

Kommensurabilitätsoszillationen in einem 3D topologischen Isolator aus HgTe unter eindimensionaler lateraler Modulation



DISSERTATION
ZUR ERLANGUNG DES DOKTORGRADES DER NATURWISSENSCHAFTEN
(DR. RER. NAT.)
DER FAKULTÄT FÜR PHYSIK
DER UNIVERSITÄT REGENSBURG

vorgelegt von
Albert Koop

aus
Angren (UZ)

im Jahr 2026

Promotionsgesuch eingereicht am: 03. Dezember 2025

Die Arbeit wurde angeleitet von:

Prof. Dr. Dieter Weiss

Prüfungsausschuss:

Vorsitzender: Prof. Dr. K. Richter

Erstgutachter: Prof. Dr. D. Weiss

Zweitgutachter: Prof. Dr. D. Bougeard

weiterer Prüfer: Prof. Dr. F. Kuemmeth

Inhaltsverzeichnis

1. Einleitung	1
2. Topologischer Isolator	5
2.1. Topologische Klassifikation	6
2.1.1. Zeitumkehrsymmetrie	7
2.1.2. $\mathbb{Z}_2$ -Klassifikation	8
2.1.3. Das Paritätskriterium	10
2.2. Berry-Phase	12
2.3. Bandinversion und Oberflächenzustände in HgTe	14
2.4. Bezug zur vorliegenden Arbeit	16
3. Grundlagen des Magnetotransports	17
3.1. Klassische Elektrodynamik und Drude-Theorie	17
3.2. Hall-Effekt und Magnetowiderstand	18
3.3. Landau-Quantisierung	18
3.3.1. Landau-Niveaus in zweidimensionalen Systemen	19
3.4. Shubnikov-de-Haas-Oszillationen	20
3.4.1. Lifshitz-Kosevich-Formel	22
3.4.2. Abgrenzung zum Quanten-Hall-Effekt	22
3.5. Quanten-Hall-Effekt	23
4. Kommensurabilitätsoszillationen	25
4.1. Landau-Bandbreite	26
4.1.1. Semiklassische Beschreibung: Guiding-Center-Drift	27
4.1.2. Bandleitfähigkeitskorrektur	31
4.2. Positiver Magnetowiderstand	32
4.2.1. Modulationsstärke aus dem Sättigungsfeld	33
4.2.2. Modulationspotential an Dirac-Fermionen	34
4.2.3. Screening und Fourierkomponenten	34
4.2.4. Beweglichkeitsabschätzung	36
4.3. Zusammenfassung und Ausblick	36
5. Materialeigenschaften	39
5.1. Schichtaufbau des verwendeten Wafers	39
5.2. Ladungsträgerdichten und Beweglichkeiten	40
5.3. Banddiagramm und Transportregime	41
5.4. Zwei-Ladungsträger-Drude-Modell	42
6. Probengeometrie und Herstellung	45
6.1. Probendesign	45

6.2.	Herstellung der Doppel-Gate-Struktur	48
6.2.1.	Streifen-Gate	50
6.2.2.	Top-Gate	51
6.3.	Messaufbau	52
6.4.	Bezug zu früheren Arbeiten	53
7.	Experimentelle Ergebnisse	55
7.1.	Referenzbereich	55
7.2.	Einstellung des Modulationspotentials	60
7.2.1.	Perioden und Symmetrien	62
7.3.	Weiss-Oszillationen	67
7.4.	WOs/Transportregime	71
7.4.1.	WOs im n-Regime	71
7.4.2.	WOs im p-dominierten Regime	76
7.5.	Ladungsträger im modulierten Bereich	78
8.	Simulation	85
8.1.	Abschätzung der Modulationsstärke	86
8.2.	WOs im Elektron-Loch-System	91
9.	Variation des Modulationspotentials	99
9.1.	Elektrostatische Simulation	101
9.2.	Thomas-Fermi-Screening	102
10.	Zusammenfassung und Ausblick	109
A.	Höhere Harmonische des Modulationspotentials	121
B.	Prozessschritte der Probenherstellung	127
	Abbildungsverzeichnis	131

1. Einleitung

More is Different.

Philip W. Anderson, *Science* **177**,
393–396 (1972).

Manchmal beginnt neue Physik dort, wo ein Material endet. An der Oberfläche eines dreidimensionalen topologischen Isolators (3D-TI) erscheinen leitende Zustände, obwohl das Volumen des Systems (Bulk) isolierend ist. Manchmal beginnt neue Physik aber auch dort, wo viele Elektronen im Magnetfeld auf eine bestimmte Gitterperiode treffen. Dann treten Größen in Beziehung zueinander, die kommensurabel werden können. Gerade aus diesem Zusammenspiel von Zyklotronbewegung und Gitterperiode gehen Weiss-Oszillationen hervor. Und manchmal lässt sich etwas Neues gerade über kommensurable Größen verstehen. Sie bieten damit eine Möglichkeit, ein komplexes System weiter zu untersuchen und daraus neue Fragestellungen abzuleiten.

- Wie verhalten sich Oberflächen- und Bulkkanäle in einem topologischen Isolator, wenn sie auf ein laterales Gitter treffen?
- Welche experimentellen Merkmale hinterlassen sie im Magnetotransport?
- Wie stark wird dieses Gitter elektrostatisch abgeschirmt?
- Wie stark koppeln die Oberflächen- und Bulkkanäle an das Gitter?
- Welche Ladungsträgerdichten und Beweglichkeiten dominieren?

Topologische Isolatoren wecken daher seit Jahren über die klassische Festkörperphysik hinaus Interesse [1]. An ihren Grenzflächen bewegen sich Dirac-Fermionen, die sich mit Magnetfeldern, Supraleitung und elektrostatischer Kontrolle koppeln lassen. Dadurch rücken sie in ein Umfeld, in dem fehlertolerante quantenmechanische Zustände, spintronische Konzepte und neue Ansätze für Quanteninformation denkbar werden [2–7]. Obwohl inzwischen sehr viele topologische Materialien identifiziert und katalogisiert wurden [8–10], konzentrieren sich experimentelle Arbeiten weiterhin auf wenige gut zugängliche Materialsysteme. Dazu gehören insbesondere Verbindungen auf Basis von Bismut, Quecksilber und Tellur. Die vorliegende Arbeit zielt nicht unmittelbar auf solche Anwendungen. Sie bewegt sich aber in demselben physikalischen Feld. Bevor sich komplexere Architekturen verstehen und kontrollieren lassen, muss zunächst klar sein, welche Zustände an den Grenzflächen vorliegen, wie sie zum Transport beitragen und wie sie sich durch äußere Potentiale beeinflussen lassen.

Diese Arbeit untersucht den Magnetotransport deshalb in einem HgTe-basierten dreidimensionalen topologischen Isolator mit einem gate-definierten eindimensionalen Gitter. Es wird durch das Modulationspotential einer Doppel-Gate-Struktur erzeugt, die in

dieser Form bisher noch nicht untersucht wurde. So lässt sich beobachten, wie Oberflächenzustände, Bulkkanäle und Magnetfeld auf eine aufgeprägte Periodizität antworten.

Im Magnetotransport zeigt sich, dass die Grenzflächenzustände dreidimensionaler topologischer Isolatoren durch eine Dirac-artige Dispersion und Spin-Impuls-Kopplung geprägt sind und sich damit deutlich von konventionellen zweidimensionalen Elektronensystemen unterscheiden. Ihr Ursprung liegt in der topologischen Struktur der elektronischen Bänder und der Zeitumkehrsymmetrie [11–13]. In realen Proben entsteht aus der Überlagerung verschiedener Leitfähigkeitsbeiträge zugleich eine maßgebliche experimentelle Schwierigkeit. Oberflächen- und Bulkkanäle tragen häufig gleichzeitig zum Signal bei, sodass sich Hall-Widerstand, Magnetowiderstand und weitere Effekte nicht ohne Weiteres einem einzelnen Kanal zuordnen lassen. Eine materialspezifische Randbedingung ist, dass der Bulk trotz vorhandener Bandlücke hinreichend isolierend bleibt. Bereits Defekte, Restdotierung oder zusätzliche Störstellenzustände können zu parasitärer Volumenleitfähigkeit führen und das System in Richtung eines metallischen Transportverhaltens verschieben [14]. Verspanntes HgTe ist dafür ein besonders zugängliches Materialsystem [15, 16]. Durch das Zusammenspiel von kleiner Bulk-Bandlücke, topologischen Oberflächenzuständen und der Lage des Dirac-Punkts entsteht hier ein Magnetotransport, an dem je nach Fermi-Niveau unterschiedliche Kanäle beteiligt sind [16–18].

Ein laterales Modulationspotential ist in diesem Zusammenhang besonders interessant. Es legt dem System eine feste Gitterperiode auf und verknüpft den Transport mit einer zusätzlichen Längenskala. Sobald Zyklotronradius und Gitterperiode in ein kommensurables Verhältnis geraten, treten Kommensurabilitätsoszillationen auf [19, 20]. Im Gegensatz zu quantenmechanischen Signaturen bei hohen Magnetfeldern erscheinen sie bereits im Niederfeldbereich und eröffnen damit einen semiklassischen Zugang zur Transportanalyse.

Entsprechend wurden in den vergangenen Jahren verschiedene Wege verfolgt, um ein laterales Modulationspotential in einem HgTe-basierten 3D-TI zu realisieren. Erste Untersuchungen an verspannten HgTe-Schichten mit geätzten periodischen Streifenstrukturen in der CdTe-Schutzschicht zeigten, dass sich auf diese Weise ein laterales Potential erzeugen lässt, mit dem Weiss-Oszillationen an einer einzelnen Oberfläche eines HgTe-basierten 3D-TI beobachtbar werden [21–23]. Im Zusammenhang mit dem Modulationspotential wurden auch höhere Harmonische gemessen, die die Auswertung deutlich erschwerten. Als mögliche Ursachen wurden sowohl Beiträge der geätzten Modulationsstruktur selbst als auch ein komplexerer Aufbau des wirksamen Potentials diskutiert. Um den Einfluss des Ätzprozesses von der eigentlichen periodischen Potentialmodulation zu trennen, wurden weitere Ansätze verfolgt.

Mit den in dieser Arbeit untersuchten gate-definierten Strukturen wird diese Fragestellung auf eine neue Weise zugänglich. Abbildung 1.1 fasst diese Ausgangssituation schematisch zusammen: Die Zustände des HgTe-basierten 3D-TI werden durch eine gate-definierte laterale Modulation mit einer zusätzlichen Längenskala verknüpft. Das laterale Gitter wird mithilfe von Gates erzeugt [24]. Seine Stärke lässt sich während des Experiments gezielt verändern. Dadurch lässt sich bei angelegtem Magnetfeld systematisch verfolgen, wie sich der gemessene Widerstand des Systems in Abhängigkeit von Gate-Spannung und Ladungsträgerdichte verändert. Für ein Material wie verspanntes HgTe lässt sich damit genauer beobachten, welche Transportkanäle beteiligt sind und

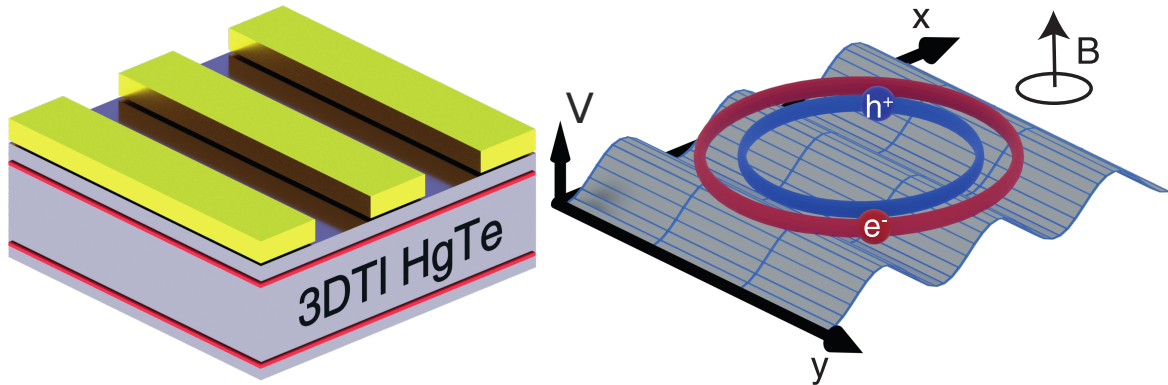


Abbildung 1.1.: Ausgangssituation der vorliegenden Arbeit. Die rot hervorgehobenen Oberflächenzustände eines HgTe-basierten dreidimensionalen topologischen Isolators (links) werden durch periodische Streifen-Gates einer zusätzlichen räumlichen Ordnung ausgesetzt. Rechts ist ein laterales Modulationspotential gezeigt. Im in z -Richtung angelegten Magnetfeld bewegen sich Elektronen und Löcher auf Zyklotronbahnen, deren Durchmesser mit der Gitterperiode kommensurabel werden kann.

wie die aufgeprägte Periodizität im Magnetotransport wirksam wird. Ergänzend wurden im Rahmen der Masterarbeit von Altmann [25] periodische Lackstreifen auf den Cap-Layer des HgTe-Wafers aufgebracht. Aufgrund der unterschiedlichen thermischen Ausdehnungskoeffizienten von Lack und Heterostruktur entsteht beim Abkühlen eine lokale Verspannung, die sich auf die darunterliegende HgTe-Schicht überträgt und dort über piezoelektrische Beiträge ein periodisches Potential erzeugen kann [24, 25].

Zum Aufbau der Arbeit:

- Im Kapitel *Topologischer Isolator* geht es zunächst um die physikalische Grundlage topologischer Phasen und um die Oberflächenzustände in verspanntem HgTe.
- Im Kapitel *Grundlagen des Magnetotransports* werden Drude-Bild, Hall-Effekt, Landau-Quantisierung und Shubnikov-de-Haas-Oszillationen eingeführt.
- Im Kapitel *Kommensurabilitätsoszillationen* steht die Physik der Weiss-Oszillationen selbst im Mittelpunkt.
- Im Kapitel *Materialeigenschaften* wird der verwendete 80 nm-HgTe-Wafer mit seinen Transportregimen beschrieben. Dort zeigt sich bereits, warum vor allem das Valenzband für die Auswertung interessant ist.
- Im Kapitel *Probengeometrie und Herstellung* wird der Weg von der Heterostruktur zur modulierten Hall-Bar nachvollzogen. Dazu gehören das Probendesign und die Umsetzung der Doppel-Gate-Struktur.
- Im Kapitel *Experimentelle Ergebnisse* steht schließlich die Messung selbst im Mittelpunkt. Dort werden Referenz und modulierte Struktur verglichen, die Weiss-Oszillationen ausgewertet und durch Simulationen ergänzt.
- Im abschließenden Kapitel werden die Ergebnisse zusammengefasst.

2. Topologischer Isolator

Topologische Isolatoren verhalten sich im Inneren wie gewöhnliche Isolatoren, besitzen aber aufgrund ihrer nichttrivialen Bandtopologie leitfähige, geschützte Zustände am Rand eines zweidimensionalen Systems beziehungsweise an der Oberfläche eines dreidimensionalen Systems. Damit unterscheiden sie sich von vielen klassischen Festkörperphasen, die meist über gebrochene Symmetrien beschrieben werden. Ihre Charakterisierung erfolgt über topologische Eigenschaften der elektronischen Bandstruktur. Für topologische Isolatoren sind die durch Zeitumkehrsymmetrie geschützten Randbeziehungsweise Oberflächenzustände wichtig. Sie entstehen aus einer nichttrivialen Bandtopologie infolge von Bandinversion. Für das Verständnis dieser Zusammenhänge wird die Berry-Phase herangezogen, welche die geometrische Phase quantenmechanischer Zustände beschreibt. Darüber hinaus ist für das hier betrachtete Materialsystem die $\mathbb{Z}_2$ -Klassifikation wesentlich, die in inversionssymmetrischen Systemen über das Paritätskriterium praktisch zugänglich ist. [11, 26–30]

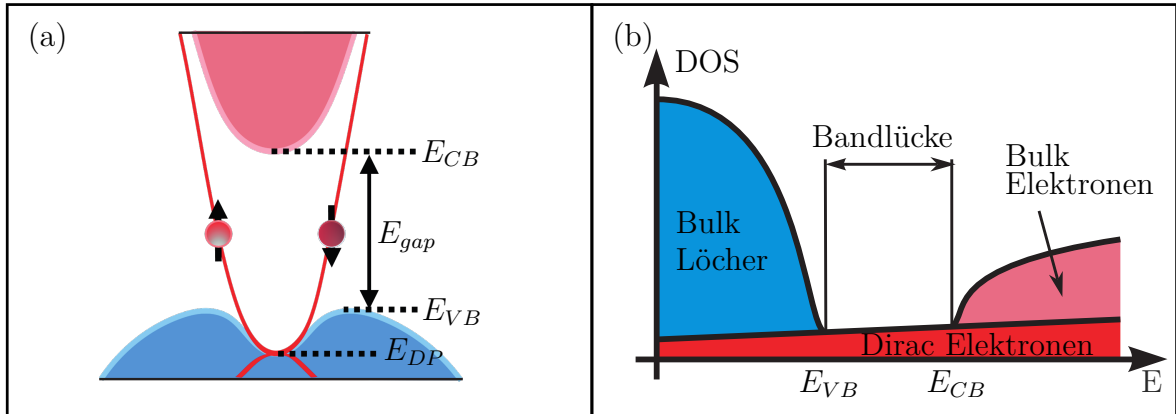


Abbildung 2.1.: Darstellung einer verspannten HgTe-Schicht als dreidimensionaler topologischer Isolator. (a) Gezeigt ist die Bandstruktur mit Valenzband (blau), Leitungsband (hellrot) und topologischen Oberflächenzuständen ohne Spin-Entartung (rot). Der Dirac-Punkt E_{DP} liegt im Valenzband. Wegen der Kopplung an Zustände des Valenzbands verläuft die Dispersion der Oberflächenzustände nicht ideal linear, sondern leicht gekrümmt bzw. parabolisch. E_{VB} kennzeichnet die Valenzbandkante, E_{CB} die Leitungsbandkante. Die Bulk-Bandlücke E_{gap} beträgt etwa 15 meV. Nach [15, 31, 32]. (b) Zugehörige schematische Zustandsdichte (Density of States, DOS) als Funktion der Energie. Im Valenzband wird die Zustandsdichte vor allem durch Bulk-Löcher dominiert, während Dirac-Elektronen zusätzlich einen Beitrag liefern. In der Bandlücke sind nur Dirac-Oberflächenzustände besetzt, oberhalb der Leitungsbandkante E_{CB} kommen Bulk-Elektronen hinzu. Nach [16, 33].

