

# РАСЦЕПЛЕНИЕ ДИРАКОВСКИХ СОСТОЯНИЙ В КВАНТОВЫХ ЯМАХ HgTe. РОЛЬ КРИСТАЛЛОГРАФИЧЕСКОЙ ОРИЕНТАЦИИ, ИНТЕРФЕЙСНОЙ, ОБЪЕМНОЙ И СТРУКТУРНОЙ АСИММЕТРИИ

М. В. Дурнев, Г. В. Буджин, С. А. Тарасенко\*

Физико-технический институт им. А. Ф. Иоффе Российской Академии наук  
194021, Санкт-Петербург, Россия

Поступила в редакцию 6 июня 2022 г.,  
после переработки 6 июня 2022 г.  
Принята к публикации 26 июня 2022 г.

Развита микроскопическая теория тонкой структуры двумерных дираковских состояний в квантовых ямах HgTe/CdHgTe с кристаллографической ориентацией  $(0lh)$ , где  $l$  и  $h$  — индексы Миллера. Показано, что объемная, интерфейсная и структурная асимметрии приводят к антипересечению энергетических уровней даже при  $\mathbf{k} = 0$  ( $\mathbf{k}$  — двумерный волновой вектор в плоскости квантовой ямы) и снимают вырождение дираковских состояний. В квантовых ямах критической толщины двукратно вырожденный дираковский конус расщепляется на невырожденные вейлевские конусы. Характер расщепления и положение вейлевских точек в пространстве волновых векторов и энергий зависят от кристаллографической ориентации ямы. Представлен расчет параметров расщепления, обусловленного интерфейсной, объемной и структурной асимметрией ямы, и выведен эффективный гамильтониан, описывающий дираковские состояния. Получено аналитическое выражение для энергетического спектра и проанализирован спектр квантовых ям с ориентациями (001), (013) и (011).

*Статья для специального выпуска ЖЭТФ, посвященного 95-летию Э. И. Рашбы*

DOI: 10.31857/S0044451022100133  
EDN: JTVKBS

## 1. ВВЕДЕНИЕ

Гетероструктуры на основе соединения HgTe с инвертированной зонной структурой являются предметом активных исследований в современной физике твердого тела. В зависимости от дизайна гетероструктур, в частности от толщины слоя HgTe, в них могут быть реализованы различные фазовые состояния, в том числе фазы трехмерного и двумерного топологических изоляторов, двумерного бесщелевого полупроводника, двумерного полуметалла и др. [1, 2]. Отдельный интерес представляют квантовые ямы HgTe критической ширины — ширины, при которой происходит переход между тривиальным и топологически нетривиальным изоляторами [3, 4]. Такие структуры характеризуются бесце-

левым спектром, а носители заряда ведут себя как двумерные дираковские фермионы с линейной дисперсией.

Центросимметричные модели квантовых ям HgTe/CdHgTe предсказывают двукратное вырождение дираковского конуса и, соответственно, четырехкратное вырождение дираковской точки при  $\mathbf{k} = 0$  в ямах критической ширины [3]. Здесь  $\mathbf{k}$  — волновой вектор в плоскости квантовой ямы. Объемная инверсионная асимметрия (BIA), связанная с отсутствием центра инверсии в решетке цинковой обманки, интерфейсная инверсионная асимметрия (IIA), связанная с анизотропией химических связей на интерфейсах квантовой ямы, а также структурная инверсионная асимметрия (SIA) снимают вырождение дираковских состояний [4–13]. Вклад в расщепление вносят как широко известные линейные по  $\mathbf{k}$  слагаемые Рашбы [14–16] и Дрессельхауза [17–20], так и слагаемые в гамильтониане, которые снимают четырехкратное

\* E-mail: tarasenko@coherent.ioffe.ru

вырождение в точке  $\mathbf{k} = 0$  [4–8]. Исследования показывают, что щель при  $\mathbf{k} = 0$ , вызванная антипересечением уровней, достигает больших значений в квантовых ямах с кристаллографической ориентацией (001) и возникает в основном за счет смешивания состояний легких и тяжелых дырок на интерфейсах квантовой ямы [4, 12].

Многие эксперименты, однако, выполняются на структурах HgTe/CdHgTe, выращенных вдоль низкосимметричных кристаллографических направлений, таких как [013] и [012], см., например, работы [10–12, 21–23]. Выбор кристаллографического направления продиктован технологией: молекулярно-пучковая эпитаксия слоев HgTe и CdHgTe на низкосимметричных поверхностях GaAs (несогласованных по постоянной решетки) позволяет получить структуры высокого качества [24]. Технологические и экспериментальные достижения являются мотивацией для теоретических исследований низкосимметричных квантовых ям [23, 25, 26].

В данной работе построена микроскопическая теория тонкой структуры дираковских состояний в квантовых ямах HgTe/CdHgTe с учетом интерфейсной, объемной и структурной асимметрии. Показано, что энергетический спектр квантовых ям критической ширины в значительной степени зависит от кристаллографической ориентации ямы. Вычислены параметры, описывающие расщепление спектра. Исследованы квантовые ямы, выращенные на плоскостях (0lh), где  $l$  и  $h$  — индексы Миллера, и изучена эволюция тонкой структуры спектра при переходе от квантовых ям (001) к ямам (013) и (011).

## 2. ТОНКАЯ СТРУКТУРА ДИРАКОВСКИХ СОСТОЯНИЙ

Дираковские состояния в ямах HgTe/CdHgTe критической и близкой к критической толщины образуются из состояний  $|E1, \pm 1/2\rangle$  электронного типа и состояний  $|H1, \pm 3/2\rangle$  дырочного типа [27, 28]. Соответствующие базисные функции при  $\mathbf{k} = 0$  имеют вид

$$\begin{aligned} |E1, +1/2\rangle &= f_1(z)|\Gamma_6, +1/2\rangle + f_4(z)|\Gamma_8, +1/2\rangle, \\ |H1, +3/2\rangle &= f_3(z)|\Gamma_8, +3/2\rangle, \\ |E1, -1/2\rangle &= f_1(z)|\Gamma_6, -1/2\rangle + f_4(z)|\Gamma_8, -1/2\rangle, \\ |H1, -3/2\rangle &= f_3(z)|\Gamma_8, -3/2\rangle, \end{aligned} \quad (1)$$

где  $\mathbf{k} = (k_x, k_y)$  — волновой вектор в плоскости ямы,  $f_j(z)$  ( $j = 1, 3, 4$ ) — плавные огибающие,  $z$  — направление роста,  $|\Gamma_6, m\rangle$  ( $m = \pm 1/2$ ) и  $|\Gamma_8, m\rangle$

( $m = \pm 1/2, \pm 3/2$ ) — блоховские амплитуды зон  $\Gamma_6$  и  $\Gamma_8$  в центре зоны Бриллюэна. Мы будем рассматривать квантовые ямы (0lh) и использовать систему координат  $x \parallel [100]$ ,  $y \parallel [0h\bar{l}]$ ,  $z \parallel [0lh]$ , связанную с квантовой ямой.

Эффективный гамильтониан размерности  $4 \times 4$ , описывающий смешивание базисных состояний (1) и формирование дираковского спектра, можно получить в рамках  $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ -теории, см. разд. 3. Учитывая объемную, структурную и интерфейсную асимметрию в ямах (0lh), мы можем представить эффективный гамильтониан в виде

$$H = H_0 + H_{IIA/BIA} + H_{SIA}, \quad (2)$$

где

$$H_0 = \begin{pmatrix} \delta & iAk_+ & 0 & 0 \\ -iAk_- & -\delta & & 0 \\ 0 & 0 & \delta & -iAk_- \\ 0 & 0 & iAk_+ & -\delta \end{pmatrix} \quad (3)$$

— линейный по  $\mathbf{k}$  гамильтониан Берневица–Хьюза–Жанга (двумерный гамильтониан Дирака) [27],  $A$  — параметр, определяющий скорость дираковских фермионов,  $\delta$  — энергетический зазор между подзонами  $E1$  и  $H1$  в отсутствие смешивания.

