дворецкий // Тез. X Росс. конф. по физике полупроводников. — Нижний Новгород, сент. 2011. — С. 188.
- А32. *Терагерцовая фотопроводимость в гетероструктурах $HgCdTe/CdHgTe(013)$ с квантовыми ямами* / К. Е. Спирин, М. С. Жолудев, А. В. Антонов, В. В. Румянцев, В. И. Гавриленко, Н. Н. Михайлов, С. А. Дворецкий // Тез. докл. Росс. конф. и школы по актуальным проблемам полупроводниковой нанофотоэлектроники «Фотоника-2011». — Новосибирск, авг. 2011. — С. 43.
- А33. *Узкозонные гетероструктуры с квантовыми ямами на основе $HgTe/CdTe$ для приёмников терагерцового диапазона* / В. И. Гавриленко, А. В. Иконников, А. А. Ластовкин, К. Е. Спирин, М. С. Жолудев, В. В. Румянцев, К. В. Маремьянин, А. В. Антонов, В. Я. Алёшкин, С. А. Дворецкий, Н. Н. Михайлов // VIII Всероссийский семинар по радиофизике миллиметровых и субмиллиметровых волн. Тезисы докладов. — Нижний Новгород, 2011. — С. 25—26.
- А34. *Исследование квантовых каскадных лазеров терагерцового диапазона и их применение для спектроскопии полупроводниковых наноструктур* / А. А. Ластовкин, А. В. Антонов, В. И. Гавриленко, М. С. Жолудев, А. В. Иконников, Ю. Г. Садофеев, N. Samal // VIII Всероссийский семинар по радиофизике миллиметровых и субмиллиметровых волн. Тезисы докладов. — Нижний Новгород, 2011. — С. 33—34.
- А35. *Узкозонные гетероструктуры с квантовыми ямами на основе соединений $HgTe/CdTe$* / А. В. Иконников, А. А. Ластовкин, К. Е. Спирин, М. С. Жолудев, К. В. Маремьянин, А. В. Антонов, В. Я. Алёшкин, В. И. Гавриленко, С. А. Дворецкий, Н. Н. Михайлов // Тез. докл. XV Международного Симпозиума «Нанофизика и наноэлектроника». Т. 1. — Нижний Новгород, 2011. — С. 149—150.
- А36. *Терагерцовая фотопроводимость в гетероструктурах $HgTe/CdHgTe(013)$ с квантовыми ямами* / К. Е. Спирин, М. С. Жолудев, А. В. Антонов, В. В. Румянцев, В. И. Гавриленко, Н. Н. Михайлов, С. А. Дворецкий // Тез. докл. XV Международного Симпозиума «Нанофизика и наноэлектроника». Т. 1. — Нижний Новгород, 2011. — С. 151—152.
- А37. *Исследование циклотронного резонанса полупроводниковых наноструктур с квантовыми ямами на основе $HgCdTe$* / А. А. Ластовкин, А. В. Иконников,

- К. Е. Спирин, М. С. Жолудев, В. И. Гавриленко, С. А. Дворецкий, Н. Н. Михайлов, Ю. Г. Садофьев, Н. Самал // Тез. докл. XV Международного Симпозиума «Нанофизика и наноэлектроника». Т. 2. — Нижний Новгород, 2011. — С. 502—503.
- А38. Исследования времен жизни носителей в графеноподобных гетероструктурах с квантовыми ямами $Hg_{1-y}Cd_yTe/Cd_xHg_{1-x}Te$ методом терагерцовой *ринг-probe*-спектроскопии / С. В. Морозов, М. С. Жолудев, А. В. Антонов, В. В. Румянцев, В. И. Гавриленко, В. Я. Алешкин, А. А. Дубинов, Н. Н. Михайлов, С. А. Дворецкий, О. Drachenko, S. Winnerl, H. Schneider, M. Helm // Тез. докл. XV Международного Симпозиума «Нанофизика и наноэлектроника». Т. 2. — Нижний Новгород, 2011. — С. 508—509.
- А39. Исследование квантовых каскадных лазеров терагерцового диапазона и их применение для спектроскопии полупроводниковых наноструктур / А. А. Ластовкин, А. В. Антонов, В. И. Гавриленко, М. С. Жолудев, А. В. Иконников, С. А. Дворецкий, Н. Н. Михайлов // Тез. докл. 4-ой Всероссийской конф. молодых ученых «Микро- и нанотехнологии и их применение». — Черноголовка, ноябр. 2010. — С. 24.
- А40. Циклотронный резонанс в узкозонной гетероструктуре $Hg_{0,84}Cd_{0,16}Te/Cd_{0,69}Hg_{0,31}Te$ с квантовой ямой с графеноподобным законом дисперсии / А. В. Иконников, А. А. Ластовкин, В. Я. Алёшкин, М. С. Жолудев, В. И. Гавриленко, С. А. Дворецкий, Н. Н. Михайлов // Тез. докл. Международного форума по нанотехнологиям «Rusnanotech'10». — Москва, ноябр. 2010.
- А41. Узкозонные гетероструктуры $Hg_{1-x}Cd_xTe/Cd_yHg_{1-y}Te$ для приемников терагерцового излучения / М. С. Жолудев, В. Я. Алёшкин // Тез. докл. 12-ой Всероссийской молодёжной конференции по физике полупроводников и наноструктур, полупроводниковой опто- и наноэлектронике. — С.Петербург, окт. 2010. — С. 70.