Abbildung 2.1 zeigt schematisch die Bandstruktur und die zugehörige Zustandsdichte der verspannten HgTe-Schicht. Je nach Lage des Fermi-Niveaus tragen lochartige Bulk-Zustände, Dirac-artige Oberflächenzustände oder Bulk-Elektronen unterschiedlich stark zum Transport bei [16, 33]. Die Entstehung dieser Oberflächenzustände lässt sich aus der Topologie der elektronischen Bandstruktur verstehen.

2.1. Topologische Klassifikation

Noch bevor topologische Phasen als solche verstanden wurden, zeigte die Entdeckung des ganzzahligen Quanten-Hall-Effekts (IQHE, engl. *integer quantum Hall effect*) [34] bereits Merkmale topologischer Physik. Die Hall-Leitfähigkeit ist dabei exakt quantisiert und ergibt sich zu

$$\sigma_{xy} = \nu \frac{e^2}{h}. \quad (2.1)$$

Dabei ist ν der ganzzahlige Füllfaktor, also die Zahl der besetzten Landau-Niveaus einschließlich möglicher Entartungen. Die Größen e und h bezeichnen die Elementarladung beziehungsweise das Plancksche Wirkungsquantum. Diese Quantisierung passte nicht in das klassische Bild von Phasenübergängen, die durch Symmetriebrechung beschrieben werden. Entscheidend ist stattdessen eine globale, topologische Eigenschaft der elektronischen Zustände. Formal lässt sich der ganzzahlige Quanten-Hall-Zustand (siehe Kapitel 3.5) trotz seiner besonderen Eigenschaften als Bandisolator auffassen [11]. Eine solche Beschreibung setzt allerdings eine Bandstruktur im üblichen Sinn voraus und damit das Bloch'sche Theorem, also kommutierende Translationsoperatoren. Im Magnetfeld ist das jedoch nicht mehr ohne Weiteres gegeben. Die Erklärung erfolgte durch die Einführung topologischer Invarianten, insbesondere der Chern-Zahl C , die die globalen Eigenschaften der Bandstruktur charakterisiert [35]. Diese topologische Beschreibung führte zur Erkenntnis, dass die quantisierten Hall-Zustände durch eine nichttriviale Topologie der elektronischen Zustände in der Brillouin-Zone gekennzeichnet sind [11].

Wie sich diese Topologie physikalisch zeigt, lässt sich am Bild der Randkanäle im ganzzahligen Quanten-Hall-Effekt sehen. In einem konventionellen zweidimensionalen Elektronengas (2DEG) mit starkem senkrecht angelegtem Magnetfeld bewegen sich die Elektronen zunächst auf Zyklotronbahnen. An der Probenkante gehen diese Bahnen, wie in Fig. 2.2(a) gezeigt, in gerichtete Randkanäle (Skipping Orbits, blau) über. Ursache ist die Reflexion der Zyklotrontrajektorien an der Kante, durch die eine gerichtete Bewegung entlang des Randes entsteht. Im k -Raum entspricht das bei offener Kante einem Randzweig, der die Bulk-Bandlücke durchquert und Valenz- und Leitungsband verbindet (siehe Fig. 2.2). Die Zahl dieser Randkanäle ist durch die topologische Invariante festgelegt und damit direkt mit der Chern-Zahl verknüpft. Für den ganzzahligen Quanten-Hall-Effekt gilt daher $\nu = C$ und entsprechend $\sigma_{xy} = Ce^2/h$ [35, 36].

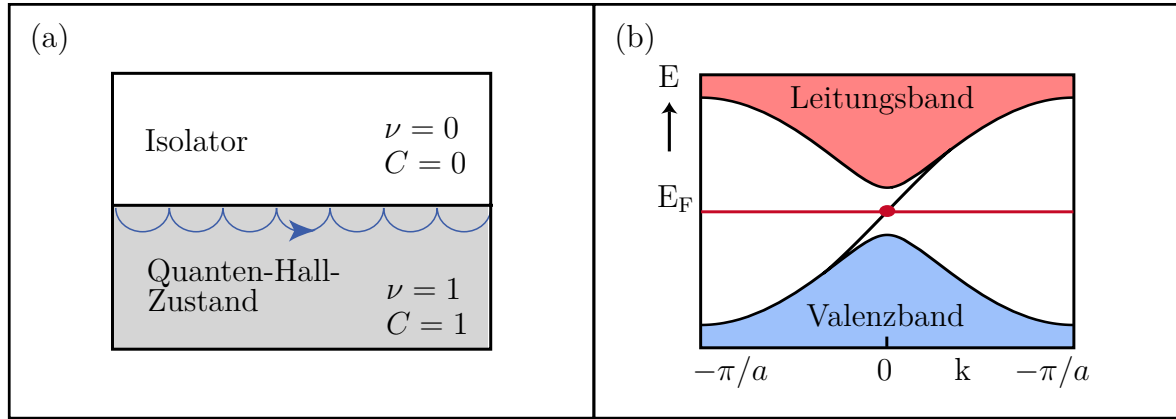


Abbildung 2.2.: Topologisch geschützte chirale Randleitung im Quanten-Hall-Regime in zwei Darstellungen: (a) Im Realraum ist die Grenzfläche zwischen einem trivialen Isolator mit $\nu = 0$ und $C = 0$ und einem Quanten-Hall-Zustand mit $\nu = 1$ und $C = 1$ dargestellt. An dieser Grenze entsteht durch randreflektierte Zyklotrontrajektorien (Skipping Orbits, blau) ein chiraler, quantisierter Randkanal. (b) Im k -Raum zeigt das Spektrum für eine Geometrie mit offener Kante einen Randzweig, der die Bulk-Bandlücke durchquert und damit Valenz- und Leitungsband verbindet. Nach [11].

Die topologische Klassifikation beschränkt sich also nicht auf den Quanten-Hall-Effekt. Sie lässt sich auch auf zeitumkehrsymmetrische Systeme erweitern und umfasst damit topologische Isolatoren in zwei und drei Dimensionen [27, 37, 38]. Während der Quanten-Hall-Effekt auf gebrochener Zeitumkehrsymmetrie beruht und durch die Chern-Zahl beschrieben wird, verschwindet in zeitumkehrsymmetrischen Systemen die gesamte Chern-Zahl. Ihre topologische Charakterisierung erfolgt daher über $\mathbb{Z}_2$ -Invarianten. Der Unterschied zeigt sich besonders daran, dass topologische Rand- und Oberflächenzustände auch ohne äußeres Magnetfeld, also bei $B = 0$, auftreten können.

2.1.1. Zeitumkehrsymmetrie

Für topologische Isolatoren ist die Zeitumkehrsymmetrie wichtig, da sie sowohl die topologische Klassifikation als auch den Schutz der Rand- beziehungsweise Oberflächenzustände bestimmt. Einfach verstanden bedeutet Zeitumkehrsymmetrie, dass die physikalischen Gesetze unverändert bleiben, wenn die Zeit t durch $-t$ ersetzt wird. In einem solchen System existiert für jeden Zustand ein Zeitumkehrpartner, der die gleiche Energie besitzt, aber entgegengesetzte Impuls- und Spinrichtungen aufweist.

Für Elektronen mit Spin $1/2$ wird die Zeitumkehr durch den antiunitären Operator $\Theta = i\sigma_y K$ beschrieben. Dabei bezeichnet K die komplexe Konjugation und σ_y die Pauli-Matrix in y -Richtung. Diese Form gewährleistet, dass alle Spin-Komponenten unter Zeitumkehr korrekt ihr Vorzeichen wechseln. Damit werden Impuls und Spin umgedreht, also aus $\mathbf{k}$ wird $-\mathbf{k}$ und aus Spin-Up $\uparrow$ wird Spin-Down $\downarrow$.

Für einen zeitumkehrsymmetrischen Hamiltonoperator gilt demnach:

$$\Theta H(\mathbf{k}) \Theta^{-1} = H(-\mathbf{k}). \quad (2.2)$$

Das bedeutet anschaulich, dass zu jedem Zustand bei $\mathbf{k}$ ein Zeitumkehrpartner bei $-\mathbf{k}$ gehört, da $\mathbf{k}$ über $\mathbf{p} = \hbar\mathbf{k}$ direkt mit dem Impuls verknüpft ist und der Impuls unter Zeitumkehr das Vorzeichen wechselt.

Für helikale Randzustände eines topologischen Isolators folgt aus der Zeitumkehrsymmetrie, dass ein Zustand $(\mathbf{k}, \uparrow)$ auf den zugehörigen Gegenzustand $(-\mathbf{k}, \downarrow)$ abgebildet wird und umgekehrt. Ein einzelner Randkanal ist daher für sich genommen nicht zeitumkehrinvariant. Erst das Paar aus zwei gegenläufigen, spinabhängigen Randkanälen erfüllt die Zeitumkehrsymmetrie. Somit kann ein topologischer Isolator bei $B = 0$ zeitumkehrsymmetrisch sein, obwohl unter Zeitumkehr sowohl die Ausbreitungsrichtung als auch die Spinrichtung eines einzelnen Zustands wechseln [11, 28, 37].

2.1.2. $\mathbb{Z}_2$ -Klassifikation

Für zeitumkehrsymmetrische Systeme ist die gesamte Chern-Zahl gleich null. Der Grund dafür ist, dass die Zustände nicht unabhängig voneinander auftreten, sondern durch die Zeitumkehr immer paarweise miteinander verknüpft sind. Sie eignet sich damit nicht, um zeitumkehrsymmetrische topologische Phasen zu charakterisieren. Der zweidimensionale Fall mit seinen helikalen Randzuständen ist in Abbildung 2.3 schematisch dargestellt. Er wird als Quanten-Spin-Hall-Zustand bezeichnet und wurde in HgTe/CdTe-Quantentöpfen experimentell nachgewiesen [37–39].

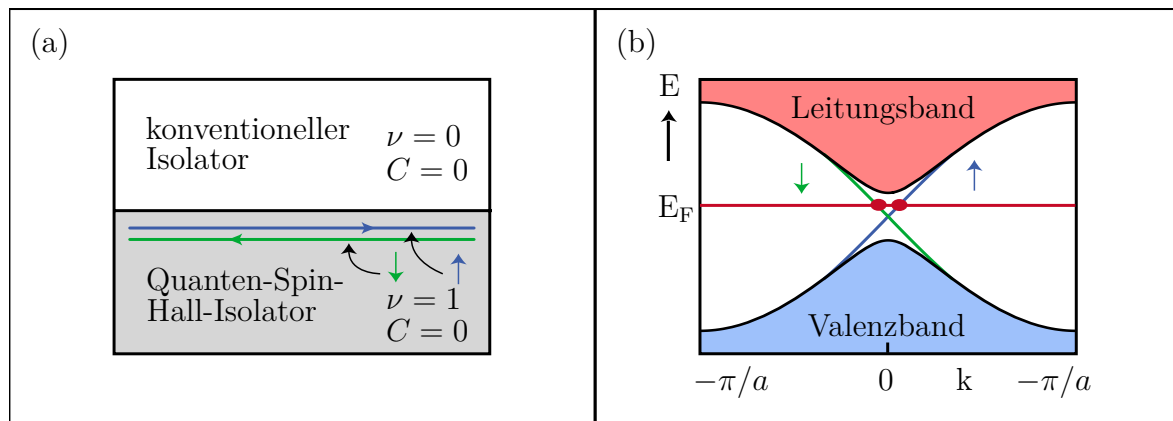


Abbildung 2.3.: Randzustände im Quanten-Spin-Hall-Zustand. (a) An der Grenzfläche zwischen einer topologisch nichttrivialen und einer trivialen isolierenden Phase entstehen leitfähige, räumlich lokalisierte Randkanäle. (b) Die Dispersionsrelation zeigt den helikalen Charakter dieser Zustände: Elektronen mit entgegengesetzten Spinausrichtungen propagieren entlang derselben Kante in entgegengesetzte Richtungen. Eigene Darstellung nach [11].

Zur Beschreibung dieser Systeme wurde deshalb die $\mathbb{Z}_2$ -Invariante eingeführt. Im zweidimensionalen Fall kann sie nur zwei Werte annehmen: $\nu = 0$ für eine topologisch triviale Phase und $\nu = 1$ für eine topologisch nichttriviale Phase. Anders als die Chern-Zahl zählt sie also nicht eine beliebige ganze Zahl, sondern unterscheidet nur zwischen zwei topologisch verschiedenen Klassen. Die physikalische Grundlage dieser Klassifikation ist das Kramers-Theorem. In Systemen mit halbzahligen Spin und erhaltener Zeitumkehrsymmetrie ($\mathcal{T}^2 = -1$) treten die Zustände paarweise als Kramers-Paare auf. Besonders wichtig sind dabei die zeitumkehrinvarianten Punkte der Brillouin-Zone, kurz TRIM-Punkte (von engl. time-reversal invariant momenta). Für diese Impulse gilt $\mathbf{k} = -\mathbf{k} + \mathbf{G}$, wobei $\mathbf{G}$ ein reziproker Gittervektor ist. An diesen Punkten fallen ein Zustand und sein zeitumgekehrter Partner also auf denselben Kristallimpuls, weshalb die Zustände dort mindestens zweifach entartet sind. Für allgemeine $\mathbf{k}$ -Werte liegen

die Partner dagegen bei $\pm \mathbf{k}$, sodass eine Entartung am selben $\mathbf{k}$ im Allgemeinen nicht erzwungen ist. Es können also auch ohne äußeres Magnetfeld topologisch nichttriviale Phasen entstehen, wenn die Spin-Bahn-Kopplung stark genug ist. Diese Phasen werden dann nicht durch die Chern-Zahl, sondern durch die $\mathbb{Z}_2$ -Invariante charakterisiert.

Anschaulich lässt sich der Quanten-Spin-Hall-Zustand daher als zwei zeitumgekehrte Kopien eines Quanten-Hall-Systems betrachten. In einem vereinfachten Bild setzt sich der Zustand aus zwei zeitumgekehrten Beiträgen zusammen, die entgegengesetzte Chern-Zahlen tragen, etwa $C_{\uparrow} = +1$ und $C_{\downarrow} = -1$. Die gesamte Chern-Zahl ist daher null. Dennoch ist die Phase nicht trivial, da an jeder Kante ein helikales Kramers-Paar erhalten bleibt. Der Unterschied zwischen einer trivialen Phase und dem Quanten-Spin-Hall-Zustand wird deshalb durch die $\mathbb{Z}_2$ -Invariante beschrieben. Für den Quanten-Spin-Hall-Zustand gilt $\nu = 1$. [11, 37, 38]

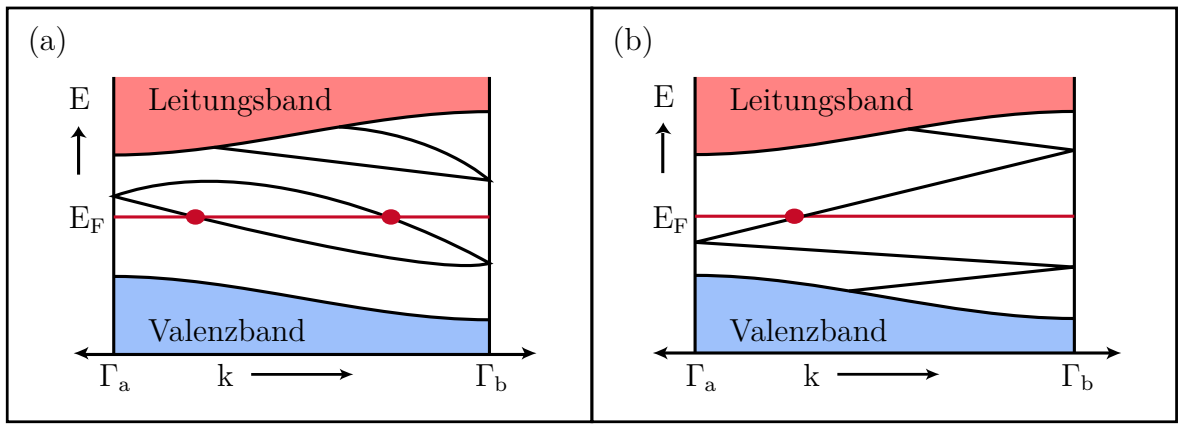


Abbildung 2.4.: Schematische Darstellung zweier möglicher Randbandstrukturen zwischen den zeitumkehrinvarianten Punkten $\Gamma_a = 0$ und $\Gamma_b = \pi/a$. In (a) liegt keine Bandinversion vor. Die Randzustände verbinden sich in trivialer Weise, sodass die Fermi-Energie E_F eine gerade Anzahl von Schnittpunkten mit den Randbändern besitzt. In (b) führt eine Bandinversion zu einem Partnerwechsel der Randzustände zwischen den beiden TRIM-Punkten. Dadurch wird die Bulk-Bandlücke von helikalen Randzuständen eine ungerade Anzahl von Malen durchquert, was eine topologisch nichttriviale Phase kennzeichnet. Eigene Darstellung nach [11].