Интерфейсная асимметрия, связанная с анизотропией химических связей на интерфейсах, и объемная асимметрия, вызванная отсутствием центра инверсии в кристалле, приводят к смешиванию базисных состояний. Такое смешивание в точке  $\mathbf{k} = 0$  описывается гамильтонианом

$$\begin{aligned} H_{IIA/BIA} &= \\ &= \begin{pmatrix} 0 & -\eta \sin 2\theta & 0 & i\gamma \cos 2\theta \\ -\eta \sin 2\theta & 0 & i\gamma \cos 2\theta & 0 \\ 0 & -i\gamma \cos 2\theta & 0 & \eta \sin 2\theta \\ -i\gamma \cos 2\theta & 0 & \eta \sin 2\theta & 0 \end{pmatrix}, \end{aligned} \quad (4)$$

где  $\eta$  и  $\gamma$  — параметры смешивания,  $\theta = \arctg(l/h)$  — угол между осью роста квантовой ямы  $[0lh]$  и осью  $[001]$ . Углы  $\theta = 0$ ,  $\arctg(1/3) \approx 0.321$ ,  $\pi/4$  соответствуют направлениям  $[001]$ ,  $[013]$ ,  $[011]$ .

Структурная асимметрия в ямах (0lh), выращенных из материалов с кубической решеткой, так-

же приводит к смешиванию базисных функций при  $\mathbf{k} = 0$ , которое описывается гамильтонианом

$$H_{SIA} = \begin{pmatrix} 0 & i\chi \sin 4\theta & 0 & \zeta \sin^2 2\theta \\ -i\chi \sin 4\theta & 0 & \zeta \sin^2 2\theta & 0 \\ 0 & \zeta \sin^2 2\theta & 0 & i\chi \sin 4\theta \\ \zeta \sin^2 2\theta & 0 & -i\chi \sin 4\theta & 0 \end{pmatrix}. \quad (5)$$

Параметры смешивания  $\chi$  и  $\zeta$  отличны от нуля только при одновременном учете структурной асимметрии и кубической формы элементарной ячейки кристалла. Отметим также, что  $H_{SIA}$  обращается в нуль в ямах с ориентацией (001).

Параметры  $\eta$ ,  $\gamma$ ,  $\chi$  и  $\zeta$  рассчитаны в разд. 3 в рамках 6-зонной  $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ -модели. Для квантовых ям HgTe/Cd<sub>0.7</sub>Hg<sub>0.3</sub>Te критической ширины ( $d_c \approx 6.7$  нм)  $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ -теория дает следующие оценки:  $\eta, \gamma \sim 5$  мэВ и  $\zeta, \chi \sim 0.1$  мэВ в электрическом поле  $E_z = 15$  кВ/см.

Гамильтонианы  $H_{IIA/BIA}$  (4) и  $H_{SIA}$  (5) зависят от направления роста квантовой ямы, которое задается углом  $\theta$ . Диагонализация гамильтониана (2) дает четыре дисперсионных ветви с энергиями

$$E_{1,4} = \mp \sqrt{\delta^2 + \gamma_\theta^2 + \eta_\theta^2 + \zeta_\theta^2 + \chi_\theta^2 + A^2 k^2 + 2AK}, \quad (6)$$

$$E_{2,3} = \mp \sqrt{\delta^2 + \gamma_\theta^2 + \eta_\theta^2 + \zeta_\theta^2 + \chi_\theta^2 + A^2 k^2 - 2AK},$$

где  $k^2 = k_x^2 + k_y^2$ ,

$$K = \sqrt{(\gamma_\theta^2 + \zeta_\theta^2)k^2 + (\chi_\theta k_x + \eta_\theta k_y)^2} \quad (7)$$

и

$$\begin{aligned} \gamma_\theta &= \gamma \cos 2\theta, & \eta_\theta &= \eta \sin 2\theta, \\ \zeta_\theta &= \zeta \sin^2 2\theta, & \chi_\theta &= \chi \sin 4\theta. \end{aligned} \quad (8)$$

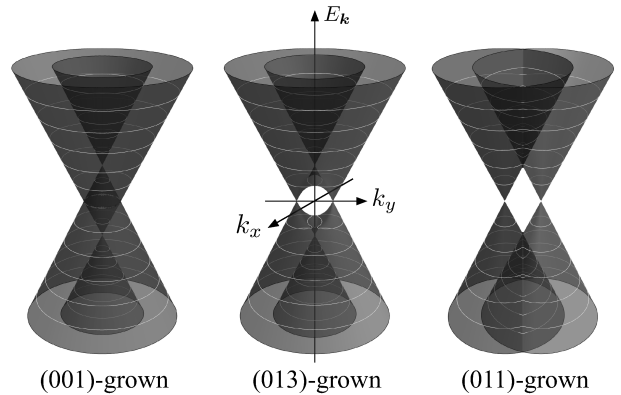
В следующих разделах проанализирована тонкая структура дираковских состояний в квантовых ямах с различными кристаллографическими ориентациями для различных механизмов смешивания.

### 2.1. Интерфейсная и объемная асимметрия

Дираковские состояния в квантовых ямах HgTe/CdHgTe с симметричным гетеропотенциалом описываются гамильтонианом  $H = H_0 + H_{IIA/BIA}$ , где  $H_0$  и  $H_{IIA/BIA}$  даются формулами (3) и (4). Энергетический спектр, определяемый выражением (6), принимает вид

$$\begin{aligned} E_{1,4} &= \mp \sqrt{\delta^2 + \gamma_\theta^2 + \eta_\theta^2 + A^2 k^2 + 2A \sqrt{\gamma_\theta^2 k^2 + \eta_\theta^2 k_y^2}}, \\ E_{2,3} &= \mp \sqrt{\delta^2 + \gamma_\theta^2 + \eta_\theta^2 + A^2 k^2 - 2A \sqrt{\gamma_\theta^2 k^2 + \eta_\theta^2 k_y^2}}. \end{aligned} \quad (9)$$

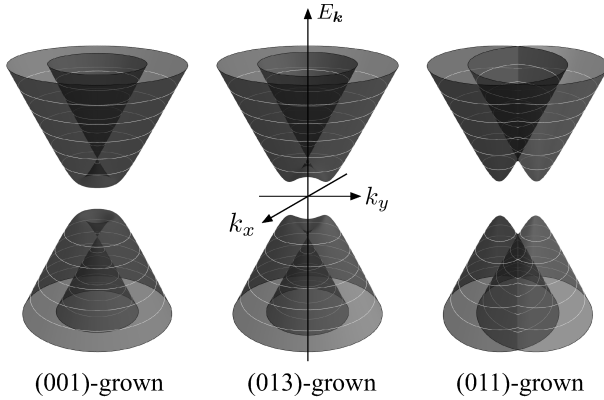
На рис. 1 приведены энергетические спектры дираковских состояний в квантовых ямах (001), (013) и (011) критической ширины ( $\delta = 0$ ) с учетом вклада ПА/ВИА. Ориентация (001) соответствует  $\theta = 0$ . В этом случае спектр имеет вид двух невырожденных (вейлевских) конусов, сдвинутых друг относительно друга по энергии [4]. Вейлевские точки расположены при  $\mathbf{k} = 0$  и энергиях  $E = \pm\gamma$ . Ориентация (011) соответствует  $\theta = \pi/4$ . В таких ямах вклад ПА/ВИА расщепляет дираковский конус на два вейлевских конуса, сдвинутых друг относительно друга вдоль оси  $k_y$ . Вейлевские точки расположены в точках  $\mathbf{k} = (0, \pm\eta/A)$ . Спектр квантовой ямы (013) и ям произвольной ориентации ( $0lh$ ) представляет собой промежуточный случай между спектрами структур (001) и (011). В этом случае спектр содержит четыре вейлевские точки. Две из них с нулевой энергией находятся в точках  $\mathbf{k} = (0, \pm\sqrt{\gamma_\theta^2 + \eta_\theta^2}/A)$ , а две других с энергиями  $E = \pm\sqrt{\gamma_\theta^2 + \eta_\theta^2}$  расположены в точке  $\mathbf{k} = 0$ .



**Рис. 1.** (В цвете онлайн) Энергетические спектры дираковских состояний в квантовых ямах HgTe/CdHgTe кристаллографических ориентаций (001), (013) и (011) критической ширины при наличии интерфейсной и объемной асимметрии. Спектры построены по формулам (9) для  $\delta = 0$  и  $\gamma = \eta$ . Цветом изображена проекция псевдоспина на нормаль квантовой ямы (см. подробности в тексте): синий и красный цвета соответствуют  $\sigma_z = -1$  и  $\sigma_z = +1$ , а фиолетовый цвет —  $\sigma_z = 0$

Цветом на рис. 1 изображена проекция псевдоспина  $\sigma_z$  на нормаль квантовой ямы. Здесь  $\sigma_z = |c_1|^2 + |c_2|^2 - |c_3|^2 - |c_4|^2$ , где  $c_j$  — коэффициенты разложения волновой функции  $\psi$  по базисным функциям (1). Цвет иллюстрирует относительный вклад блоков со спином «вверх» ( $|E1, +1/2\rangle$  и  $|H1, +3/2\rangle$ ) и блоков со спином «вниз» ( $|E1, -1/2\rangle$  и  $|H1, -3/2\rangle$ ) в заданное состояние  $\psi$ . В ямах (001) вейлевские конусы сформированы поровну функци-

ями со спином «вверх» и «вниз» и, следовательно,  $\sigma_z = 0$  (фиолетовый цвет) для всех собственных состояний. Напротив, сдвинутые друг относительно друга конусы в ямах (011) описываются чистыми волновыми функциями со спином «вверх» и «вниз», и им соответствуют  $\sigma_z = +1$  (красный цвет) и  $\sigma_z = -1$  (синий цвет).



**Рис. 2.** (В цвете онлайн) Энергетические спектры дираковских состояний в квантовых ямах HgTe/CdHgTe кристаллографических ориентаций (001), (013) и (011) с близкой к критической ширины при наличии интерфейсной и объемной асимметрии. Спектры построены по формулам (9) для  $\gamma = \eta = 2\delta$ . Цветом изображена проекция псевдоспина на нормаль квантовой ямы: синий и красный цвета отвечают соответственно  $\sigma_z = -1$  и  $\sigma_z = +1$ , а фиолетовый цвет —  $\sigma_z = 0$

Энергетические спектры квантовых ям (001), (013) и (011) с шириной, близкой к критической (и щелью  $2|\delta|$ ), показаны на рис. 2. В ямах (001) спектр имеет вид

$$E = \pm \sqrt{\delta^2 + (A|\mathbf{k}| \pm \gamma)^2}$$

и экстремумы зон расположены на окружности  $|\mathbf{k}| = |\gamma/A|$ . В ямах (011) энергетическая дисперсия дается выражением

$$E = \pm \sqrt{\delta^2 + A^2 k_x^2 + (A k_y \pm \eta)^2}$$

и состоит из двух подзон с проекциями псевдоспина  $\sigma_z = \pm 1$ . В случае произвольной ориентации вида (01h), например (013), экстремумы зон находятся в точках  $\mathbf{k} = (0, \pm \sqrt{\gamma_\theta^2 + \eta_\theta^2}/A)$ . Изоэнергетические контуры совпадают с сечениями тора, в частности при  $|E| > \sqrt{\delta^2 + \gamma_\theta^2 + \eta_\theta^2}$  они имеют вид овалов, вытянутых вдоль оси  $k_y$ .

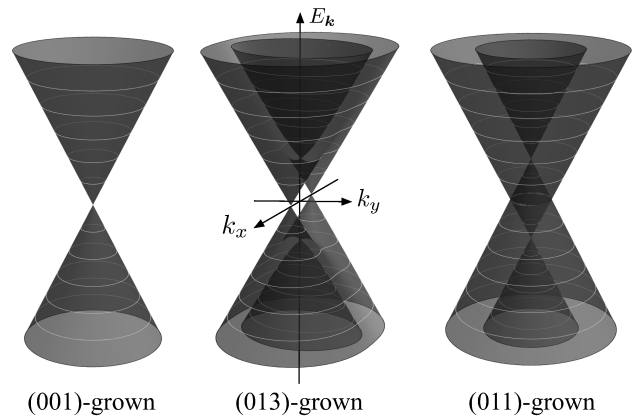
### 2.2. Структурная асимметрия

Изучим теперь влияние структурной асимметрии на энергетический спектр дираковских состояний. Для этого рассмотрим гамильтониан  $H = H_0 + H_{SIA}$ , где  $H_0$  и  $H_{SIA}$  приведены в (3) и (5). Из уравнения (6) следует, что

$$E_{1,4} = \mp \sqrt{\delta^2 + \zeta_\theta^2 + \chi_\theta^2 + A^2 k^2 + 2A \sqrt{\zeta_\theta^2 k^2 + \chi_\theta^2 k_x^2}},$$

$$E_{2,3} = \mp \sqrt{\delta^2 + \zeta_\theta^2 + \chi_\theta^2 + A^2 k^2 - 2A \sqrt{\zeta_\theta^2 k^2 + \chi_\theta^2 k_x^2}}. \quad (10)$$

На рис. 3 показаны энергетические дисперсии, построенные по формулам (10), для квантовых ям (001), (013) и (011) критической ширины ( $\delta = 0$ ). В ямах (001) структурная асимметрия не приводит к смешиванию базисных состояний при  $\mathbf{k} = 0$ . В результате точка  $\mathbf{k} = 0$  остается четырехкратно вырожденной, так же как и в модели Берневига–Хьюза–Жанга. В ямах других ориентаций структурная асимметрия снимает четырехкратное вырождение при  $\mathbf{k} = 0$  и расщепляет дираковский конус. В общем случае энергетический спектр содержит четыре вейлевские точки: две с нулевой энергией при  $\mathbf{k} = (\pm \sqrt{\zeta_\theta^2 + \chi_\theta^2}/A, 0)$  и две с энергиями  $E = \pm \sqrt{\zeta_\theta^2 + \chi_\theta^2}$  при  $\mathbf{k} = 0$ . Примечательно, что энергетическая дисперсия в ямах (011) со структурной асимметрией имеет такой же вид, как и в ямах (001) с интерфейсной и объемной асимметрией. В квантовых ямах с энергетической ще-



**Рис. 3.** (В цвете онлайн) Энергетические спектры дираковских состояний в квантовых ямах HgTe/CdHgTe кристаллографических ориентаций (001), (013) и (011) критической ширины при наличии структурной асимметрии. Спектры построены по формулам (10) для  $\delta = 0$  и  $\zeta = \chi$ . Цветом изображена проекция псевдоспина на нормаль квантовой ямы: синий и красный цвета соответствуют  $\sigma_z = -1$  и  $\sigma_z = +1$ , а фиолетовый цвет —  $\sigma_z = 0$

лью (не показаны) экстремумы зон расположены при  $\mathbf{k} = (\pm\sqrt{\zeta_\theta^2 + \chi_\theta^2}/A, 0)$ , в частности, при  $\mathbf{k} = 0$  в ямах (001) и на окружности  $|\mathbf{k}| = |\zeta/A|$  в ямах (011).

### 2.3. Конкуренция между ПА/ВИА и SIA

В реальных структурах с квантовыми ямами присутствуют все типы асимметрии, включая объемную, интерфейсную и структурную. Дисперсии подзон в этом случае описываются общим уравнением (6). На рис. 4 представлены энергетические спектры дираковских состояний в асимметричных ямах, выращенных вдоль разных кристаллографических направлений.