Die $\mathbb{Z}_2$ -Invariante lässt sich im zweidimensionalen Fall anschaulich über die Randbandstruktur verstehen. Die topologische Einordnung hängt davon ab, ob die helikalen Randzustände die Bandlücke des zweidimensionalen Systems entlang einer Verbindung zwischen zwei benachbarten TRIM-Punkten eine gerade oder ungerade Anzahl von Malen durchqueren. Eine ungerade Zahl solcher Durchquerungen, wie in Abbildung 2.4(b) dargestellt, kennzeichnet eine topologisch nichttriviale Phase. Solange die Zeitumkehrsymmetrie erhalten bleibt, kann ein einzelnes helikales Kramers-Paar nicht durch zeitumkehrsymmetrische Störungen entfernt werden. Ein kontinuierlicher Übergang zu einem trivialen Isolator ist nur möglich, wenn sich die Bulk-Bandlücke im Phasenübergang schließt [11, 27, 37].

Übertragung auf einen 3D-TI

Die aus dem zweidimensionalen Fall bekannte $\mathbb{Z}_2$ -Klassifikation lässt sich auf dreidimensionale topologische Isolatoren erweitern [28, 40]. In drei Dimensionen besitzt die Brillouin-Zone acht zeitumkehrinvariante Impulse, da allgemein in d Dimensionen 2^d TRIM-Punkte auftreten. Die vollständige topologische Klassifikation erfolgt durch vier $\mathbb{Z}_2$ -Invarianten $(\nu_0; \nu_1\nu_2\nu_3)$. Dabei unterscheidet die starke Invariante ν_0 zwischen starken topologischen Isolatoren mit robusten metallischen Oberflächenzuständen ($\nu_0 = 1$) und Phasen mit $\nu_0 = 0$. Letztere umfassen sowohl triviale als auch schwache topologische Isolatoren (siehe Abbildung 2.5), die im weiteren Verlauf vor allem zur Erläuterung der Notation und ihrer Klassifikationsmerkmale kurz eingeordnet werden.

2.1.3. Das Paritätskriterium

Für inversionssymmetrische Materialien lässt sich die Bestimmung der topologischen Phase erheblich vereinfachen [27]. Die starke $\mathbb{Z}_2$ -Invariante ν_0 kann in diesem Fall allein aus den Paritätseigenwerten der besetzten Bänder an den zeitumkehrinvarianten Impulsen bestimmt werden:

$$(-1)^{\nu_0} = \prod_{i=1}^8 \delta_i, \quad \text{mit} \quad \delta_i = \prod_{m=1}^N \xi_{2m}(\Gamma_i). \quad (2.3)$$

Dabei läuft i über die acht TRIM-Punkte Γ_i , und $\xi_{2m}(\Gamma_i) = \pm 1$ bezeichnet den Paritätseigenwert eines Zustands aus dem m -ten besetzten Kramers-Paar, wobei der Index $2m$ einen Repräsentanten dieses Paares kennzeichnet. Da beide Partner eines Kramers-Paares denselben Paritätseigenwert besitzen, genügt es, pro Paar nur einen Vertreter, als Index $2m$, in das Produkt einzubeziehen. Die Bedeutung dieses Kriteriums wird besonders anschaulich im Fall einer Bandinversion, wie sie beispielsweise bei HgTe und CdTe vorliegt. Ein s -artiges Orbital (Γ_6) besitzt gerade Parität mit $\xi = +1$, während ein p -artiges Orbital (Γ_8) ungerade Parität mit $\xi = -1$ aufweist. Vertauschen diese Bänder an einem TRIM-Punkt ihre energetische Reihenfolge, so ändert sich das Vorzeichen von δ_i . Das Gesamtprodukt über alle TRIM-Punkte wird genau dann negativ, wenn an einer ungeraden Anzahl von TRIM-Punkten eine Bandinversion vorliegt. In diesem Fall ist die starke Invariante nichttrivial, also $\nu_0 = 1$.

Im Folgenden bezeichnen Bulk-TRIM und Oberflächen-TRIM zeitumkehrinvariante Punkte der dreidimensionalen beziehungsweise zweidimensionalen Brillouin-Zone. Diese Begriffe sind von der späteren Unterscheidung zwischen Bulk- und Oberflächenzuständen im Ortsraum zu trennen.

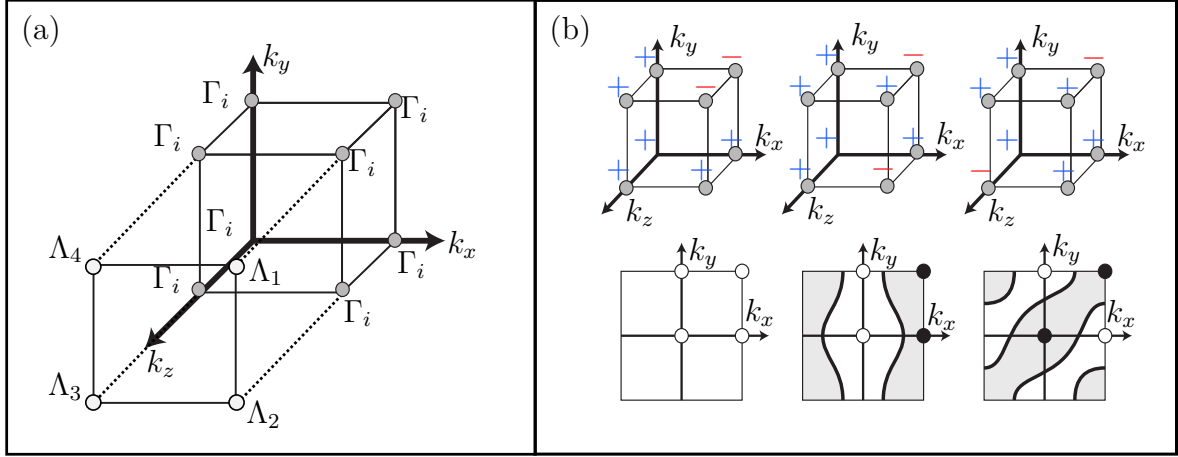


Abbildung 2.5.: Bulk- und Oberflächen-TRIM sowie die daraus abgeleiteten Paritätsvorzeichen für schwache topologische Isolatoren nach dem Fu-Kane-Formalismus [11, 28]. (a) Dargestellt sind die acht zeitumkehrinvarianten Impulse des Volumens, Γ_i , in der dreidimensionalen Brillouin-Zone (graue Punkte mit schwarzem Rand). Durch Projektion entlang der Oberflächennormalen, hier in k_z -Richtung, werden jeweils zwei Bulk-TRIM auf einen gemeinsamen Oberflächen-TRIM Λ_a abgebildet, sodass insgesamt vier Oberflächen-TRIM Λ_1 bis Λ_4 entstehen (weiße Kreise mit schwarzem Rand). (b) Gezeigt sind drei mögliche Verteilungen der Bulk-Paritätsvorzeichen $\delta_i = \pm 1$ an den acht TRIM-Punkten. In den jeweils darunterliegenden Projektionen werden die Vorzeichen der auf denselben Oberflächenpunkt projizierten Bulk-TRIM multipliziert, $\pi_a = \delta_i \delta_j$. Gleiche Vorzeichen führen zu $\pi_a = +1$ (weißer Punkt), unterschiedliche Vorzeichen zu $\pi_a = -1$ (schwarzer Punkt). Da in allen dargestellten Fällen eine gerade Anzahl von Oberflächenpunkten mit negativem Paritätsvorzeichen π_a auftritt, ergeben sich keine robusten Oberflächenzustände eines starken topologischen Isolators; die gezeigten Konfigurationen entsprechen daher schwachen topologischen Isolatorphasen [11, 28].

Für einen starken topologischen Isolator sind die Oberflächenzustände durch mehrere charakteristische Eigenschaften gekennzeichnet. Jede Oberfläche trägt eine ungerade Anzahl von Dirac-Kegeln, im einfachsten Fall genau einen, wobei die Dispersion in der Nähe des Dirac-Punkts linear verläuft (Abbildung 2.6(b)-(c)). Zugleich sind die Oberflächenzustände durch eine Spin-Impuls-Kopplung (engl. Spin-Momentum Locking) charakterisiert, sodass Zustände mit entgegengesetztem Impuls entgegengesetzten Spin tragen und damit nicht spinentartet sind. Der Spin steht senkrecht zum Impuls, wie in Abbildung 2.6(c) schematisch angedeutet. Ein geschlossener Umlauf um die Fermi-Fläche im k -Raum führt zudem zu einer Berry-Phase von π (Kapitel 2.2). Darüber hinaus ist die elastische 180°-Rückstreuung an nichtmagnetischen Störstellen aufgrund der Spin-Impuls-Kopplung unterdrückt. Wie bereits erwähnt, sind diese Eigenschaften durch die Zeitumkehrsymmetrie geschützt.

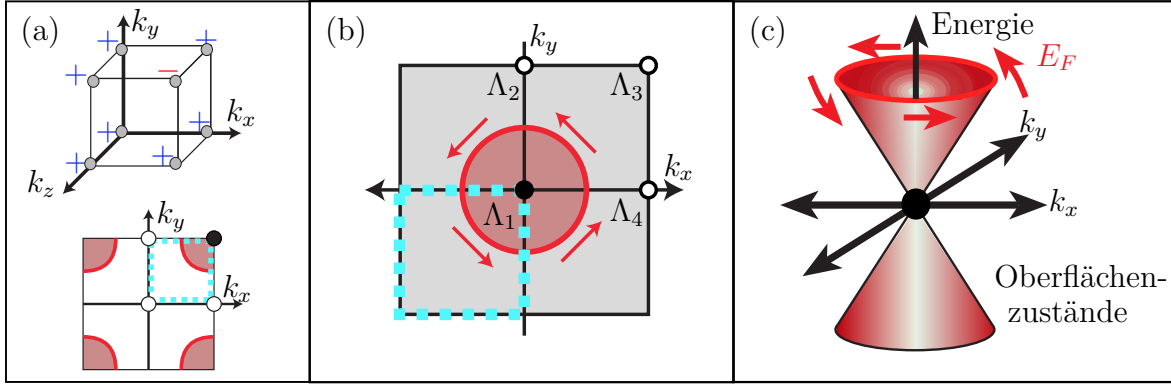


Abbildung 2.6.: Paritätskriterium und Oberflächenzustände eines starken topologischen Isolators nach dem Fu–Kane-Formalismus [11, 28]. (a) Eine ungerade Anzahl negativer Bulk-Paritätsvorzeichen führt nach der Projektion auf die Oberflächen-Brillouin-Zone zu einem ausgezeichneten Oberflächen-TRIM mit $\pi_a = -1$. (b) Zwischen diesem Punkt und den übrigen Oberflächen-TRIM muss eine ungerade Zahl von Oberflächenbandkreuzungen auftreten. Im einfachsten Fall entsteht ein einzelner Dirac-Kegel. Der rote Kreis zeigt eine Fermi-Fläche um den Dirac-Punkt. (c) Schematische Dirac-Dispersion der topologischen Oberflächenzustände. Die roten Pfeile deuten die helikale Spin-Textur an, bei der der Spin senkrecht zum Impuls steht.

Die Oberflächenzustände eines starken topologischen Isolators werden in der Nähe des Dirac-Punkts durch den effektiven Hamiltonoperator

$$\mathcal{H}_{\text{surf}} = \hbar v_F (k_x \sigma_y - k_y \sigma_x) = \hbar v_F (\mathbf{k} \times \boldsymbol{\sigma}) \cdot \hat{z} \quad (2.4)$$

beschrieben [41]. Eine dazu äquivalente Darstellung findet sich in der Literatur häufig in Ortsraumform [11]. Die in Gleichung (2.4) verwendete Schreibweise ist die entsprechende Impulsraumdarstellung für eine Oberfläche mit Normalenvektor $\hat{z}$ und macht die Kopplung zwischen Impuls und Spin unmittelbar sichtbar (wie in Abbildung 2.6(c)). Dabei bezeichnet v_F die Fermi-Geschwindigkeit, $\mathbf{k} = (k_x, k_y)$ den zweidimensionalen Wellenvektor in der Oberflächenebene und $\boldsymbol{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$ den Vektor der Pauli-Matrizen, die auf den realen Spin wirken [42]. Aus dem effektiven Oberflächen-Hamiltonoperator folgt unmittelbar eine lineare Dirac-Dispersion der Form

$$E_{\pm}(\mathbf{k}) = \pm \hbar v_F |\mathbf{k}| \quad (2.5)$$

wobei der Dirac-Punkt als Referenzenergie gewählt wurde [11, 26]. Die Oberflächenzustände sind damit durch eine konische, linear dispersive Bandstruktur charakterisiert.

2.2. Berry-Phase

Für im Experiment auftretende Charakteristika ist nicht nur die Dispersion $E(\mathbf{k})$ entscheidend, sondern auch die Phase der Bloch-Wellenfunktion. Die Bloch-Funktion ist dabei von der Form $\psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})$, wobei $u_{n\mathbf{k}}$ die zellperiodische Funktion des Bandes n ist. Der zellperiodische Anteil ist nicht eindeutig definiert und man darf für jedes $\mathbf{k}$ eine beliebige Phase wählen, $u_{n\mathbf{k}} \mapsto e^{i\varphi(\mathbf{k})} u_{n\mathbf{k}}$. Die Wahl dieser „Eichung“ ist rein konventionell und wirkt sich nicht auf beobachtbare Größen aus. Betrachtet man

jedoch die $\mathbf{k}$ -Abhängigkeit der Eigenzustände und vergleicht Zustände entlang eines Weges in der Brillouin-Zone, so kann zusätzlich zur dynamischen Phase eine geometrische Phase (Berry-Phase) auftreten [11, 29].

Die geometrische Information kann man in der sogenannten Berry-Verbindung zusammenfassen,

$$\mathcal{A}_n(\mathbf{k}) = i \langle u_{n\mathbf{k}} | \nabla_{\mathbf{k}} u_{n\mathbf{k}} \rangle. \quad (2.6)$$

Für eine geschlossene Kurve C in der Brillouin-Zone ergibt sich daraus die Berry-Phase

$$\gamma_n(C) = \oint_C \mathcal{A}_n(\mathbf{k}) \cdot d\mathbf{k}. \quad (2.7)$$

Auch die Berry-Verbindung ist damit nicht eindeutig festgelegt. Für eine geschlossene Kurve ist die Berry-Phase jedoch bis auf Vielfache von 2π wohldefiniert.

Wichtiger als die Verbindung selbst ist daher die zugehörige Berry-Krümmung

$$\mathcal{F}_n(\mathbf{k}) = \nabla_{\mathbf{k}} \times \mathcal{A}_n(\mathbf{k}), \quad (2.8)$$

also die Größe, die eichinvariant ist und direkt mit beobachtbaren Effekten zusammenhängt. In zwei Dimensionen ist dabei nur die Komponente senkrecht zur Ebene relevant, $\mathcal{F}_n(\mathbf{k}) \equiv [\mathcal{F}_n]_z$. Mit dem Stokes-Theorem lässt sich die Berry-Phase dann auch als Flächenintegral über die von C eingeschlossene Fläche $S(C)$ schreiben:

$$\gamma_n(C) = \int_{S(C)} d^2k \mathcal{F}_n(\mathbf{k}). \quad (2.9)$$

Die Berry-Krümmung kann man dabei als ein effektives Magnetfeld im $\mathbf{k}$ -Raum auffassen: Sie beschreibt, wie stark sich die Phase der Eigenzustände beim Durchlaufen des $\mathbf{k}$ -Raums verändert. In dieser Analogie übernimmt die Berry-Verbindung die Rolle eines Vektorpotentials, während die Berry-Krümmung der zugehörigen Feldstärke entspricht. Die Berry-Phase entlang einer geschlossenen Kurve ist damit das geometrische Analogon zur Aharonov-Bohm-Phase. Für den 3D-TI bedeutet das, dass die Berry-Phase der Dirac-Oberflächenzustände direkt mit ihrer Spinorstruktur verknüpft ist. Die nichttriviale Berry-Phase der Oberflächenzustände eines starken topologischen Isolators lässt sich daraus verstehen, dass ein Spinor bei einer vollen 2π -Drehung nicht wieder exakt auf sich selbst abbildet, sondern einen Vorzeichenwechsel erfährt [11]. Für einen Spin- $\frac{1}{2}$ -Zustand gilt

$$U(2\pi) = -1 = e^{i\pi}. \quad (2.10)$$

Umschließt eine geschlossene Bahn im $\mathbf{k}$ -Raum einen einzelnen Dirac-Punkt, so dreht sich die Spinorstruktur der Oberflächenzustände aufgrund des Spin-Momentum-Lockings einmal um 2π . Der Zustand akkumuliert dabei eine geometrische Phase von

$$\gamma = \pi \pmod{2\pi}, \quad (2.11)$$

was ein charakteristisches Merkmal der Dirac-artigen Oberflächenzustände starker topologischer Isolatoren ist.