В квантовых ямах (001) расщепление дираковского конуса в точке  $\mathbf{k} = 0$  определяется слагаемым ВИА/ПА и энергетический спектр совпадает с показанным на рис. 1. Спектр асимметричной ямы (011) качественно имеет такой же вид, что и спектр симметричной ямы (013). В нем есть четыре вейлевские точки: две с нулевой энергией и волновыми векторами  $\mathbf{k} = (0, \pm\sqrt{\zeta_\theta^2 + \eta_\theta^2}/A)$  и две с энергиями  $E = \pm\sqrt{\zeta_\theta^2 + \eta_\theta^2}$  и  $\mathbf{k} = 0$ .

Спектр квантовой ямы с произвольной ориентацией (0*lh*) и асимметричным гетеропотенциалом показан в центре на рис. 4. Две из вейлевских точек

расположены при

$$\mathbf{k} = \pm \sqrt{\frac{\gamma_\theta^2 + \eta_\theta^2 + \zeta_\theta^2 + \chi_\theta^2}{A^2(\eta_\theta^2 + \chi_\theta^2)}} (\chi_\theta, \eta_\theta). \quad (11)$$

Примечательно, что положение этих точек в  $\mathbf{k}$ -пространстве не привязанно к определенному направлению. Угол между линией, соединяющей вейлевские точки, и осью  $k_x$ , равный  $\text{arctg}(\eta_\theta/\chi_\theta)$ , зависит от параметра структурной асимметрии и, следовательно, его величиной можно управлять с помощью внешнего электрического поля, направленного по нормали к квантовой яме, например напряжением на затворе.

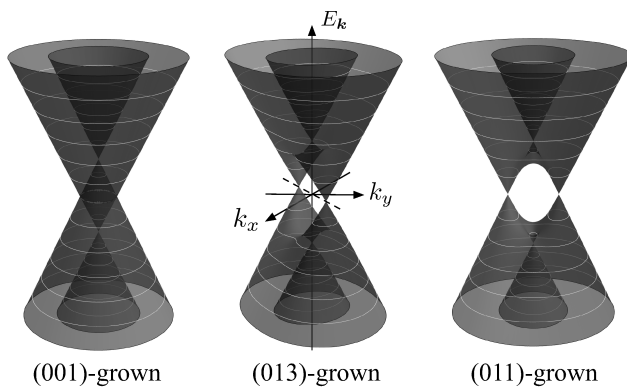
### 3. 6-ЗОННАЯ $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ -ТЕОРИЯ

В данном разделе представлен расчет энергетического спектра и параметров эффективного гамильтониана (2) в рамках расширенной 6-зонной  $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ -теории. Выбор 6-зонной модели связан с тем, что состояния зоны проводимости и валентной зоны в структурах HgTe/CdHgTe формируются главным образом из состояний зон  $\Gamma_6$  и  $\Gamma_8$  объемного кристалла, двукратно и четырехкратно вырожденных при  $\mathbf{k} = 0$  [27–29]. С учетом  $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ -смешивания, деформационного взаимодействия и смешивания состояний на интерфейсах 6-зонный гамильтониан принимает вид

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_{kp} + \mathcal{H}_{def} + \mathcal{H}_{int} = \begin{pmatrix} \mathcal{H}_{66} & \mathcal{H}_{68} \\ \mathcal{H}_{68}^\dagger & \mathcal{H}_{88} \end{pmatrix}, \quad (12)$$

где  $\mathcal{H}_{66}$  — матрица  $2 \times 2$  в базе состояний  $|\Gamma_6, +1/2\rangle, |\Gamma_6, -1/2\rangle$ ,  $\mathcal{H}_{88}$  — матрица  $4 \times 4$  в базе состояний  $|\Gamma_8, +3/2\rangle, |\Gamma_8, +1/2\rangle, |\Gamma_8, -1/2\rangle, |\Gamma_8, -3/2\rangle$ ,  $\mathcal{H}_{68}$  — матрица  $2 \times 4$ , описывающая смешивание блоков  $\Gamma_6$  и  $\Gamma_8$ ,  $\mathcal{H}_{68}^\dagger$  — матрица, эрмитово-сопряженная с  $\mathcal{H}_{68}$ .

Изотропная версия гамильтониана  $\mathcal{H}_{kp}$  — это стандартный 6-зонный гамильтониан Кейна, который широко используется для моделирования зонной структуры полупроводников группы III–V с узкой запрещенной зоной. Изотропная модель является упрощенной и не учитывает реальную симметрию кристаллической решетки цинковой обманки (точечная группа  $T_d$ ), учет которой обязателен для описания тонкой структуры дираковских состояний. Это приводит к необходимости выхода за рамки изотропной модели Кейна и использования так называемой обобщенной модели Кейна [30], отражающей кубическую структуру и нецентросимметричность кристаллической решетки.



**Рис. 4.** (В цвете онлайн) Энергетические спектры дираковских состояний в квантовых ямах HgTe/CdHgTe кристаллографических ориентаций (001), (013) и (011) критической ширины при наличии интерфейсной, объемной и структурной асимметрии. Спектры построены по формулам (6) для  $\delta = 0$  и  $\gamma = \eta = \zeta = \chi$ . Цветом изображена проекция псевдоспина на нормаль квантовой ямы (см. подробности в тексте): синий и красный цвета соответствуют  $\sigma_z = -1$  и  $\sigma_z = +1$ , фиолетовый —  $\sigma_z = 0$

**Таблица.** Параметры 6-зонного гамильтониана  $\mathcal{H}_{kp}$ , вычисленные в рамках 14-зонной  $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ -теории, которая включает валентные зоны  $\Gamma_7$  и  $\Gamma_8$ , зону проводимости  $\Gamma_6$  и далекие зоны проводимости  $\Gamma'_7$  и  $\Gamma'_8$  [19, 32, 33]. Обозначения:  $E_g$  и  $E'_g$  — расстояния между зонами  $\Gamma_6$  и  $\Gamma_8$  и между зонами  $\Gamma'_7$  и  $\Gamma_6$  при  $\mathbf{k} = 0$ ;  $\Delta$  и  $\Delta'$  — спин-орбитальные расщепления валентной зоны и далекой зоны проводимости;  $P, P'$  и  $Q$  — матричные элементы  $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ -смешивания зон  $\Gamma_{7,8} - \Gamma_6, \Gamma'_{7,8} - \Gamma_6$  и  $\Gamma_{7,8} - \Gamma'_{7,8}$ . Предполагается, что  $P' \ll P, \Delta' \ll E'_g$ , и пренебрегается не зависящим от  $\mathbf{k}$  спин-орбитальным смешиванием зон  $\Gamma_{7,8}$  и  $\Gamma'_{7,8}$

| $m_0/m'_e$               | $\gamma'_1$            | $\gamma'_2$             | $\gamma'_3$            | $\varkappa_0$ | $B_+$              | $B_-$                                    |
|--------------------------|------------------------|-------------------------|------------------------|---------------|--------------------|--|
| $2m_0P^2$                | $4m_0Q^2$              | $m_0Q^2$                | $m_0Q^2$               | 0             | $QP'(E_g + 2E'_g)$ | $QP'\Delta'(E_g^2 + 2E_gE'_g + 2E_g'^2)$ |
| $3\hbar^2(E_g + \Delta)$ | $3\hbar^2(E_g + E'_g)$ | $-3\hbar^2(E_g + E'_g)$ | $3\hbar^2(E_g + E'_g)$ |               | $E'_g(E_g + E'_g)$ | $2E_g'^2(E_g + E'_g)^2$                  |

Обобщенный гамильтониан Кейна  $\mathcal{H}_{kp}$  строится методами теории представлений групп [31]. В кубических осях  $x' \parallel [100], y' \parallel [010], z' \parallel [001]$  блоки  $\mathcal{H}_{66}^{kp}$  и  $\mathcal{H}_{88}^{kp}$  с точностью до слагаемых второго порядка по волновому вектору  $\mathbf{k}$  имеют вид

$$\mathcal{H}_{66}^{kp} = U_6 + \frac{\hbar^2 k^2}{2m'_e}, \tag{13}$$

$$\mathcal{H}_{88}^{kp} = U_8 + \frac{\hbar^2}{2m_0} \left[ -\left(\gamma'_1 + \frac{5}{2}\gamma'_2\right)k^2 + 2\gamma'_2(\mathbf{J} \cdot \mathbf{k})^2 + 2(\gamma'_3 - \gamma'_2) \sum_{i \neq j} \{J_i J_j\}_s k_i k_j \right] + \frac{4\varkappa_0}{\sqrt{3}} \mathbf{V} \cdot \mathbf{k}, \tag{14}$$

где  $U_6$  и  $U_8$  — энергии зон  $\Gamma_6$  и  $\Gamma_8$  при  $\mathbf{k} = 0, \mathbf{k} = (k_{x'}, k_{y'}, k_{z'})$  — волновой вектор,  $\gamma'_1, \gamma'_2, \gamma'_3$  и  $m'_e$  — вклады в параметры Латтинжера и эффективную массу от далеких зон и дисперсии свободного электрона,  $\mathbf{J} = (J_{x'}, J_{y'}, J_{z'})$  — вектор, составленный

из матриц углового момента  $3/2, \mathbf{V} = (V_{x'}, V_{y'}, V_{z'})$ , матрица  $V_{x'}$  имеет вид  $V_{x'} = \{J_{x'}, J_{y'}^2 - J_{z'}^2\}$ , а матрицы  $V_{y'}$  и  $V_{z'}$  получаются циклической перестановкой индексов,  $\{A, B\}_s = (AB + BA)/2$  — симметризованное произведение операторов  $A$  и  $B, \varkappa_0$  — зонный параметр.

Чтобы построить матрицу  $\mathcal{H}_{68}$ , заметим, что прямое произведение представлений  $\Gamma_6 \times \Gamma_8^*$  раскладывается на неприводимые представления  $\Gamma_3 + \Gamma_4 + \Gamma_5$ . Тройки величин  $\{k_{x'}, k_{y'}, k_{z'}\}$  и  $\{k_{y'}, k_{z'}, k_{x'}, k_{z'}, k_{x'}, k_{y'}\}$  преобразуются по векторному представлению  $\Gamma_5$ , а пара  $\{2k_{z'}^2 - k_{x'}^2 - k_{y'}^2, \sqrt{3}(k_{x'}^2 - k_{y'}^2)\}$  — по представлению  $\Gamma_3$ . Величины, которые преобразуются по представлению  $\Gamma_4$ , являются кубическими по  $\mathbf{k}$  и не учитываются. Таким образом блок  $\mathcal{H}_{68}^{kp}$  имеет вид [30]

$$\mathcal{H}_{68}^{kp\dagger} = \begin{pmatrix} \frac{i}{\sqrt{2}}(B_+ k_+ k_{z'} - P k_-) & \frac{i}{3\sqrt{2}} B_- (2k_{z'}^2 - k_{\parallel}^2) \\ \sqrt{\frac{2}{3}}(i P k_{z'} + B_+ k_{x'} k_{y'}) & \frac{i}{\sqrt{6}}(B_+ k_+ k_{z'} - P k_-) - \frac{i}{\sqrt{6}} B_- (k_{y'}^2 - k_{x'}^2) \\ \frac{i}{\sqrt{6}}(P k_+ + B_+ k_- k_{z'}) & \sqrt{\frac{2}{3}}(i P k_{z'} + B_+ k_{x'} k_{y'}) + \frac{i}{\sqrt{6}} B_- (k_{y'}^2 - k_{x'}^2) \\ \frac{i}{3\sqrt{2}} B_- (k_{\parallel}^2 - 2k_{z'}^2) & \frac{i}{\sqrt{2}}(P k_+ + B_+ k_- k_{z'}) \end{pmatrix}, \tag{15}$$

где  $P = i(\hbar/m_0)p_{cv}$  — кейновский матричный элемент,  $B_{\pm}$  — зонные параметры,  $k_{\pm} = k_{x'} \pm i k_{y'}, k_{\parallel}^2 = k_{x'}^2 + k_{y'}^2$ . Заметим, что определение величин  $P$  и  $B_{\pm}$  в выражении (15) отличается множителем  $i$  от обозначений в книге [30].

Обобщенный гамильтониан Кейна, записанный в виде блоков (13)–(15), отражает реальную симметрию кристалла с решеткой цинковой обманки. Изотропное центросимметричное приближение соответствует пределу  $\gamma'_2 = \gamma'_3, \varkappa_0 = 0, B_{\pm} = 0$ . Отличная от нуля разность  $\gamma'_2 - \gamma'_3$  связана с кубической анизотропией элементарной ячейки, а отличные от нуля параметры  $\varkappa_0$  и  $B_{\pm}$  — с отсутствием центра пространственной инверсии. Параметр  $B_-$  описывает смешивание состояний с противоположными проекциями спина и поэтому мал по сравнению с параметром  $B_+$ . В дальнейших расчетах параметром  $B_-$  пренебрегается.

Параметры эффективного 6-зонного гамильтониана  $\mathcal{H}_{kp}$  могут быть выражены через межзонные матричные элементы и положения зон в многозонной  $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ -теории. Результаты таких расчетов в рамках 14-зонной

$\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ -теории [19, 32, 33], которая дополнительно к рассмотренным зонам  $\Gamma_6$  и  $\Gamma_8$  включает в себя валентную зону  $\Gamma_7$  и далекие зоны проводимости  $\Gamma'_8$  и  $\Gamma'_7$ , представлены в таблице.

Эпитаксильные слои, составляющие гетероструктуру HgTe/CdHgTe, обычно напряжены из-за значительного рассогласования (около 0.3%) постоянных решеток HgTe и CdTe. Гамильтониан деформационного взаимодействия  $\mathcal{H}_{def}$  строится по аналогии с  $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ -гамильтонианом [19, 31]. В результате такой процедуры получим диагональные блоки

$$\mathcal{H}_{66}^{def} = \Xi_c \text{Tr } \epsilon, \tag{16}$$

$$\mathcal{H}_{88}^{def} = \left(a + \frac{5}{4}b\right) \text{Tr } \epsilon - b \sum_{i,j} \{J_i J_j\}_s \epsilon_{ij} + \left(b - \frac{d}{\sqrt{3}}\right) \sum_{i \neq j} \{J_i J_j\}_s \epsilon_{ij}, \tag{17}$$

где  $\Xi_c$  — деформационный потенциал зоны  $\Gamma_6$ ,  $a$ ,  $b$  и  $d$  — деформационные потенциалы зоны  $\Gamma_8$ ,  $\mathcal{H}_{88}^{def}$  — гамильтониан Бира–Пикуса,  $\epsilon$  — тензор деформации, а недиагональные блоки

$$\mathcal{H}_{68}^{def} = \begin{pmatrix} -\Xi_{cv} \frac{\epsilon_{y'z'} - i\epsilon_{x'z'}}{\sqrt{2}} & i\Xi'_{cv} \frac{2\epsilon_{z'z'} - \epsilon_{x'x'} - \epsilon_{y'y'}}{3\sqrt{2}} \\ \sqrt{\frac{2}{3}} \Xi_{cv} \epsilon_{x'y'} + i\Xi'_{cv} \frac{\epsilon_{x'x'} - \epsilon_{y'y'}}{\sqrt{6}} & -\Xi_{cv} \frac{\epsilon_{y'z'} - i\epsilon_{x'z'}}{\sqrt{6}} \\ \Xi_{cv} \frac{\epsilon_{y'z'} + i\epsilon_{x'z'}}{\sqrt{6}} & \sqrt{\frac{2}{3}} \Xi_{cv} \epsilon_{x'y'} - i\Xi'_{cv} \frac{\epsilon_{x'x'} - \epsilon_{y'y'}}{\sqrt{6}} \\ i\Xi'_{cv} \frac{\epsilon_{x'x'} + \epsilon_{y'y'} - 2\epsilon_{z'z'}}{3\sqrt{2}} & \Xi_{cv} \frac{\epsilon_{y'z'} + i\epsilon_{x'z'}}{\sqrt{2}} \end{pmatrix}, \tag{18}$$