2.3. Bandinversion und Oberflächenzustände in HgTe

Im Folgenden wird die konkrete Realisierung der bisher eingeführten Konzepte in verspanntem HgTe betrachtet. Dabei werden nur die Aspekte aufgegriffen, die für die späteren Transportmessungen und die Charakterisierung dieses Materials wichtig sind.

Bulk-HgTe besitzt aufgrund der invertierten Bandordnung zwar die richtige Ausgangssituation für einen starken topologischen Isolator, ist im unverspannten Zustand jedoch noch kein Isolator, da sich am Γ -Punkt die Γ_8 -Bänder berühren. Die Entwicklung von der normalen Bandordnung in CdTe zur invertierten Bandordnung in HgTe ist in Abbildung 2.7 zusammengefasst. Sie zeigt, dass die Bandinversion in HgTe bereits in der Bandstruktur sichtbar ist und die Grundlage für die späteren Oberflächenzustände bildet.

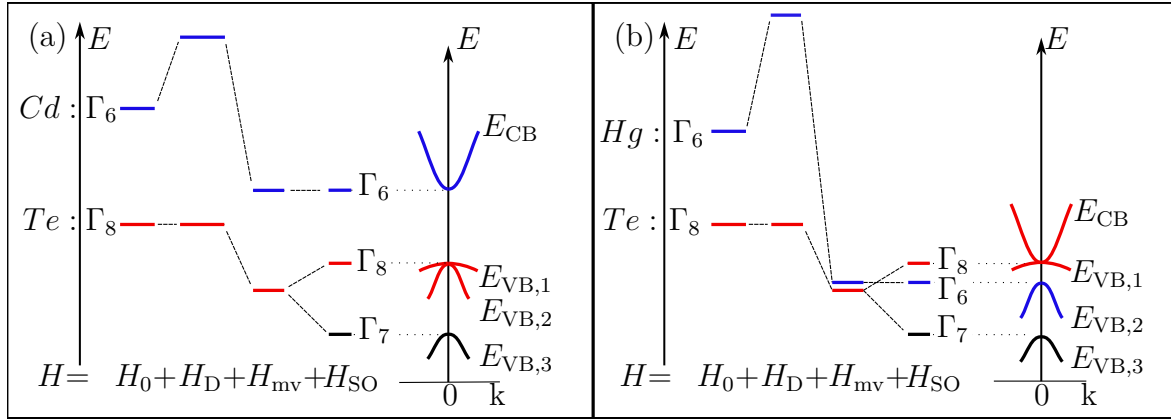


Abbildung 2.7.: Qualitative Entwicklung der Bandkanten in CdTe (a) und HgTe (b) unter sukzessiver Berücksichtigung der Beiträge zum Einteilchen-Hamiltonoperator nach [43], konsistent mit der späteren Beschreibung von HgTe/CdTe-Heterostrukturen in [44]. In den linken Teilbildern sind die Energieniveaus am Γ -Punkt als Funktion der Beiträge H_0 , H_D , H_{mv} und H_{SO} dargestellt. Ausgangspunkt ist in beiden Materialien eine normale Reihenfolge mit einem s -artigen Γ_6 -Zustand und einem p -artigen Γ_5 -Zustand. Durch die Spin-Bahn-Kopplung H_{SO} spaltet der p -artige Zustand in die Bänder Γ_8 und Γ_7 auf. In CdTe bleibt die normale Bandordnung erhalten, sodass Γ_6 oberhalb von Γ_8 liegt. In HgTe senkt insbesondere der Massengeschwindigkeitsterm H_{mv} das Hg-dominierte Γ_6 -Band so stark ab, dass es unter das Γ_8 -Band fällt, wobei es zur Bandinversion kommt. H_D ist der Darwin-Term, eine relativistische Potentialkorrektur, die besonders s -artige Zustände wie Γ_6 beeinflusst. Die rechten Teilbilder in (a) und (b) zeigen die daraus resultierenden Dispersionen nahe dem Γ -Punkt: CdTe besitzt eine normale Bandstruktur mit Γ_6 als Leitungsbandkante und Γ_8 als Valenzbandkante, während in HgTe die invertierte Reihenfolge vorliegt und die Γ_8 -Zustände die obere Bandkante bilden.

Erst die epitaktische Zugverspannung auf einem CdTe-Substrat hebt diese Entartung auf und öffnet eine Bulk-Bandlücke von typischerweise etwa 15 meV [16, 45]. Daraus folgt ein Regime mit isolierendem Bulk und leitfähigen Oberflächenzuständen, das experimentell tatsächlich zugänglich ist [15, 16]. Die durch die Verspannung hervorgerufene Aufspaltung der Γ_8 -Zustände und die daraus entstehende Bulk-Bandlücke sind in Abbildung 2.9 dargestellt.

Der allgemeine Zusammenhang zwischen Bulk und Rand aus den vorherigen Abschnitten wird in HgTe damit konkret durch zwei leitfähige Oberflächen eines Bulks mit

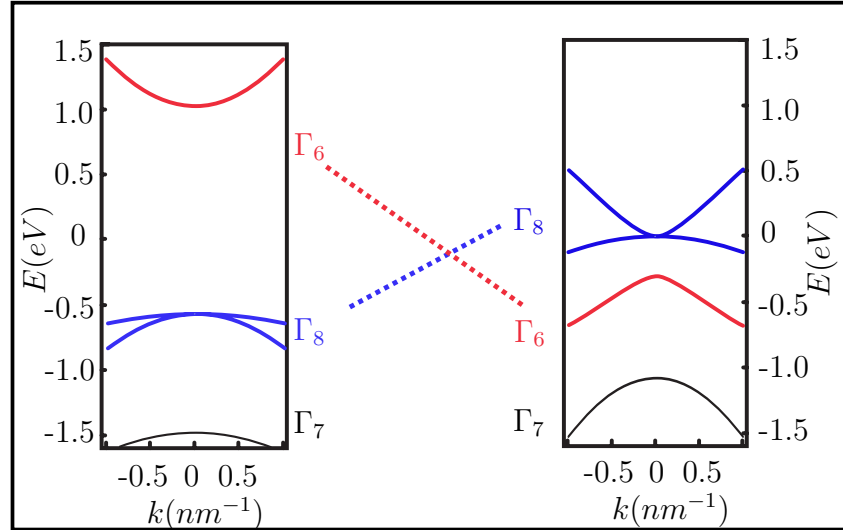


Abbildung 2.8.: Veranschaulichung der Bandstruktur von CdTe (links) und HgTe (rechts) sowie ihrer topologischen Verbindung an einer Grenzfläche (Mitte). In CdTe liegt die normale Bandreihenfolge vor, Γ_6 -Zustände (rot) bilden die Leitungsbandkante, während Γ_8 -Zustände (blau) die Valenzbandkante bilden und Γ_7 -Zustände (schwarz) tief im Valenzband liegen. In HgTe ist die Reihenfolge für Γ_8 -Zustände und Γ_6 -Zustände invertiert. Die gestrichelten Verbindungslinien in der Mitte veranschaulichen, dass sich die Bänder an der Grenzfläche aufgrund der vertauschten Reihenfolge nicht ohne Kreuzung kontinuierlich verbinden lassen. Daraus folgt die Existenz grenzflächenlokalisierter, leitfähiger Zustände, die die Bulk-Bandlücke durchqueren und eine direkte Konsequenz der Bandinversion sind.

endlicher Bandlücke realisiert. In Abbildung 2.8 ist skizziert, dass die invertierte Bandfolge an einer Grenzfläche nicht ohne Bandkreuzung in die normale Bandfolge eines trivialen Materials überführt werden kann. Genau aus diesem Grund entstehen an der Grenzfläche topologische Oberflächenzustände.

In der 80 nm-Schicht sind die obere und untere Oberfläche weit genug voneinander getrennt, sodass ihre Zustände im Wesentlichen als zwei unabhängige Dirac-Systeme behandelt werden können. Wegen der unterschiedlichen Grenzflächen sind beide Oberflächen jedoch nicht völlig äquivalent. Für die spätere Auswertung ist besonders wichtig, dass ein Top-Gate vor allem an die obere Oberfläche koppelt, während die untere Oberfläche deutlich schwächer mitgesteuert wird [16, 24]. Für den Transport entscheidend ist außerdem die Lage des Dirac-Punkts relativ zu den Bulk-Bändern. In verspanntem undotiertem HgTe liegt er unterhalb der Valenzbandkante [16, 17]. Wird das Fermi-Niveau aus der Bulk-Bandlücke in das Valenzband abgesenkt, verschwinden die Dirac-Oberflächenzustände daher nicht, sondern koexistieren mit Bulk-Löchern. Oberhalb der Leitungsbandkante tritt analog eine Koexistenz mit Bulk-Elektronen auf. Nur innerhalb der Bulk-Bandlücke tragen ausschließlich die Oberflächenzustände zum Transport bei. Die in Abbildung 2.1 gezeigten drei Gruppen von Zuständen und ihre Beiträge zur Zustandsdichte prägen somit das Transportverhalten des HgTe-basierten 3D-TI [16, 24, 46]. Für die spätere Auswertung bedeutet das vor allem, dass Magnetotransportdaten und Gate-Abhängigkeiten nicht isoliert interpretiert werden können, sondern immer auch im Hinblick auf mögliche parallele Leitungskanäle betrachtet werden sollten.

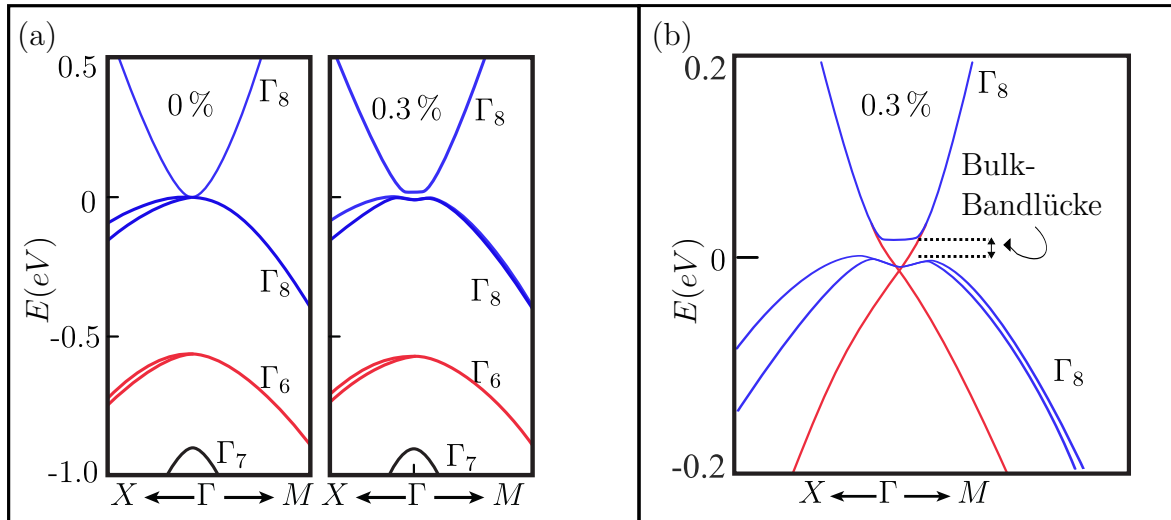


Abbildung 2.9.: Darstellung der Wirkung der epitaktischen Verspannung auf die Bandstruktur von HgTe. In (a) ist eine Gegenüberstellung der Situation ohne Verspannung gezeigt, in der die invertierten Γ_8 -Zustände (blau) am Γ -Punkt noch entartet sind, und der Situation mit einer Verspannung von 0.3%. Die biaxiale Zugverspannung auf CdTe führt zur Aufspaltung dieser Zustände und damit zur Öffnung einer endlichen Bulk-Bandlücke. Γ_6 -Zustände (rot) und Γ_7 -Zustände (schwarz) sind ebenfalls dargestellt. In (b) sind die zusätzlichen Oberflächenzustände rot dargestellt. Diese durchqueren die Bandlücke der Γ_8 -Zustände. Nach [45].

2.4. Bezug zur vorliegenden Arbeit

Für die vorliegende Arbeit ist aus den vorhergehenden Abschnitten vor allem relevant, dass im verspannten HgTe je nach Lage des Fermi-Niveaus Beiträge von Oberflächenzuständen und Bulk-Kanälen zum Magnetotransport auftreten. Durch eine eindimensionale laterale Modulation kommt zu dieser Gate-Abhängigkeit eine weitere Skala hinzu. Im Folgenden wird daher untersucht, wie sich diese Beiträge im Magnetotransport trennen und den beobachteten Signaturen zuordnen lassen.

3. Grundlagen des Magnetotransports

Dieses Kapitel führt in die grundlegenden Konzepte des Magnetotransports ein, die für die spätere Interpretation der Messdaten benötigt werden. Magnetotransportmessungen beruhen darauf, dass elektrische und magnetische Felder die Bewegung von Ladungsträgern über die Lorentz-Kraft koppeln. Schon im klassischen Drude-Bild folgen daraus Hall-Spannung, Magnetowiderstand und charakteristische Feldskalen, an denen die Zyklotronbewegung für den Transport relevant wird. Für die später untersuchten HgTe-basierten Systeme bildet diese Beschreibung den Ausgangspunkt. Bei höheren Magnetfeldern müssen zusätzlich Landau-Quantisierung, Shubnikov-de-Haas-Oszillationen und der Quanten-Hall-Effekt berücksichtigt werden.

3.1. Klassische Elektrodynamik und Drude-Theorie

Die Bewegung eines geladenen Teilchens in elektromagnetischen Feldern wird durch die Lorentz-Kraft beschrieben [47–49],

$$\mathbf{F} = q(\mathbf{E} + \mathbf{v} \times \mathbf{B}), \quad (3.1)$$

mit der Ladung q , dem elektrischen Feld $\mathbf{E}$ und dem Magnetfeld $\mathbf{B}$. In einem senkrecht zur Probenebene angelegten Magnetfeld $\mathbf{B} = B\hat{z}$ bewegen sich Ladungsträger auf Zyklotronbahnen mit der Frequenz $\omega_c = eB/m^*$, wobei m^* die effektive Masse bezeichnet. Eine einfache Beschreibung des diffusen Transports liefert das Drude-Modell, in dem Leitungselektronen zwischen zwei Streuereignissen frei beschleunigt werden [50, 51]. Mit der Streuzeit τ ergibt sich für die Leitfähigkeit

$$\sigma_0 = \frac{n_s e^2 \tau}{m^*}, \quad (3.2)$$

und für die Beweglichkeit

$$\mu = \frac{e\tau}{m^*}. \quad (3.3)$$

Aus diesen Größen folgt die mittlere freie Weglänge

$$l_e = v_F \tau, \quad (3.4)$$

wobei n_s die zweidimensionale Ladungsträgerdichte und v_F die Fermi-Geschwindigkeit bezeichnet.

3.2. Hall-Effekt und Magnetowiderstand

Wird durch einen zweidimensionalen Leiter ein Strom geleitet und zugleich ein senkrechtes Magnetfeld angelegt, so werden die Ladungsträger durch die Lorentz-Kraft quer zur Stromrichtung abgelenkt. Dadurch entsteht eine transversale Spannung. Im stationären Fall ergibt sich aus dem Drude-Modell der Leitfähigkeitstensor für einen einzelnen Leitungskanal [19]:

$$\hat{\sigma} = \frac{\sigma_0}{1 + (\omega_c \tau)^2} \begin{pmatrix} 1 & \omega_c \tau \\ -\omega_c \tau & 1 \end{pmatrix}. \quad (3.5)$$

Durch Inversion erhält man den Widerstandstensor

$$\hat{\rho} = \hat{\sigma}^{-1} = \frac{1}{n_s e} \begin{pmatrix} 1/\mu & -B \\ B & 1/\mu \end{pmatrix}. \quad (3.6)$$

Damit folgt

$$\rho_{xx} = \frac{1}{n_s e \mu}, \quad \rho_{xy} = -\frac{B}{n_s e}. \quad (3.7)$$

Im einfachen Drude-Bild ist ρ_{xx} damit feldunabhängig, während ρ_{xy} betragsmäßig linear mit dem Magnetfeld anwächst.

Übertragung auf den HgTe-basierten 3D-TI

In verspanntem HgTe kann der Transport über mehrere parallele Kanäle erfolgen, insbesondere über obere und untere Oberfläche sowie, abhängig von der Lage des chemischen Potentials, zusätzlich über Volumenzustände. In diesem Fall addieren sich die Leitfähigkeitsbeiträge der einzelnen Kanäle (i),

$$\hat{\sigma}^{\text{total}} = \sum_i \hat{\sigma}^{(i)}. \quad (3.8)$$

Die einfache Ein-Kanal-Auswertung ist dann nur noch näherungsweise anwendbar. Die daraus folgende Erweiterung zum Zwei-Träger-Drude-Modell wird in Abschnitt 5.4 behandelt.

Die Drude-Beschreibung bildet damit den Ausgangspunkt für die spätere Analyse des Magnetotransports. Bei größeren Magnetfeldern wird die Landau-Quantisierung relevant. Eine erste Abschätzung des Übergangs in den Hochfeldbereich liefert die Bedingung $\omega_c \tau = \mu B \gtrsim 1$. Für die hier verwendeten hochbeweglichen Proben mit Beweglichkeiten von einigen $10^5 \text{ cm}^2/(\text{V s})$ liegt diese Feldskala bereits bei einigen 10 bis 100 mT. Entsprechend können quantisierungsbedingte Oszillationsphänomene wie insbesondere Shubnikov-de-Haas-Oszillationen, abhängig von Temperatur, Streuung und Lage der Fermi-Energie, bereits bei vergleichsweise kleinen Magnetfeldern beobachtet werden.

3.3. Landau-Quantisierung

Die vollständige quantenmechanische Beschreibung geladener Teilchen im Magnetfeld geht vom Hamilton-Operator mit minimaler Kopplung aus [19, 52]:

$$H = \frac{1}{2m^*}(\mathbf{p} + e\mathbf{A})^2, \quad (3.9)$$

wobei $\mathbf{A}$ das Vektorpotential mit $\nabla \times \mathbf{A} = \mathbf{B}$ ist. In der Landau-Eichung $\mathbf{A} = (-By, 0, 0)$ für $\mathbf{B} = B\hat{z}$ separiert der Hamilton-Operator in eine freie Bewegung entlang der x -Richtung und in einen harmonischen Oszillator in y -Richtung. Die Wellenfunktionen haben die Form

$$\psi_{n,k_x}(x, y) = \frac{1}{\sqrt{L_x}} e^{ik_x x} \varphi_n(y - y_0), \quad (3.10)$$

wobei φ_n die Hermite-Funktionen des harmonischen Oszillators bezeichnen und das Zentrum der Wellenfunktion $y_0 = -\hbar k_x / (eB) = -l_B^2 k_x$ durch den Wellenvektor k_x bestimmt wird. Die magnetische Länge $l_B = \sqrt{\hbar / (eB)}$ setzt die fundamentale Längenskala im Magnetfeld und beträgt beispielsweise $l_B \approx 257 \text{ nm}$ bei $B = 10 \text{ mT}$ und $l_B \approx 81 \text{ nm}$ bei $B = 100 \text{ mT}$.

Das resultierende Energiespektrum für die Landau-Niveaus ist für eine parabolische Dispersion äquidistant [19, 52]:

$$E_n = \hbar\omega_c \left(n + \frac{1}{2} \right), \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (3.11)$$

Jedes Landau-Niveau besitzt ohne Berücksichtigung des Spins eine orbitale Entartung von $N_B^{(0)} = eB/h$ pro Flächeneinheit. Unter Berücksichtigung der Spin-Entartung ergibt sich $N_B = g_s eB/h$, wobei g_s vom betrachteten System abhängt. Für ein konventionelles 2DEG ohne Zeeman-Aufspaltung gilt $g_s = 2$, während für die spinaufgelösten Oberflächenzustände eines topologischen Isolators aufgrund der helikalen Spin-Impuls-Kopplung $g_s = 1$ pro Oberfläche gilt. Diese Unterscheidung ist später sowohl für die Definition des Füllfaktors (Abschnitt 3.3.1) als auch für die Interpretation der SdH-Frequenzen (Abschnitt 3.4) relevant. Im idealen Fall sind die Landau-Niveaus scharf definiert, und die Zustandsdichte besteht aus einer Folge von δ -Funktionen bei den Energien E_n . In realen Proben werden diese Niveaus durch Streuung jedoch verbreitert. Wie ausgeprägt diese Verbreiterung ist, hängt von der Streuung beziehungsweise von der endlichen Lebensdauer der Zustände ab und ist damit auch ein Maß für die Probenqualität. Experimentell lassen sich die einzelnen Landau-Niveaus deshalb erst dann gut auflösen, wenn ihr Abstand groß genug gegenüber dieser Verbreiterung ist [19, 52].

3.3.1. Landau-Niveaus in zweidimensionalen Systemen

In einem zweidimensionalen System mit fester Ladungsträgerdichte n_s ordnen sich die Elektronen in einer endlichen Anzahl von Landau-Niveaus an. Der Füllfaktor

$$\nu = \frac{n_s}{N_B} = \frac{n_s \hbar}{g_s eB} \quad (3.12)$$

gibt die Anzahl der besetzten Niveaus an, wobei g_s die Spin-Entartung des betrachteten Systems ist. Ganzzahlige Werte von ν entsprechen Situationen, in denen die

Fermi-Energie in der Lücke zwischen zwei benachbarten Niveaus liegt. Dies bildet die Grundlage für den Quanten-Hall-Effekt, der in Abschnitt 3.5 behandelt wird.

Entscheidend ist die reziproke Abhängigkeit $\nu \propto 1/B$: Bei festem n_s nimmt die Entartung jedes Niveaus mit steigendem Magnetfeld zu, sodass sich die Elektronen auf immer weniger Landau-Niveaus verteilen. Beim Durchfahren des Magnetfelds schneidet die Fermi-Energie daher periodisch die einzelnen Niveaus, was zu den in Abschnitt 3.4 behandelten Shubnikov-de-Haas-Oszillationen führt [19, 52].

3.4. Shubnikov-de-Haas-Oszillationen

Shubnikov-de-Haas-Oszillationen treten bei tiefen Temperaturen und hinreichend großen Magnetfeldern als periodische Modulationen des longitudinalen Widerstands $\rho_{xx}(B)$ auf [53]. Die Fermi-Energie E_F folgt dabei zunächst dem jeweils obersten besetzten Landau-Niveau. Sind bei weiterer Magnetfelderhöhung in den darunterliegenden Niveaus genügend Zustände vorhanden, um dieses Niveau vollständig zu entleeren, springt E_F , wie in Abbildung 3.1(a) gezeigt, in das nächstniedrigere Landau-Niveau. Diese Sprünge erfolgen periodisch in $1/B$ und führen zu Oszillationen im Längswiderstand (siehe Abbildung 3.1(b)).

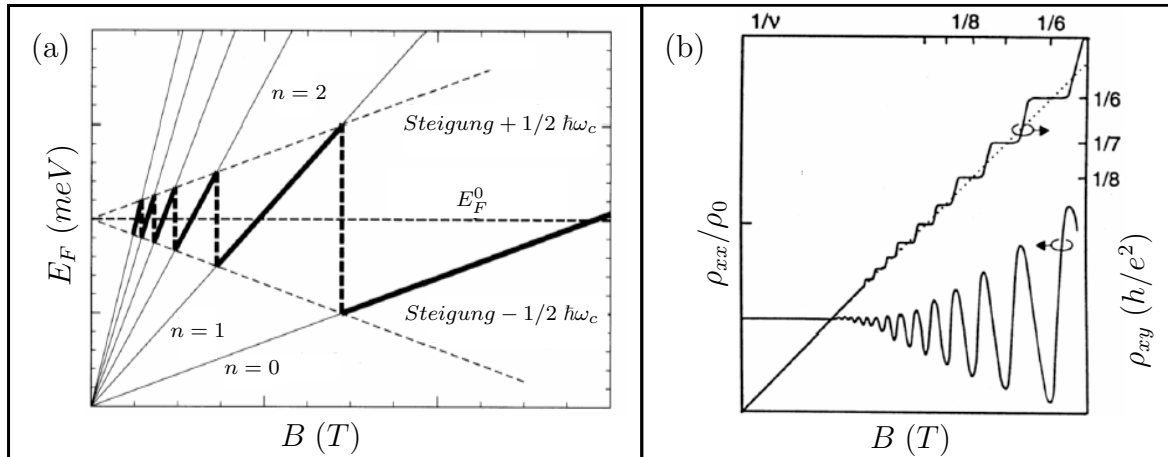


Abbildung 3.1.: (a) Darstellung eines Landau-Fächers, der in Abhängigkeit von Fermi-Energie und angelegtem Magnetfeld die sukzessive Besetzung der landau-quantisierten Zustände zeigt. Mit steigendem Magnetfeld nimmt die Entartung der Landau-Niveaus zu, wodurch sich die Besetzung ändert und Oszillationen der Zustandsdichte am Fermi-Niveau entstehen. (b) Darstellung der Shubnikov-de-Haas-Oszillationen in einem zweidimensionalen Elektronengas. Die Messung zeigt periodische Oszillationen im longitudinalen Widerstand $\rho_{xx}(B)$ sowie quantisierte Plateaus im Hallwiderstand. Aus [54].

Liegt die Fermi-Energie auf einem Landau-Niveau, ist die Zustandsdichte am Fermi-Niveau groß und ρ_{xx} zeigt ein Maximum. Zwischen zwei Landau-Niveaus ist die Zustandsdichte am Fermi-Niveau reduziert, sodass ein Minimum im Längswiderstand auftritt. Die Shubnikov-de-Haas-Oszillationen sind daher $1/B$ -periodisch. Aus der Periodizität zweier aufeinanderfolgender Minima bei B_1 und B_2 lässt sich die Ladungsträgerdichte direkt bestimmen [34, 53, 55]:

$$\Delta\left(\frac{1}{B}\right) = \frac{1}{B_2} - \frac{1}{B_1} = \frac{g_s e}{h n_s}, \quad (3.13)$$

beziehungsweise

$$n_s = \frac{g_s e}{h \Delta(1/B)}. \quad (3.14)$$

Für die spätere Auswertung ist diese Darstellung besonders praktisch, da sie die Ladungsträgerdichte unmittelbar mit der experimentell zugänglichen $1/B$ -Periodizität verknüpft. Äquivalent lässt sich die Oszillationsfrequenz auch über die von der Zyklotronbahn eingeschlossene Fläche im $\mathbf{k}$ -Raum ausdrücken. Mit der Onsager-Relation folgt [55, 56]:

$$f_{\text{sdH}} = \frac{1}{\Delta(1/B)} = \frac{\hbar}{2\pi e} S_F, \quad (3.15)$$

wobei S_F die Querschnittsfläche der Fermi-Fläche senkrecht zum Magnetfeld bezeichnet.

Für ein zweidimensionales System mit kreisförmiger Fermi-Fläche gilt $S_F = \pi k_F^2$. Damit ergibt sich

$$f_{\text{sdH}} = \frac{\hbar k_F^2}{2e}. \quad (3.16)$$

Mit

$$n_s = \frac{g_s k_F^2}{4\pi} \quad (3.17)$$

folgt schließlich

$$f_{\text{sdH}} = \frac{\hbar n_s}{g_s e}. \quad (3.18)$$

Übertragung auf den HgTe-basierten 3D-TI

Da die Oszillationen nicht periodisch in B , sondern in $1/B$ auftreten, überlagern sich in Mehrkanalsystemen wie dem hier untersuchten verspannten HgTe die Beiträge mehrerer Landau-Fächer, was in Abbildung 3.2 für den Fall eines 3D-topologischen Isolators schematisch dargestellt ist. Im Fourier-Spektrum erscheinen entsprechend mehrere charakteristische Frequenzen, deren Amplituden und Gate-Abhängigkeiten eine Zuordnung zu den jeweiligen Transportkanälen ermöglichen.

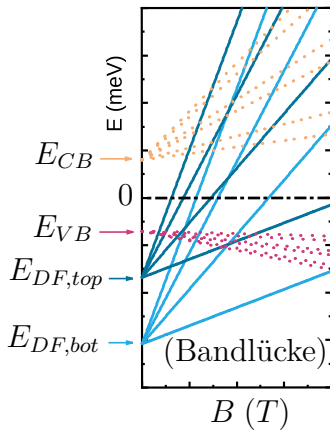


Abbildung 3.2.: Landau-Fächer-Modell eines 3D-topologischen Isolators für eine Fermi-Energie innerhalb der Bulk-Bandlücke. Die spinentarteten Bulk-Zustände des Leitungsbandes sind orange gepunktet, diejenigen des Valenzbandes rot gepunktet dargestellt. Die Landau-Fächer der oberen beziehungsweise unteren Oberfläche sind in dunkel- bzw. hellblau gekennzeichnet. In der Bandlücke sind nur die Oberflächenzustände besetzt. Aus [46].

Auf die Beiträge der verschiedenen Transportkanäle wird im Ergebnisteil systematisch eingegangen.

3.4.1. Lifshitz-Kosevich-Formel

Die Amplitude der Shubnikov-de-Haas-Oszillationen wird im Wesentlichen durch Temperatur, Streuung und gegebenenfalls eine Spinaufspaltung bestimmt. Zur Einordnung dieser Abhängigkeiten kann die Lifshitz-Kosevich-Formel in der Form [55, 56]

$$\frac{\Delta\rho_{xx}}{\rho_0} \propto \sum_{p=1}^{\infty} R_T(p) R_D(p) R_S(p) \cos \left[2\pi p \left(\frac{f_{\text{SdH}}}{B} - \gamma \right) \right] \quad (3.19)$$

verwendet werden. Dabei beschreibt R_T die thermische Dämpfung, R_D die Streuverbreiterung der Landau-Niveaus und R_S eine mögliche Zeeman-Aufspaltung. Für die vorliegende Arbeit ist vor allem wichtig, dass sich aus der Feldabhängigkeit über den Dingle-Faktor R_D Rückschlüsse auf die Quantenstreuzeit ziehen lassen. Für die Grundschwingung mit $p = 1$ folgt:

$$R_D = \exp \left(-\frac{\pi}{\omega_c \tau_q} \right) = \exp \left(-\frac{\pi m^*}{eB\tau_q} \right). \quad (3.20)$$

Wird die Quantenstreuzeit τ_q kleiner, vergrößert sich der Betrag des negativen Exponenten im Dingle-Faktor, sodass R_D abnimmt. Dementsprechend werden die SdH-Oszillationen stärker gedämpft und schlechter aufgelöst. Auf die weiteren Abhängigkeiten der Lifshitz-Kosevich-Formel wird hier nicht näher eingegangen. Ein möglicher Phasenoffset γ kann bei Dirac-artigen Zuständen gegenüber dem konventionellen Fall verschoben sein. Für topologische Oberflächenzustände steht dies mit der bereits zuvor diskutierten Berry-Phase von π in Zusammenhang und wird von Taskin und Ando in der Veröffentlichung [57] behandelt.

3.4.2. Abgrenzung zum Quanten-Hall-Effekt

Shubnikov-de-Haas-Oszillationen und Quanten-Hall-Effekt beruhen auf derselben physikalischen Grundlage, nämlich der Landau-Quantisierung, treten experimentell jedoch in unterschiedlichen Feldbereichen und Transportgrößen in Erscheinung. Im SdH-Regime bei moderaten Magnetfeldern mit $\omega_c \tau \gtrsim 1$ zeigt sich die Quantisierung zunächst als Oszillation des longitudinalen Widerstands ρ_{xx} , die auf der periodischen Modulation der Zustandsdichte am Fermi-Niveau beruht, während ρ_{xy} im Wesentlichen monoton ansteigt. Im QHE-Regime bei stärkeren Feldern, also für $\omega_c \tau \gg 1$, werden die Landau-Niveaus so deutlich aufgelöst, dass bei ganzzahligem Füllfaktor ν der longitudinale Widerstand gegen null geht und der Hall-Widerstand quantisierte Plateaus ausbildet. Der Übergang zwischen beiden Regimen ist dabei fließend und wird im Wesentlichen durch die Störstellenverbreiterung Γ relativ zum Landau-Niveau-Abstand $\hbar\omega_c$ bestimmt. In der Arbeit von Ziegler et al. [18] wurden diese Bereiche für den HgTe-3D-TI besonders deutlich anhand von Magnetotransportmessungen herausgearbeitet, die sowohl gut aufgelöste Shubnikov-de-Haas-Oszillationen als auch den Quanten-Hall-Effekt zeigen.