где  $\Xi_{cv}$  и  $\Xi'_{cv}$  — межзонные деформационные потенциалы. Заметим, что  $\Xi_{cv}$  и  $\Xi'_{cv}$  обращаются в нуль в центросимметричных кристаллах. Величины  $\Xi_{cv}$  и  $\Xi'_{cv}$  для HgTe и CdTe неизвестны. Можно ожидать, что потенциал  $\Xi'_{cv}$  мал по сравнению с  $\Xi_{cv}$ , поэтому в дальнейших расчетах им пренебрегается.

Интерфейсы в гетероструктурах являются дополнительным источником смешивания блоховских состояний. В структурах с решеткой цинковой обманки интерфейсная асимметрия, обусловленная анизотропией химических связей, приводит к смешиванию состояний легких и тяжелых дырок [34, 35]. Такое смешивание состояний на интерфейсе с произвольной кристаллографической ориентацией может быть описано гамильтонианом

$$\mathcal{H}_{88}^{int} = \frac{\hbar^2 t_{l-h}}{\sqrt{3} a_0 m_0} \delta(\mathbf{r} \cdot \mathbf{n} + r_{int}) \sum_i \{J_i J_{i+1}\}_s n_{i+2}, \tag{19}$$

где  $t_{l-h}$  — безразмерный параметр смешивания,  $a_0$  — постоянная решетки,  $\mathbf{n} = (n_{x'}, n_{y'}, n_{z'})$  — единичный вектор, направленный по нормали к интерфейсу, например из слоя CdHgTe в слой HgTe,  $\mathbf{r} \cdot \mathbf{n} + r_{int} = 0$  — уравнение плоскости интерфейса,  $r_{int}$  — расстояние между интерфейсом и началом координат.

Для расчета электронных и дырочных состояний в квантовых ямах с ориентацией (01h) необходимо переписать гамильтониан (12) в системе координат квантовой ямы. Переход от системы координат  $(x', y', z')$  к системе  $(x, y, z)$  соответствует в нашем случае повороту вокруг оси  $x$  на угол  $\theta$ . При таком повороте базисные функции  $|\Gamma_6, m\rangle$  и  $|\Gamma_8, m\rangle$  преобразуются, как функции углового момента 1/2 и 3/2. Соответственно, 6-зонный гамильтониан (12) в системе координат квантовой ямы  $(x, y, z)$  принимает вид

$$\mathcal{H}_{xyz} = R^{-1} \mathcal{H} R, \tag{20}$$

где

$$R = \begin{pmatrix} R_6 & 0 \\ 0 & R_8 \end{pmatrix}, \tag{21}$$

$R_6 = \exp(is_x \theta)$  и  $R_8 = \exp(iJ_x \theta)$  — матрицы вращения размерностей  $2 \times 2$  и  $4 \times 4$ ,  $s_x = \sigma_x/2$ . Компоненты волнового вектора преобразуются как

$$\begin{aligned} k_{x'} &= k_x, \\ k_{y'} &= k_y \cos \theta + k_z \sin \theta, \\ k_{z'} &= k_z \cos \theta - k_y \sin \theta, \end{aligned} \tag{22}$$

а тензора деформации — как

$$\begin{aligned}
\epsilon_{x'x'} &= \epsilon_{xx}, \\
\epsilon_{x'y'} &= \epsilon_{xy} \cos \theta + \epsilon_{xz} \sin \theta, \\
\epsilon_{x'z'} &= \epsilon_{xz} \cos \theta - \epsilon_{xy} \sin \theta, \\
\epsilon_{y'y'} &= \epsilon_{yy} \cos^2 \theta + \epsilon_{zz} \sin^2 \theta + \epsilon_{yz} \sin 2\theta, \\
\epsilon_{y'z'} &= \epsilon_{yz} \cos 2\theta + (1/2)(\epsilon_{zz} - \epsilon_{yy}) \sin 2\theta, \\
\epsilon_{z'z'} &= \epsilon_{zz} \cos^2 \theta + \epsilon_{yy} \sin^2 \theta - \epsilon_{yz} \sin 2\theta.
\end{aligned} \tag{23}$$

В дальнейшем предполагаем, что деформация квантовой ямы обусловлена рассогласованием постоянной решетки  $a$  буферного слоя и постоянной решетки  $a_0$  исходно ненапряженного материала квантовой ямы. В этом случае деформация ямы в плоскости интерфейсов определяется условием согласования решеток:  $\epsilon_{xx} = \epsilon_{yy} = a/a_0 - 1$ . Оставшиеся компоненты тензора деформации находятся из условий минимума упругой энергии, что приводит к следующим выражениям [21]:

$$\begin{aligned}
\epsilon_{zz} &= \frac{c_{11}^2 + 2c_{11}(c_{12} - c_{44}) + c_{12}(-3c_{12} + 10c_{44}) - (c_{11} + 3c_{12})(c_{11} - c_{12} - 2c_{44}) \cos 4\theta}{-c_{11}^2 - 6c_{11}c_{44} + c_{12}(c_{12} + 2c_{44}) + (c_{11} + c_{12})(c_{11} - c_{12} - 2c_{44}) \cos 4\theta} \epsilon_{xx}, \\
\epsilon_{yz} &= \frac{(c_{11} + 2c_{12})(c_{11} - c_{12} - 2c_{44}) \sin 4\theta}{-c_{11}^2 - 6c_{11}c_{44} + c_{12}(c_{12} + 2c_{44}) + (c_{11} + c_{12})(c_{11} - c_{12} - 2c_{44}) \cos 4\theta} \epsilon_{xx}, \\
\epsilon_{xz} &= 0, \quad \epsilon_{xy} = 0,
\end{aligned} \tag{24}$$

где  $c_{11}$ ,  $c_{12}$  и  $c_{44}$  — упругие постоянные. Заметим, что  $c_{11} - c_{12} - 2c_{44} = 0$  в модели изотропной упругой среды, поэтому недиагональная компонента  $\epsilon_{yz}$  возникает за счет кубичности кристалла.

На рис. 5 показаны результаты численного расчета энергетического спектра квантовой ямы HgTe/Cd<sub>0.7</sub>Hg<sub>0.3</sub>Te критической толщины, выращенной на подложке (013). Хорошо видны расщепление дираковских состояний при  $\mathbf{k} = 0$  и анизотропия спектра.