3.5. Quanten-Hall-Effekt

Ganzzahliger Quanten-Hall-Effekt

Der ganzzahlige Quanten-Hall-Effekt ist durch Hall-Plateaus bei den quantisierten Widerstandswerten

$$\rho_{xy} = \frac{h}{\nu e^2}, \quad \nu = 1, 2, 3, \dots \quad (3.21)$$

sowie durch das gleichzeitige Verschwinden des longitudinalen Widerstands ρ_{xx} innerhalb der Plateaubereiche charakterisiert [34, 58]. Dabei ergeben sich die Widerstandskomponenten aus der Inversion des Leitfähigkeitstensors. Für isotrope Systeme gilt $\sigma_{xx} = \sigma_{yy}$ und $\sigma_{xy} = -\sigma_{yx}$, sodass im Grenzfall verschwindender longitudinaler Leitfähigkeit unmittelbar die quantisierten Hall-Widerstände folgen.

$$\rho_{xy} = \frac{\sigma_{xy}}{\sigma_{xy}^2 + \sigma_{xx}^2} \xrightarrow{\sigma_{xx} \rightarrow 0} \frac{1}{\sigma_{xy}} = \frac{h}{\nu e^2}. \quad (3.22)$$

Übertragung auf den HgTe-basierten 3D-TI

In verspanntem HgTe tragen im Experiment obere und untere Oberfläche gemeinsam zum Transport bei. Sind beide Oberflächen gleich besetzt, ergibt sich daher zunächst eine ganzzahlige Sequenz der beobachteten Hall-Leitfähigkeit [15]. Werden die beiden Oberflächen unterschiedlich stark befüllt, können sich die zugehörigen Landau-Fächer gegeneinander verschieben, sodass Füllfaktoren zwischen den idealen ganzzahligen Sequenzen auftreten können [16, 59]. Magnetotransportmessungen aus [46] zeigen, wie sich der Quanten-Hall-Effekt in den zugänglichen Regimen des verspannten HgTe mit der Gate-Spannung und damit mit der Lage der Fermi-Energie verändert (siehe Abbildung 3.3).

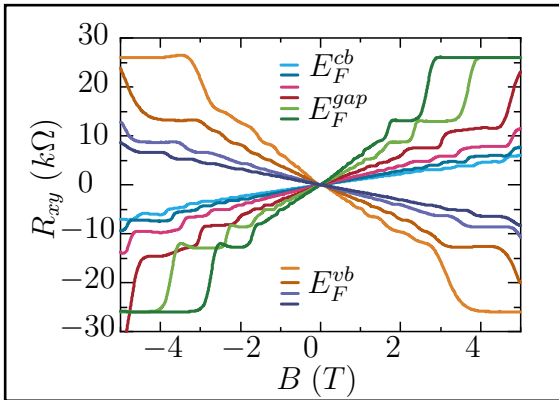


Abbildung 3.3.: Quanten-Hall-Effekt in verspanntem, 80 nm-HgTe in verschiedenen Regimen der Bandstruktur. Je nach Lage der Fermi-Energie wird der Transport in der Bulk-Bandlücke von Oberflächenelktro-nen, im Leitungsband zusätzlich von Bulk-Elektronen und im Valenzband von Bulk-Löchern getragen. Dies äußert sich in einer Hall-Steigung, die sich beim Durchfahren der Fermi-Energie über den Ladungsneutralitäts-punkt in Vorzeichen und Verlauf verändert. Aus [46].

4. Kommensurabilitätsoszillationen

Neben den zuvor diskutierten SdH-Oszillationen treten in lateral modulierten zweidimensionalen Systemen bei kleineren Magnetfeldern zusätzliche Magnetowiderstandsozillationen auf. Sie werden als Kommensurabilitäts- oder Weiss-Oszillationen (WOs) bezeichnet [60]. Beobachtet wurden sie zunächst an konventionellen 2DEGs mit schwacher periodischer Potentialmodulation [60–63]. Im semiklassischen Regime lassen sie sich über die Kommensurabilität zwischen Zyklotronradius und Modulationsperiode verstehen. Verwandte Oszillationen wurden auch in zweidimensionalen Systemen mit periodisch moduliertem Magnetfeld beobachtet [64]. Ausgangspunkt ist die Kommensurabilität zwischen der Gitterperiode a und dem Zyklotronradius R_c der Ladungsträger. Für ein senkrecht zur Ebene angelegtes Magnetfeld gilt am Fermineau

$$R_c = \frac{\hbar k_F}{eB}. \quad (4.1)$$

Hierbei bezeichnet k_F den Fermi-Wellenvektor. Die Oszillationen entstehen, weil sich die Kommensurabilität zwischen dem Zyklotronbahndurchmesser $2R_c$ und der Gitterperiode a mit dem Durchfahren des Magnetfelds periodisch ändert. Für eine schwache eindimensionale Modulation liegen die Widerstandsminima bei der sogenannten Flachbandbedingung, bei der die modulationsinduzierte Bandbreite verschwindet:

$$2R_c = \left(\lambda - \frac{1}{4}\right)a, \quad \lambda = 1, 2, 3, \dots \quad (4.2)$$

wobei λ den Oszillationsindex bezeichnet. Die Verschiebung um $-1/4$ ist charakteristisch für Weiss-Oszillationen. Ihr Ursprung wird in den folgenden Abschnitten vor allem im semiklassischen Bild diskutiert [20, 65–67]. Aus der Kommensurabilitätsbedingung folgen die Magnetfeldwerte für die Widerstandsminima:

$$B_\lambda = \frac{2\hbar k_F}{ea\left(\lambda - \frac{1}{4}\right)}. \quad (4.3)$$

Aufgetragen gegen $1/B$ sind diese Minima äquidistant mit der Periode:

$$\Delta\left(\frac{1}{B}\right) = \frac{ea}{2\hbar k_F}. \quad (4.4)$$

Eine alternative Beschreibung führt die $1/B$ -Periodizität der Weiss-Oszillationen auf die Differenz charakteristischer Flächen im $\mathbf{k}$ -Raum zurück [68]. Dabei ist $S_0 = \pi k_F^2$ die Fläche der ungestörten Fermibahn, während S_1 die Fläche der ersten durch Bragg-Reflexion am periodischen Potential entstehenden Linsenbahn bezeichnet. Im Folgen-

den wird jedoch die semiklassische Beschreibung über die Flachbandbedingung verwendet.

Die $1/B$ -Periodizität erlaubt es, aus der Oszillationsperiode direkt auf den Fermi-Wellenvektor k_F und damit auf die Ladungsträgerdichte über $n_s = g_s k_F^2 / (4\pi)$ zu schließen. Dasselbe gilt prinzipiell auch für Löcher, da die Kommensurabilitätsbedingung ebenfalls nur die Existenz geschlossener Zyklotronbahnen voraussetzt. Weiss-Oszillationen liefern damit einen direkten Zugang zur Dichte des jeweils beteiligten Transportkanals. Im Unterschied zu SdH-Oszillationen ist die relevante Skala hier durch das Zusammenspiel von Gitterperiode und Zyklotronradius bestimmt. Kommensurabilitätsoszillationen treten in einem Magnetfeldbereich auf, in dem die Landau-Quantisierung schon auftreten kann, jedoch das Transportverhalten noch nicht vollständig dominiert. Im Folgenden wird kurz darauf eingegangen, wie sich dieser Überlapp physikalisch verstehen lässt.

In hochbeweglichen zweidimensionalen Elektronensystemen kann die Transportstreuzeit τ_{tr} deutlich größer als die Quantenstreuzeit τ_q sein, wenn kleinwinklige Streuprozesse dominieren [69]. Deshalb müssen SdH- und Kommensurabilitätsoszillationen nicht im gleichen Magnetfeldbereich gleich gut sichtbar sein. Insbesondere können SdH-Oszillationen bei kleinen Magnetfeldern bereits stark gedämpft sein, während Kommensurabilitätsoszillationen noch erhalten bleiben [19, 66].

4.1. Landau-Bandbreite

Zur Beschreibung von Kommensurabilitätsoszillationen existieren sowohl quantenmechanische als auch semiklassische Zugänge [65, 67, 70].

In der quantenmechanischen Beschreibung hebt das periodische Potential die Entartung der Landau-Niveaus auf und führt zu verbreiterten Landau-Bändern [65, 67]. Ist die Flachbandbedingung 4.2 erfüllt, verschwindet die modulationsinduzierte Landau-Bandbreite. Daher stammt die Bezeichnung Flachbandbedingung. Der semiklassische Zugang führt über die Kommensurabilität von Zyklotronradius und Gitterperiode ebenfalls auf dieselbe Flachbandbedingung. Mathematisch äußert sich dieser Zusammenhang darin, dass in der quantenmechanischen Beschreibung Laguerre-Polynome auftreten, während im semiklassischen Bild Bessel-Funktionen erscheinen. Für die vorliegende Arbeit ist vor allem der semiklassische Zugang hilfreich, da er die physikalische Bedeutung der Oszillationen besonders anschaulich macht und sich zugleich leichter auf den später relevanten Fall dreidimensionaler topologischer Isolatoren übertragen lässt. Im Folgenden wird daher zunächst der Fall parabolischer Bänder betrachtet und anschließend auf Dirac-artige Oberflächenzustände übertragen. Je nach Lage des Fermi-Niveaus können in verspanntem HgTe beide Typen von Zuständen zum Magnetotransport beitragen.

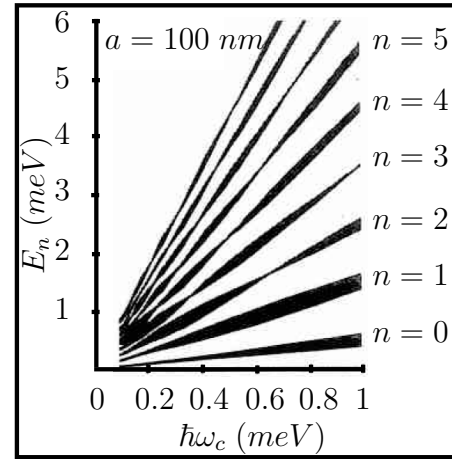


Abbildung 4.1.: Die Flachbandbedingung beschreibt den Zustand, in dem die Landau-Bandbreite verschwindet. Sie führt zu Knoten in den Landaubändern. Aus [20].

4.1.1. Semiklassische Beschreibung: Guiding-Center-Drift

Im Magnetfeld bewegt sich das Elektron auf einer Zyklotronbahn um sein Orbitzentrum (X_0, Y_0) mit

$$x(t) = X_0 + R_c \cos(\omega_c t + \phi_0), \quad y(t) = Y_0 - R_c \sin(\omega_c t + \phi_0). \quad (4.5)$$

Für ein eindimensionales Modulationspotential $V(x) = V_0 \cos(2\pi x/a)$ ergibt sich daraus ein Drift des Guiding-Centers in y -Richtung. Der geometrische Zusammenhang zwischen Zyklotronbahn, Orbitzentrum, Umkehrpunkten und lokalem elektrischem Feld des Modulationspotentials ist in Abbildung 4.2 schematisch dargestellt. Dieser resultierende Drift entspricht dem $\mathbf{E} \times \mathbf{B}$ -Drift im lokalen elektrischen Feld des Modulationspotentials. [20, 71, 72]

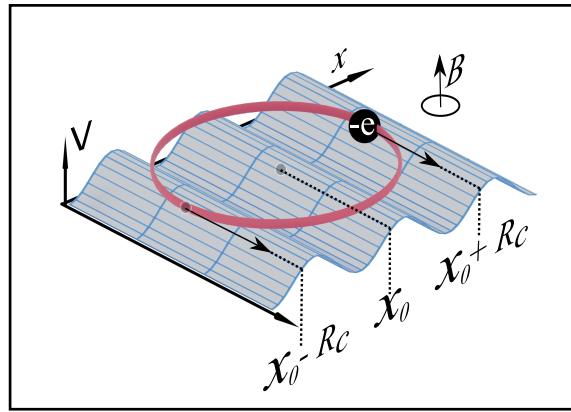


Abbildung 4.2.: Darstellung einer Zyklotronbahn in einem eindimensionalen periodischen Potential [24]. Die Modulation verläuft entlang der x -Richtung, die Streifenrichtung entspricht der y -Richtung, und das Magnetfeld B zeigt senkrecht zur Probenebene. Das Elektron bewegt sich auf einer Zyklotronbahn um das Orbitzentrum X_0 . An den Umkehrpunkten $X_0 - R_c$ und $X_0 + R_c$ wird der Potentialgradient und damit das lokale elektrische Feld des Modulationspotentials abgetastet. Die Richtung und Stärke der zeitlich gemittelten Drift hängen von der Lage des Orbitzentrums ab. Dadurch ist festgelegt, welche Werte des elektrischen Feldes an den Umkehrpunkten $X_0 - R_c$ und $X_0 + R_c$ und damit entlang der gesamten Zyklotronbahn abgetastet werden. Wird die Flachbandbedingung erfüllt, verschwinden die Mittelwerte der Drifts für alle möglichen Orbitzentren, sodass die Elektronen keinen bandleitenden Beitrag zum Transport entlang der Modulationsstreifen leisten können. [20, 66, 72]

Da für ein Feld E_x die Driftgeschwindigkeit $v_y = -E_x/B$ ist und zugleich $F_x = -\partial V/\partial x = -eE_x$ gilt, erhält man

$$v_{d,y} = -\frac{1}{eB} \frac{\partial V}{\partial x} \bigg|_{x=x(t)}, \quad (4.6)$$

also

$$v_{d,y}(t) = \frac{2\pi V_0}{eBa} \sin \left[\frac{2\pi}{a} (X_0 + R_c \cos(\omega_c t + \phi_0)) \right]. \quad (4.7)$$

Nach Mittelung über eine Zyklotronperiode ergibt sich für die Driftgeschwindigkeit des

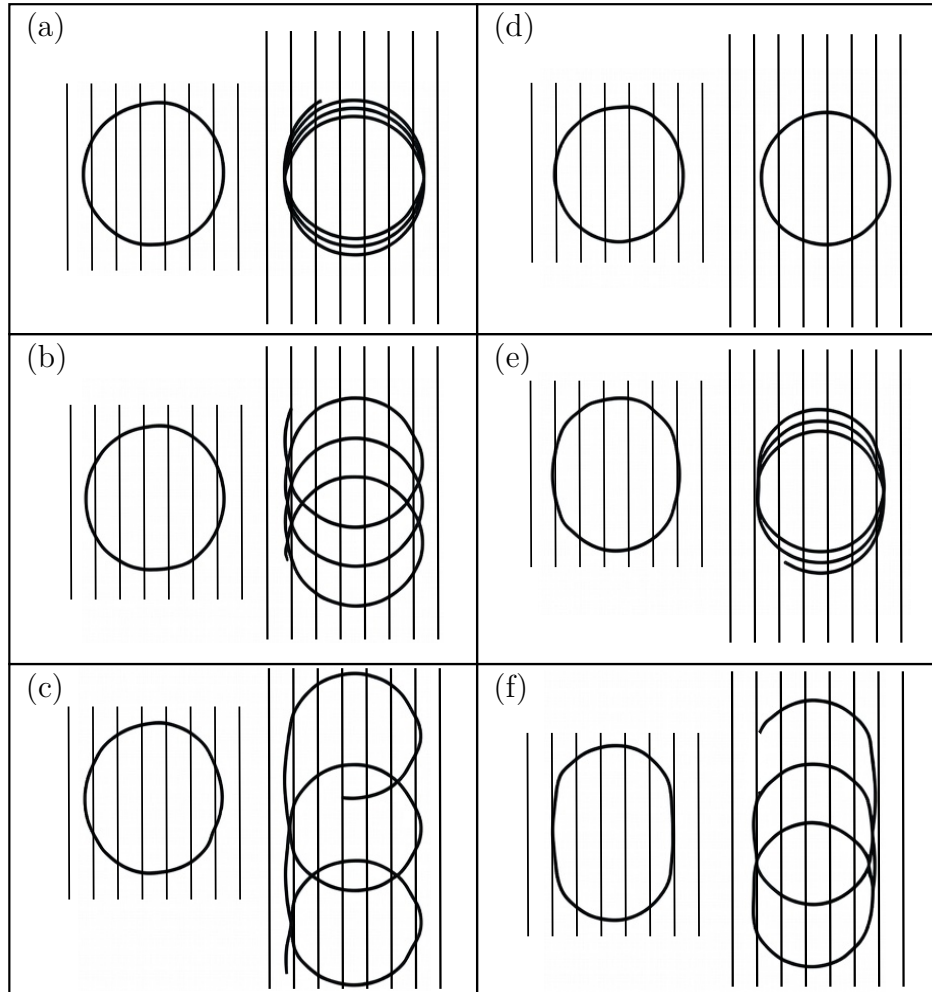


Abbildung 4.3.: Semiklassische Trajektorien in einem eindimensional modulierten zweidimensionalen Elektronensystem nach [72, 73]. Die Teilbilder (a, b, c) und (d, e, f) zeigen zwei verschiedene Magnetfelder und damit zwei Verhältnisse von Zyklotronbahndurchmesser zu Gitterperiode, $2R_c/a = 6.25$ beziehungsweise $2R_c/a = 5.75$. Innerhalb jeder Spalte nimmt die Modulationsstärke von oben nach unten zu. Die vertikalen Linien kennzeichnen das periodische Modulationspotential mit Gitterperiode a . Die beiden in jedem Teilbild gezeigten Bahnen unterscheiden sich nur durch die Lage des Orbitzentrums X_0 . Entscheidend für die zeitlich gemittelte Drift ist der Potentialgradient an den Umkehrpunkten $x = X_0 \pm R_c$. Je nach Zentrumscoordinate können Bahnen bei gegebenem Magnetfeld in positive oder negative y -Richtung driften oder stationär bleiben. Für den Transport relevant ist der über alle Zentrumskoordinaten gemittelte Beitrag $\langle \bar{v}_d^2 \rangle_{X_0}$. Außerhalb der Flachbandbedingung ist dieser Beitrag endlich. An der Flachbandbedingung verschwindet der gemittelte Drift für alle Zentrumskoordinaten, sodass der bandleitende Beitrag wegfällt, die Landau-Bänder flach werden und in ρ_{xx} ein Minimum erscheint [20, 66].