Для определения параметров эффективного гамильтониана (2) действуем следующим образом. Вначале решаем уравнение Шредингера

$$\mathcal{H}_{xyz}^{(iso)} \Psi = E \Psi$$

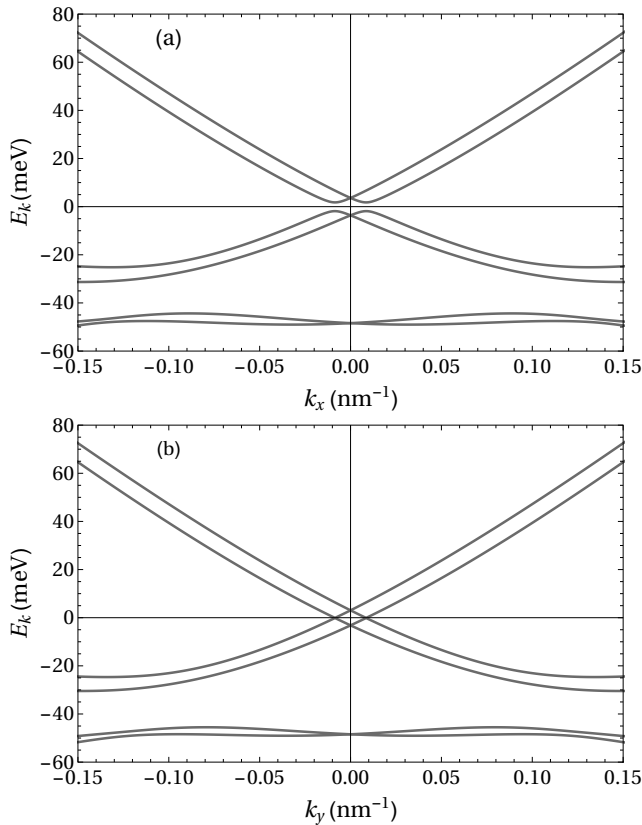
при  $k_x = k_y = 0$ , где  $\mathcal{H}_{xyz}^{(iso)}$  — изотропная часть гамильтониана (20), и находим функции  $|E1, \pm 1/2\rangle$  и  $|H1, \pm 3/2\rangle$ . Затем проецируем гамильтониан  $\mathcal{H}_{xyz} - \mathcal{H}_{xyz}^{(iso)}$  на базисные состояния  $|E1, \pm 1/2\rangle$  и  $|H1, \pm 3/2\rangle$ . В результате такой процедуры получим эффективный гамильтониан (2) с параметрами

$$A = \frac{P}{\sqrt{2}} \int f_1(z) f_3(z) dz,$$

$$\begin{aligned}
\eta &= \frac{\hbar^2 t_{l-h}}{2m_0 a_0} \left[ f_3\left(\frac{w}{2}\right) f_4\left(\frac{w}{2}\right) - f_3\left(-\frac{w}{2}\right) f_4\left(-\frac{w}{2}\right) \right] + \\
&\quad + \frac{1}{\sqrt{2}} \int dz f_1(z) \Xi_{cv} \left[ \epsilon_{yz} \operatorname{ctg} 2\theta + \frac{\epsilon_{zz} - \epsilon_{yy}}{2} \right] f_3(z) - \\
&\quad - \frac{1}{2\sqrt{2}} \int dz f_1(z) \partial_z B_+ \partial_z f_3(z), \\
\gamma &= \frac{\hbar^2 t_{l-h}}{2m_0 a_0} \left[ f_3\left(\frac{w}{2}\right) f_4\left(\frac{w}{2}\right) - f_3\left(-\frac{w}{2}\right) f_4\left(-\frac{w}{2}\right) \right], \\
\chi &= \frac{\sqrt{3} \hbar^2}{4m_0} \int dz f_4(z) \partial_z (\gamma'_2 - \gamma'_3) \partial_z f_3(z) - \\
&\quad - \frac{1}{2} \int dz f_3(z) \times \\
&\quad \times \left\{ \frac{[(d + \sqrt{3}b) + (d - \sqrt{3}b) \cos 4\theta] \epsilon_{yz} +}{\sin 4\theta} + \right. \\
&\quad \left. + (d - \sqrt{3}b) \frac{\epsilon_{zz} - \epsilon_{yy}}{2} \right\} f_4(z), \\
\zeta &= \frac{\sqrt{3} \hbar^2}{4m_0} \int dz f_4(z) \partial_z (\gamma'_2 - \gamma'_3) \partial_z f_3(z) + \\
&\quad + \frac{1}{2} \int dz f_3(z) (\sqrt{3}b - d) \times \\
&\quad \times \left[ \epsilon_{yz} \operatorname{ctg} 2\theta + \frac{\epsilon_{zz} - \epsilon_{yy}}{2} \right] f_4(z),
\end{aligned} \tag{25}$$

где  $w$  — толщина квантовой ямы, а тензор деформации  $\epsilon$  определяется выражениями (24). Заметим, что, вообще говоря, деформационные вклады в параметры  $\eta$ ,  $\chi$  и  $\zeta$  зависят от угла  $\theta$ . Тем не менее основная зависимость параметров тонкой структуры дираковских состояний от кристаллографи-





**Рис. 5.** Дисперсии в квантовой яме HgTe/Cd<sub>0.7</sub>Hg<sub>0.3</sub>Te ориентации (013) и критической толщины  $d_c = 6.7$  нм для различных направлений волнового вектора в плоскости ямы: (а)  $\mathbf{k} \parallel x \parallel [100]$  и (б)  $\mathbf{k} \parallel y \parallel [031]$ . Дисперсии рассчитаны численно в рамках 6-зонной  $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ -теории для параметров HgTe и CdTe, приведенных в работах [4, 21, 29], и электрического поля  $E_z = 15$  кВ/см

ческой ориентации ямы содержится в гамильтонианах (4) и (5). Заметим также, что в структурах с симметричным потенциалом параметры  $\chi$  и  $\zeta$  обращаются в нуль, поскольку огибающие  $f_3(z)$  и  $f_4(z)$  имеют различные четности.

В заключение этого раздела приведем численные оценки параметров  $\gamma$ ,  $\eta$ ,  $\zeta$  и  $\chi$  для квантовых ям HgTe/Cd<sub>0.7</sub>Hg<sub>0.3</sub>Te критической толщины  $w = 6.7$  нм, используя зонные параметры материалов, упругие постоянные и параметр интерфейсного смешивания из работ [4, 21, 29]. Оценки показывают, что основной вклад в  $\gamma$  и  $\eta$  порядка 5 мэВ связан с интерфейсной асимметрией (ИА) при  $t_{l-h} \sim 1$ . Деформационный вклад в  $\eta$  можно оценить как 1 мэВ для межзонной константы деформационного потенциала  $\Xi_{cv} \approx -1$  эВ и компонент тензора деформации  $\epsilon_{yy} = 3 \cdot 10^{-3}$ ,  $\epsilon_{zz} = -4 \cdot 10^{-3}$ ,  $\epsilon_{yz} = 10^{-3}$ , рассчитанных с помощью выражений (24). Вклад объемной асимметрии (ВИА) в  $\eta$  со-

ставляет примерно 0.2 мэВ для зонного параметра  $B_+ \approx 0.4\hbar^2/m_0$ , величина которого оценена из таблицы для  $E'_g = 4.5$  эВ [36],  $Q = P$  и  $P' = 0.1P$ . Параметры  $\chi$  и  $\zeta$  связаны со структурной асимметрией (SIA) квантовой ямы. Оценки этих параметров приведем для электрического поля  $E_z = 15$  кВ/см<sup>2</sup>. Вклад в  $\chi$  и  $\zeta$ , обусловленный кубической гофрировкой спектра и определяемый разностью  $\gamma'_2 - \gamma'_3$ , имеет порядок 0.1 мэВ. Деформационные вклады в  $\chi$  и  $\zeta$  можно оценить как  $-0.1$  мэВ и  $-0.2$  мэВ. Параметры, связанные со структурной асимметрией, зависят от поля  $E_z$  и могут быть значительно больше в реальных структурах.