Guiding Centers

$$\bar{v}_d(X_0) = \langle v_{d,y}(t) \rangle = \frac{2\pi V_0}{eBa} J_0\left(\frac{2\pi R_c}{a}\right) \sin\left(\frac{2\pi X_0}{a}\right), \quad (4.8)$$

wobei J_0 die Bessel-Funktion erster Art nullter Ordnung bezeichnet [66, 74]. Im Relaxationszeitansatz folgt daraus ein zusätzlicher oszillatorischer Beitrag zur Bandleitfähigkeit σ_{yy} , der proportional zum Quadrat der Driftgeschwindigkeit ist [66], und in der Auswertung noch wichtig wird. Für große Argumente kann die Bessel-Funktion asymptotisch durch

$$J_0(z) \approx \sqrt{\frac{2}{\pi z}} \cos\left(z - \frac{\pi}{4}\right), \quad z \gg 1 \quad (4.9)$$

genähert werden [74].

Damit wird die oszillatorische Magnetfeldabhängigkeit der Bandbreite aufgrund der Kosinus-Abhängigkeit unmittelbar sichtbar. Die Bandbreite verschwindet, die Landau-Bänder werden also flach, wenn das Argument des Kosinus ein ungerades Vielfaches von $\pi/2$ annimmt:

$$\frac{2\pi R_c}{a} - \frac{\pi}{4} = \left(m + \frac{1}{2}\right) \pi, \quad m = 0, 1, 2, \dots \quad (4.10)$$

Und durch einfaches Umstellen folgt:

$$\frac{2\pi R_c}{a} = \left(m + \frac{3}{4}\right) \pi, \quad (4.11)$$

was sich unmittelbar zu

$$2R_c = \left(m + \frac{3}{4}\right) a = \left(\lambda - \frac{1}{4}\right) a, \quad \lambda = m + 1 = 1, 2, 3, \dots \quad (4.12)$$

vereinfacht. Der Faktor $-1/4$ geht dabei auf die asymptotische Phase $-\pi/4$ der Näherung der Bessel-Funktion nullter Ordnung zurück [67, 74]. Abbildung 4.3 zeigt, dass der zeitlich gemittelte Drift einer einzelnen Zyklotronbahn vom Orbitzentrum X_0 abhängt und daher je nach Startlage positiv, negativ oder null sein kann. Für den Transport relevant ist jedoch erst der Beitrag der Gesamtheit aller Bahnen beziehungsweise Orbitzentren. Bei Beenakker wird dieser Zusammenhang über einen Diffusionstensor formuliert, der über die Einstein-Relation mit dem Leitfähigkeitstensor verknüpft ist [66]:

$$\sigma_{\mu\nu} = e^2 D(E_F) \mathcal{D}_{\mu\nu}. \quad (4.13)$$

Hier bezeichnet $D(E_F)$ die Zustandsdichte am Fermi-Niveau und $\mathcal{D}_{\mu\nu}$ den Diffusionstensor. Für eine eindimensionale Modulation in x -Richtung erhält das Guiding-Center eine zusätzliche Driftbewegung entlang der unmodulierten y -Richtung. Dadurch entsteht ein zusätzlicher Beitrag zur Komponente $\mathcal{D}_{yy}$ und damit zu σ_{yy} :

$$\Delta\sigma_{yy} = e^2 D(E_F) \Delta\mathcal{D}_{yy}. \quad (4.14)$$

Der zusätzliche Diffusionsbeitrag ergibt sich näherungsweise aus dem über die Orbitzentren gemittelten Quadrat der modulationsinduzierten Driftgeschwindigkeit [20, 66]:

$$\Delta\mathcal{D}_{yy} \simeq \tau \langle \bar{v}_d^2 \rangle_{x_0}. \quad (4.15)$$

Damit folgt

$$\Delta\sigma_{yy} \simeq e^2 D(E_F) \tau \langle \bar{v}_d^2 \rangle_{x_0}. \quad (4.16)$$

Ist die Flachbandbedingung erfüllt, verschwindet die modulationsinduzierte Landau-Bandbreite. Damit verschwindet auch die Driftgeschwindigkeit und der zusätzliche Beitrag $\Delta\sigma_{yy}$ wird minimal.

Übertragung auf den HgTe-basierten 3D-TI

Experimentelle Arbeiten an Materialien mit eindimensionaler Modulation und Dirac-Fermionen finden sich in den Arbeiten von Drienovsky [75, 76], Huber [77] und Amann [78], die sich mit Kommensurabilitätsoszillationen und Übergittereffekten in Graphen befassen. Im quantenmechanischen Bild von Dirac-Fermionen wird der Beitrag der Modulation etwas anders beschrieben, da er vom Mittelwert zweier benachbarter Laguerre-Polynome abhängt. Für große $|n|$ wird der Unterschied zwischen $L_{|n|}$ und $L_{|n|-1}$ jedoch klein, sodass der Dirac-Fall im semiklassischen Limes in den bekannten konventionellen Ausdruck übergeht [79]. Das bedeutet, dass für die Dirac-artigen Oberflächenzustände dreidimensionaler topologischer Isolatoren die geometrische Aussage der Kommensurabilitätsbedingung erhalten bleibt. Für ideale Dirac-Zustände gilt zwar

$$E = \pm \hbar v_F |\mathbf{k}|, \quad (4.17)$$

sodass sich im Magnetfeld das nicht äquidistante Landau-Niveau-Spektrum

$$E_n = \text{sgn}(n) v_F \sqrt{2e\hbar B |n|}, \quad n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \quad (4.18)$$

ergibt [26, 80]. Für die Lage der Kommensurabilitätsminima ist jedoch vor allem der Zyklotronradius am Fermi-Niveau entscheidend,

$$R_c = \frac{\hbar k_F}{eB} = \frac{E_F}{ev_F B}, \quad (4.19)$$

sodass formal dieselbe geometrische Größe wie im konventionellen 2DEG auftritt. Die Minima-Positionen in $1/B$ werden damit auch im Dirac-Fall durch k_F festgelegt.

Damit ergibt sich auch für Dirac-Zustände wieder dieselbe Flachbandbedingung

$$2R_c = \left(\lambda - \frac{1}{4} \right) a. \quad (4.20)$$

Für die Minima-Positionen folgt daraus, dass Dirac-Fermionen mit linearer Dispersion und konventionelle Elektronen mit parabolischer Dispersion bei gleichem k_F nicht unterschieden werden können.

Die Unterscheidung muss daher über die zugehörige Ladungsträgerdichte erfolgen. Für eine einzelne, nicht spinentartete TI-Oberfläche gilt

$$n_s = \frac{k_F^2}{4\pi}, \quad (4.21)$$

während ein spinentartetes konventionelles 2DEG

$$n_s = \frac{k_F^2}{2\pi} \quad (4.22)$$

liefert [22, 24]. Gerade dieser Faktor zwei geht in die Zuordnung der experimentell bestimmten Perioden der Kommensurabilitätsoszillationen zu topologischen Oberflächenzuständen ein.

4.1.2. Bandleitfähigkeitskorrektur

Für die spätere Auswertung ist eine explizite Form der bandleitenden Leitfähigkeitskorrektur hilfreich. Der im vorherigen Abschnitt eingeführte driftinduzierte Beitrag zu σ_{yy} kann im semiklassischen Limes großer Landau-Indizes als [24, 67]

$$\Delta\sigma_{yy}^{\text{band}} \approx \frac{e^2}{2\pi\hbar} \frac{V_0^2}{\gamma \hbar\omega_c a k_F} \cos^2 \left(2\pi \frac{R_c}{a} - \frac{\pi}{4} \right) \quad (4.23)$$

geschrieben werden. Hier bezeichnet V_0 die Modulationsstärke (Potentialamplitude), a die Gitterperiode, k_F den Fermi-Wellenvektor und γ eine effektive Energieverbreiterung.

Um den Parameter γ mit einer experimentell zugänglichen Größe zu verknüpfen, kann Gleichung 4.23 mit dem bandleitenden Beitrag im gleichen Grenzfall verglichen werden [61]:

$$\Delta\sigma_{yy}^{\text{band}} \approx \frac{V_0^2}{Ba} \frac{e^2\tau_b}{m^*} \frac{2m^*}{\pi e\hbar^3} \frac{1}{k_F} \cos^2 \left(2\pi \frac{R_c}{a} - \frac{\pi}{4} \right). \quad (4.24)$$

Dabei ist m^* die effektive Masse und τ_b die bandleitende Streuzeit. Aus dem Vergleich der beiden Schreibweisen folgt

$$\gamma = \frac{\hbar}{\tau_b}. \quad (4.25)$$

Mit $\mu = e\tau_b/m^*$ ergibt sich entsprechend

$$\gamma = \frac{e\hbar}{m^*\mu}. \quad (4.26)$$

Damit sich diese Oszillation im Transport bemerkbar macht, müssen die modulationsinduzierten Landau-Bänder am Fermi-Niveau noch hinreichend aufgelöst sein. Wird die Niveauverbreiterung durch Streuung zu groß, so wird die oszillierende Landau-Bandstruktur zunehmend verwischt, und die Amplitude der Weiss-Oszillationen nimmt ab. Umgekehrt werden die Landau-Bänder bei höherer Beweglichkeit, also geringerer Verbreiterung, schärfer aufgelöst, sodass die Weiss-Oszillationen mit größerer Amplitude beobachtet werden können.

4.2. Positiver Magnetowiderstand

Neben den periodischen Kommensurabilitätsoszillationen kann im Niederfeldbereich ein positiver Magnetowiderstand auftreten. In lateral modulierten Übergittern wird dieser üblicherweise als modulationsinduzierter Hintergrund interpretiert. Im Bild des klassischen magnetischen Durchbruchs lässt er sich auf die durch das periodische Potential entstehenden Minibandstrukturen zurückführen [81]. Im semiklassischen Modell, auf das im Folgenden näher eingegangen wird, wird sein Auftreten mit offenen Bahnen in Verbindung gebracht, wie in Abbildung 4.4 dargestellt ist [20, 72].

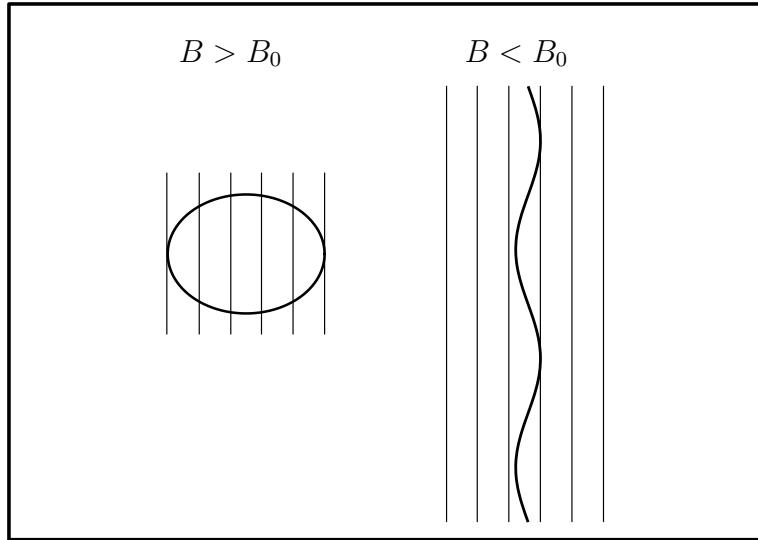


Abbildung 4.4.: Schematische Darstellung geschlossener und offener Trajektorien in einem eindimensional modulierten zweidimensionalen Elektronensystem nach [72]. Die vertikalen Linien kennzeichnen das periodische Modulationspotential mit Gitterperiode a . Für $B > B_0$ bleibt die Zyklotronbahn geschlossen und das Elektron kann seine Umlaufbahn vollenden (links). Für $B < B_0$ ist die Lorentzkraft kleiner als die maximale Kraft des Modulationspotentials. Die geschlossene Zyklotronbahn geht dann in eine offene Trajektorie über, die entlang der Äquipotentiallinien beziehungsweise parallel zu den Modulationsstreifen verläuft (rechts). Diese offenen Bahnen erhöhen in der hier verwendeten Notation die Leitfähigkeit in y -Richtung und erscheinen nach Tensorinversion als positiver Beitrag in ρ_{xx} .

Aufgrund des eindimensionalen Modulationspotentials $V(x) = V_0 \cos(Kx)$ mit der Modulationswellenzahl $K = 2\pi/a$ und der Periode a wirkt zusätzlich zur Lorentzkraft die Kraft infolge des Potentialgradienten auf die Elektronen. Sie ergibt sich zu

$$F_x = -\frac{dV}{dx} = KV_0 \sin(Kx). \quad (4.27)$$

Ist die Lorentzkraft

$$F_L = ev_F B \quad (4.28)$$

kleiner als die maximale Modulationskraft KV_0 , so treten neben geschlossenen Zyklotronbahnen offene Trajektorien parallel zum Modulationsgitter auf.

Diese offenen Bahnen erhöhen die Leitfähigkeit in y -Richtung und erscheinen nach Tensorinversion als positiver Beitrag in ρ_{xx} [20].

Das kritische Feld, bei dem die offenen Trajektorien verschwinden, folgt aus dem Gleichsetzen der beiden Kräfte:

$$B_0 = \frac{KV_0}{ev_F} = \frac{2\pi V_0}{eav_F}. \quad (4.29)$$

Für $B \gtrsim B_0$ verbleiben nur noch geschlossene Bahnen, und der positive Magnetowiderstand geht in einen gesättigten Hintergrund über.

4.2.1. Modulationsstärke aus dem Sättigungsfeld

Die Sättigung des positiven Niederfeld-Magnetowiderstands liefert damit einen direkten Zugang zur Stärke des aufgeprägten periodischen Potentials. Wird das charakteristische Feld B_0 experimentell bestimmt, so kann die Modulationsstärke unmittelbar aus

$$V_0 = \frac{eav_F}{2\pi} B_0 \quad (4.30)$$

abgeschätzt werden. Die Bestimmung über das Sättigungsfeld ist besonders anschaulich, weil sie direkt an die semiklassische Vorstellung offener und geschlossener Trajektorien anknüpft und sich experimentell, wie in Abbildung 4.5 gezeigt, über den Übergang in den gesättigten Bereich des positiven Magnetowiderstands bestimmen lässt.

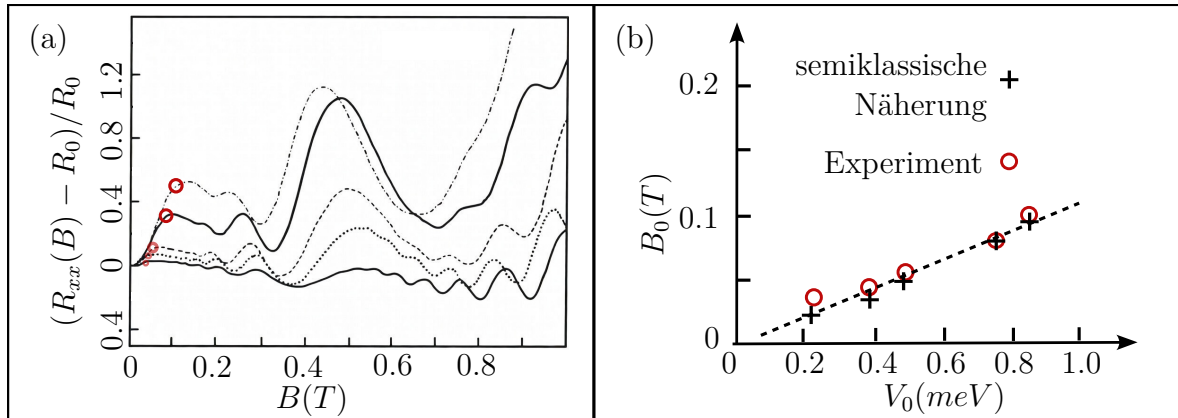


Abbildung 4.5.: Beispiel für die Bestimmung der Modulationsstärke aus dem Sättigungsfeld des positiven Magnetowiderstands nach [20]. (a) Magnetowiderstandskurven für verschiedene Modulationsstärken. Die roten Kreise markieren B_0 und kennzeichnen jeweils den Übergang in den gesättigten Bereich. (b) Gegenüberstellung der aus den Sättigungsfeldern bestimmten Modulationsstärken mit den zugehörigen Werten von B_0 . Die Daten werden durch die semiklassische Beziehung aus Gleichung 4.30 konsistent beschrieben.