#### 4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В работе теоретически изучена тонкая структура дираковских состояний в квантовых ямах HgTe/CdHgTe критической и близкой к критической толщины. Получен эффективный гамильтониан, описывающий с единых позиций расщепление дираковских состояний в ямах кристаллографической ориентации (01h) с учетом объемной, интерфейсной и структурной асимметрии. Эффективный гамильтониан содержит четыре параметра, ответственные за расщепление энергетического спектра при нулевом волновом векторе в плоскости квантовой ямы. Эти четыре параметра рассчитаны в рамках расширенной 6-зонной модели Кейна, учитывающей отсутствие центра инверсии и кубическую форму кристаллической решетки, упругие напряжения в квантовой яме и смешивание состояний легких и тяжелых дырок на интерфейсах квантовой ямы. Получены также аналитические выражения для энергетического спектра дираковских состояний как функции направления роста квантовой ямы и изучена эволюция спектра при переходе от ямы (001) к ямам (013) и (011). В общем случае спектр анизотропен и содержит четыре вейлевских точки в ямах критической ширины. Положения вейлевских точек зависят от кристаллографической ориентации квантовой ямы и структурной асимметрии; ими можно управлять с помощью внешнего электрического поля, направленного вдоль нормали к квантовой яме, например напряжением на затворе.

**Финансирование.** Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (грант 22-12-00211). Один из авторов (Г. В. Б.) благодарит также фонд Базис.

## ЛИТЕРАТУРА

1. X.-L. Qi and S. C. Zhang, *Rev. Mod. Phys.* **83**, 1057 (2011).
2. З. Д. Квон, Д. А. Козлов, Е. Б. Ольшанецкий, Г. М. Гусев, Н. Н. Михайлов, С. А. Дворецкий, УФН **190**, 673 (2020) [*Phys.-Usp.* **63**, 629 (2020)].
3. B. Büttner, C. X. Liu, G. Tkachov, E. G. Novik, C. Brüne, H. Buhmann, E. M. Hankiewicz, P. Recher, B. Trauzettel, S. C. Zhang, and L. W. Molenkamp, *Nat. Phys.* **7**, 418 (2011).
4. S. A. Tarasenko, M. V. Durnev, M. O. Nestoklon, E. L. Ivchenko, J.-W. Luo, and A. Zunger, *Phys. Rev. B* **91**, 081302(R) (2015).
5. X. Dai, T. L. Hughes, X.-L. Qi, Z. Fang, and S. C. Zhang, *Phys. Rev. B* **77**, 125319 (2008).
6. M. König, H. Buhmann, L. W. Molenkamp, T. L. Hughes, C.-X. Liu, X.-L. Qi, and S. C. Zhang, *J. Phys. Soc. Jpn.* **77**, 031007 (2008).
7. R. Winkler, L. Y. Wang, Y. H. Lin, and C. S. Chu, *Sol. St. Comm.* **152**, 2096 (2012).
8. L. Weithofer and P. Recher, *New J. Phys.* **15**, 085008 (2013).
9. M. Orlita, K. Maształercz, C. Faugeras, M. Potemski, E. G. Novik, C. Brüne, H. Buhmann, and L. W. Molenkamp, *Phys. Rev. B* **83**, 115307 (2011).
10. M. Zholudev, F. Teppe, M. Orlita, C. Consejo, J. Torres, N. Dyakonova, M. Czapkiewicz, J. Wróbel, G. Grabecki, N. Mikhailov, S. Dvoretzki, A. Ikonnikov, K. Spirin, V. Aleshkin, V. Gavrilenko, and W. Knap, *Phys. Rev. B* **86**, 205420 (2012).
11. P. Olbrich, C. Zoth, P. Vierling, K.-M. Dantscher, G. V. Budkin, S. A. Tarasenko, V. V. Bel'kov, D. A. Kozlov, Z. D. Kvon, N. N. Mikhailov, S. A. Dvoretzki, and S. D. Ganichev, *Phys. Rev. B* **87**, 235439 (2013).
12. G. M. Minkov, A. V. Germanenko, O. E. Rut, A. A. Sherstobitov, M. O. Nestoklon, S. A. Dvoretzki, and N. N. Mikhailov, *Phys. Rev. B* **93**, 155304 (2016).
13. M. V. Durnev and S. A. Tarasenko, *Phys. Rev. B* **93**, 075434 (2016).
14. Э. И. Рашба, ФТТ **2**, 1224 (1960) [*Sov. Phys. Sol. St.* **2**, 1109 (1960)].
15. Ф. Т. Васько, Письма в ЖЭТФ **30**, 574 (1979) [*JETP Lett.* **30**, 541 (1979)].
16. Y. A. Bychkov and E. I. Rashba, *JETP Lett.* **39**, 78 (1984).
17. G. Dresselhaus, *Phys. Rev.* **100**, 580 (1955).
18. М. И. Дьяконов, В. Ю. Качоровский, ФТП **20**, 178 (1986) [*Sov. Phys. Semicond.* **20**, 110 (1986)].
19. Г. Е. Пикус, В. А. Марушак, А. Н. Титков, ФТП **22**, 185 (1988) [*Sov. Phys. Semicond.* **22**, 115 (1988)].
20. E. I. Rashba and E. Y. Sherman, *Phys. Lett. A* **129**, 175 (1988).
21. K.-M. Dantscher, D. A. Kozlov, P. Olbrich, C. Zoth, P. Faltermeier, M. Lindner, G. V. Budkin, S. A. Tarasenko, V. V. Bel'kov, Z. D. Kvon, N. N. Mikhailov, S. A. Dvoretzki, D. Weiss, B. Jenichen, and S. D. Ganichev, *Phys. Rev. B* **92**, 165314 (2015).
22. K.-M. Dantscher, D. A. Kozlov, M. T. Scherr, S. Gebert, J. Bärenfänger, M. V. Durnev, S. A. Tarasenko, V. V. Bel'kov, N. N. Mikhailov, S. A. Dvoretzki, Z. D. Kvon, J. Ziegler, D. Weiss, and S. D. Ganichev, *Phys. Rev. B* **95**, 201103(R) (2017).
23. G. M. Minkov, V. Ya. Aleshkin, O. E. Rut, A. A. Sherstobitov, A. V. Germanenko, S. A. Dvoretzki, and N. N. Mikhailov, *Phys. Rev. B* **96**, 035310 (2017).
24. S. Dvoretzki, N. Mikhailov, D. Ikusov, V. Kartashev, A. Kolesnikov, I. Sabinina, Y. G. Sidorov, and V. Shvets, in *Methods for Film Synthesis and Coating Procedures*, ed. by L. Nanai, IntechOpen (2020), Ch. 4.
25. O. E. Raichev, *Phys. Rev. B* **85**, 045310 (2012).
26. G. V. Budkin and S. A. Tarasenko, *Phys. Rev. B* **105**, L161301 (2022).
27. B. A. Bernevig, T. L. Hughes, and S.-C. Zhang, *Science* **314**, 1757 (2006).
28. Л. Е. Герчиков, А. В. Субашиев, ФТП **23**, 2210 (1989) [*Sov. Phys. Semicond.* **23**, 1368 (1989)].
29. E. G. Novik, A. Pfeuffer-Jeschke, T. Jungwirth, V. Latussek, C. R. Becker, G. Landwehr, H. Buhmann, and L. W. Molenkamp, *Phys. Rev. B* **72**, 035321 (2005).
30. R. Winkler, *Spin-Orbit Coupling Effects in Two-Dimensional Electron and Hole Systems*, Springer-Verlag, Berlin (2003).
31. G. L. Bir and G. E. Pikus, *Symmetry and Strain-induced Effects in Semiconductors*, Wiley, New York (1974).
32. J.-M. Jancu, R. Scholz, E. A. de Andrada e Silva, and G. C. L. Rocca, *Phys. Rev. B* **72**, 193201 (2005).
33. M. V. Durnev, M. M. Glazov, and E. L. Ivchenko, *Phys. Rev. B* **89**, 075430 (2014).
34. И. Л. Алейнер, Е. Л. Ивченко, Письма в ЖЭТФ **55**, 662 (1992) [*JETP Lett.* **55**, 692 (1992)].
35. E. L. Ivchenko, A. Y. Kaminski, and U. Rössler, *Phys. Rev. B* **54**, 5852 (1996).
36. Z. W. Lu, D. Singh, and H. Krakauer, *Phys. Rev. B* **39**, 10154 (1989).