Alternativ kann die Modulationsstärke auch aus der Amplitude der bandleitfähigkeitsdominierten Kommensurabilitätsoszillationen abgeschätzt werden [20, 82]. In den hier betrachteten Strukturen ist eine solche Auswertung jedoch nur eingeschränkt belastbar. Der modulationsinduzierte Beitrag $\Delta\rho_{xx}$ lässt sich aus den Messdaten nicht direkt isolieren, da dem Signal ein Hintergrund überlagert ist und mehrere Transportkanäle zum Magnetowiderstand beitragen können. Die Bestimmung über das Sättigungsfeld B_0 ist für die vorliegende Arbeit daher die robustere Abschätzung.

4.2.2. Modulationspotential an Dirac-Fermionen

Für das relative Modulationspotential V_0/E_F ergibt sich ein Unterschied zwischen einem parabolischen 2DEG und ideal linearen Dirac-Fermionen. Ausgangspunkt ist die semiklassische Sättigungsfeld-Relation [20]:

$$B_0 = \frac{2\pi V_0}{eav_F}. \quad (4.31)$$

Für ideal lineare Dirac-Fermionen gilt [11]

$$E_F = \hbar v_F k_F. \quad (4.32)$$

Mit der zugehörigen Zyklotronmasse

$$m_c^*(E_F) = \frac{E_F}{v_F^2} = \frac{\hbar k_F}{v_F} \quad (4.33)$$

lässt sich dies äquivalent auch als

$$E_F = \frac{\hbar^2 k_F^2}{m_c^*} \quad (4.34)$$

schreiben. Daraus folgt

$$\frac{V_0}{E_F} = \frac{eaB_0}{2\pi\hbar k_F}. \quad (4.35)$$

Für ein parabolisches 2DEG gilt dagegen

$$E_F = \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m^*}, \quad v_F = \frac{\hbar k_F}{m^*}, \quad (4.36)$$

sodass

$$\frac{V_0}{E_F} = \frac{eaB_0}{\pi\hbar k_F} \quad (4.37)$$

resultiert. Bei gleichem B_0 und gleichem k_F ist das relative Modulationspotential für ideal lineare Dirac-Fermionen somit um einen Faktor zwei kleiner als für Elektronen mit parabolischer Dispersion. Für reale Dirac-artige Oberflächenzustände stellt diese Beziehung jedoch nur eine Näherung dar, da ihre Bandstruktur im Allgemeinen nicht streng linear ist. Ein zusätzlicher schwach quadratischer Dispersionsanteil bewirkt, dass die für den Magnetotransport relevante Zyklotronmasse in einem begrenzten Energiebereich näherungsweise als konstant behandelt werden kann [46].

4.2.3. Screening und Fourierkomponenten eines periodischen Modulationspotentials

Die bisherige Herleitung der Weiss-Oszillationen geht von einem schwachen, eindimensionalen Modulationspotential mit rein kosinusförmigem Verlauf aus. Reale laterale Potentialprofile weichen davon jedoch im Allgemeinen ab. Aufgrund endlicher Strukturweiten und der Feldverteilung an den Flanken wird das Potential daher zweckmäßiger als Fourierreihe beschrieben [20, 76, 83, 84]:

$$V(x) = \sum_{j=1}^{\infty} V_j \cos\left(j \frac{2\pi}{a} x\right). \quad (4.38)$$

Die Grundharmonische $j = 1$ entspricht der Gitterperiode a , höhere Harmonische beschreiben entsprechend kürzere effektive Perioden a/j [20, 83]. Für die j -te Harmonische ergibt sich damit formal die Kommensurabilitätsbedingung

$$2R_c = \left(\lambda_j - \frac{1}{4}\right) \frac{a}{j}. \quad (4.39)$$

Zusätzlich wird das extern angelegte Potential durch die beweglichen Ladungsträger abgeschirmt. In der statischen Thomas-Fermi-Näherung gilt für die j -te Fourierkomponente

$$V_j^{\text{scr}} = \frac{V_j}{\varepsilon_{\text{TF}}(q_j)}, \quad q_j = j \frac{2\pi}{a}, \quad (4.40)$$

mit

$$\varepsilon_{\text{TF}}(q_j) = 1 + \frac{q_{\text{TF}}}{q_j} \quad (4.41)$$

für ein zweidimensionales System [76, 85]. Dabei ist

$$q_{\text{TF}} = \frac{e^2 D(E_F)}{2\varepsilon_0 \varepsilon_{\text{eff}}}, \quad (4.42)$$

direkt mit der Zustandsdichte am Fermi-Niveau verknüpft [86]. Für die topologischen Oberflächenzustände in verspanntem HgTe kann in erster Näherung eine lineare Dirac-Dispersion angenommen werden [15, 33]. Für ein zweidimensionales Dirac-System folgt dann für die Zustandsdichte am Fermi-Niveau

$$D(E_F) = \frac{|E_F|}{2\pi(\hbar v_F)^2} = \frac{k_F}{2\pi\hbar v_F}, \quad (4.43)$$

sodass auch die Thomas-Fermi-Wellenzahl mit dem Fermi-Wellenvektor skaliert, also $q_{\text{TF}} \propto k_F$ [86]. Das Screening der Oberflächenzustände hängt damit direkt von der Lage des Fermi-Niveaus ab. Im Gegensatz dazu ist die Zustandsdichte in einem idealen parabolischen zweidimensionalen Elektronengas konstant, sodass q_{TF} dort im statischen Limes im Wesentlichen unabhängig von der Lage des Fermi-Niveaus ist [55]. Die hier verwendete Thomas-Fermi-Abschätzung erfasst damit die wesentliche Tendenz eines gateabhängigen Screenings der Dirac-artigen Oberflächenzustände, auch wenn die reale Situation im vorliegenden HgTe-System durch zusätzliche Bulk-Beiträge weiter beeinflusst werden kann.

Da für die Grundharmonische $q_1 = 2\pi/a$, für höhere Harmonische jedoch $q_j = j 2\pi/a$ gilt, ist der Abschirmfaktor für $j = 1$ am größten. Die Grundharmonische wird daher stärker unterdrückt als kurzwellige Beiträge, sodass höhere Harmonische relativ an Gewicht gewinnen und im Transport sichtbar bleiben können [20, 76]. Bereits ein einzelnes laterales Potential kann über seine Fourierkomponenten mehrere effektive Perioden enthalten und damit zusätzliche Minima erzeugen, die sich nicht allein durch die Grundharmonische erklären lassen [76, 83].

4.2.4. Beweglichkeitsabschätzung aus Kommensurabilitätsoszillationen

Zur Auflösung einer Kommensurabilitätsoszillation der Ordnung λ sollte die mittlere freie Weglänge mindestens von der Größenordnung des Zyklotronumfangs sein [20]. Mit der bereits eingeführten Flachbandbedingung

$$2R_c = \left(\lambda - \frac{1}{4}\right) a \quad (4.44)$$

folgt für den Umfang der gerade noch aufgelösten Bahn

$$U_Z = 2\pi R_c = \pi \left(\lambda - \frac{1}{4}\right) a. \quad (4.45)$$

Wird das letzte noch sichtbare Minimum mit $\lambda_{\max}$ bezeichnet, ergibt sich daraus die grobe Untergrenze

$$l_e \gtrsim U_{Z,\lambda_{\max}} = \pi \left(\lambda_{\max} - \frac{1}{4}\right) a. \quad (4.46)$$

Mit

$$l_e = v_F \tau = \frac{\mu \hbar k_F}{e} \quad (4.47)$$

erhält man entsprechend für die Beweglichkeit

$$\mu \gtrsim \frac{e\pi \left(\lambda_{\max} - \frac{1}{4}\right) a}{\hbar k_F}. \quad (4.48)$$

Diese Beziehung liefert keine präzise Beweglichkeitsextraktion, wohl aber eine konsistente Größenordnungsabschätzung dafür, ab welcher Probenqualität noch geschlossene Zyklotronbahnen und damit Weiss-Oszillationen der beobachteten Ordnung möglich sind [20, 25].

4.3. Zusammenfassung und Ausblick

In diesem Kapitel wurde der theoretische Rahmen geschaffen, in dem die im weiteren Verlauf untersuchten Kommensurabilitätsoszillationen eingeordnet werden. Das zentrale Resultat ist die Flachbandbedingung 4.44, die sich sowohl quantenmechanisch als auch semiklassisch konsistent ergibt. Zusammen mit der $1/B$ -Periodizität der Minima liefert sie einen unmittelbaren Zugang zum Fermi-Wellenvektor k_F und damit zur Ladungsträgerdichte des jeweils beteiligten Transportkanals. Für die Dirac-artigen Oberflächenzustände von verspannten HgTe bleibt diese geometrische Aussage im semiklassischen Limes erhalten. Die Lage der Kommensurabilitätsminima wird daher auch hier durch k_F festgelegt. Im Limes großer n beeinflusst die Berry-Phase die Flachbandbedingung nicht, da die Minima-Positionen dann durch die semiklassische geometrische Kommensurabilität zwischen Zyklotronradius und Modulationsperiode bestimmt werden. Die Unterscheidung zwischen topologischer Oberfläche und konventionellem 2DEG erfolgt deshalb nicht über die Minima-Positionen selbst, sondern über die zugehörige Ladungsträgerdichtebeziehung. Für den Vergleich mit parabolischen Zuständen wurde außerdem gezeigt, dass sich das aus dem Sättigungsfeld bestimmte relative

Modulationspotential V_0/E_F im Dirac-Fall von der konventionellen 2DEG-Relation unterscheidet. Für die spätere Auswertung sind darüber hinaus die praktischeren Konsequenzen wichtig.

Das folgende Kapitel 5 widmet sich dem verwendeten HgTe-Schichtsystem sowie den bereits vorliegenden charakterisierten Eigenschaften des Systems.

5. Materialeigenschaften

Das in dieser Arbeit untersuchte Materialsystem basiert auf einer verspannten 80 nm dicken HgTe-Schicht, die als dreidimensionaler topologischer Isolator topologische Oberflächenzustände und, je nach Lage des Fermi-Niveaus, zusätzliche Bulk-Beiträge zum Transport aufweist. Die Schichtstruktur und die relevanten Materialparameter orientieren sich an den in Ref. [16] charakterisierten HgTe-Wafern. Für die spätere Auswertung sind vor allem die gateabhängigen Ladungsträgerdichten, Beweglichkeiten und Transportregime im Leitungsband, in der Bulk-Bandlücke und im Valenzband relevant.

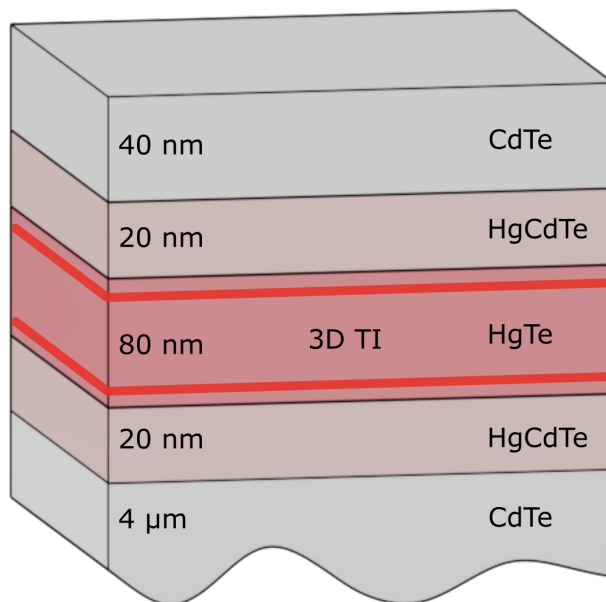


Abbildung 5.1.: Schichtfolge des in dieser Arbeit verwendeten 80 nm-HgTe-Wafers. Auf einem virtuellen 4 µm dicken CdTe-Substrat folgen eine 20 nm dicke $\text{Cd}_{0.7}\text{Hg}_{0.3}\text{Te}$ -Pufferschicht, die aktive 80 nm dicke HgTe-Schicht, eine weitere 20 nm dicke $\text{Cd}_{0.7}\text{Hg}_{0.3}\text{Te}$ -Schicht sowie eine 40 nm dicke CdTe-Schutzschicht. Die roten Striche markieren Bereiche, die die Lage der topologischen Oberflächenzustände an der oberen und unteren Grenzfläche der verspannten HgTe-Schicht kennzeichnen. Die CdHgTe-Zwischenschichten verbessern die Grenzflächenqualität und unterstützen die pseudomorphe Verspannung des HgTe [16].

5.1. Schichtaufbau des verwendeten Wafers

Wie in Abbildung 5.1 dargestellt, ist der in dieser Arbeit verwendete Wafer auf einem (013)-orientierten GaAs-Substrat aufgebaut, auf dem sich ein 4 µm dicker CdTe-Puffer befindet, der als virtuelle Substratoberfläche dient. Darauf folgt die aktive Heterostruktur aus einer verspannten 80 nm dicken HgTe-Schicht, die nach unten und oben jeweils von einer 20 nm dicken $\text{Cd}_{0.7}\text{Hg}_{0.3}\text{Te}$ -Schicht begrenzt wird. Den oberen Abschluss bildet eine 40 nm dicke CdTe-Schutzschicht (Cap-Layer). Die untere $\text{Cd}_{0.7}\text{Hg}_{0.3}\text{Te}$ -Schicht verbessert die Grenzflächenqualität und reduziert Defekte, die obere stabilisiert die obere Grenzfläche, und die CdTe-Schutzschicht schützt die Heterostruktur während der weiteren Prozessierung. [16, 18, 33, 87]

5.2. Ladungsträgerdichten und Beweglichkeiten

Die gateabhängigen Transportdaten in Abbildung 5.2 liefern eine Referenz für die zu erwartenden Materialparameter einer 80 nm dicken verspannten HgTe-Schicht. In den dort gezeigten Messungen besitzt der Widerstand $\rho_{xx}(V_g)$ bei einer Messung ohne Magnetfeld ein ausgeprägtes Maximum in der Nähe des Ladungsneutralitätspunktes. Gleichzeitig wechselt der Hall-Widerstand bei angelegtem Magnetfeld sein Vorzeichen bei nahezu gleicher Gate-Spannung. Damit wird unmittelbar sichtbar, dass die Gate-Spannung das Fermi-Niveau vom Leitungsband über die Bulk-Bandlücke in das Valenzband verschiebt [16].

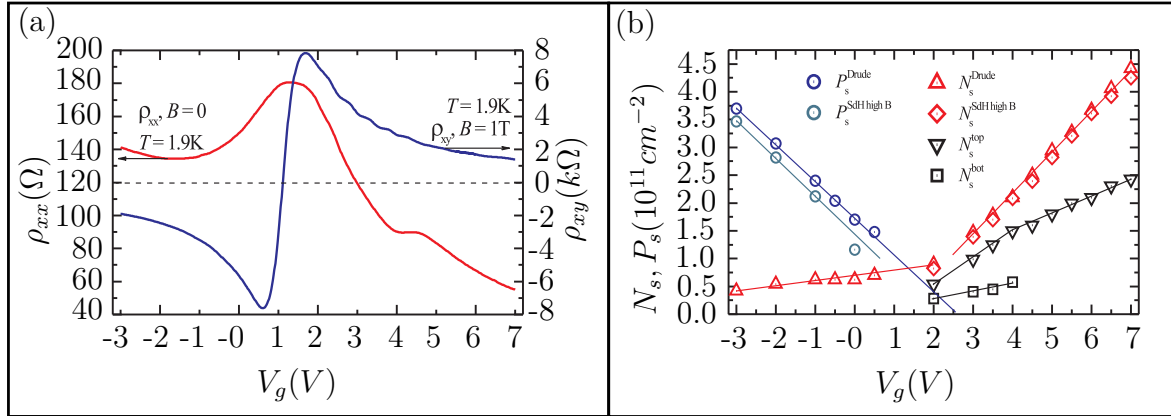


Abbildung 5.2.: (a) Abhängigkeit des Längswiderstands ρ_{xx} bei $T = 1.9 \text{ K}$ und $B = 0 \text{ T}$ sowie des Hall-Widerstands ρ_{xy} bei $B = 1 \text{ T}$ von der Top-Gate-Spannung nach [16]. Das Maximum in ρ_{xx} und der Vorzeichenwechsel von ρ_{xy} kennzeichnen den Übergang vom Leitungsband über die Bulk-Bandlücke in das Valenzband. (b) Aus Zwei-Ladungsträger-Drude-Fits und hochfeldigen SdH-Oszillationen bestimmte Elektronen- und Lochdichten als Funktion der Top-Gate-Spannung nach [16]. Zusätzlich ist die Elektronendichte der oberen Oberfläche N_s^{top} gezeigt, die aus niederfeldigen SdH-Oszillationen bestimmt wurde.

Aus Drude-Fits und aus SdH-Oszillationen ergeben sich die Ladungsträgerdichten von Elektronen und Löchern (siehe Abbildung 5.2(b)). Beweglichkeiten lassen sich ebenfalls aus den Drude-Fits extrahieren, sind für die Oberflächenzustände jedoch nicht direkt zugänglich. Die Beweglichkeiten erreichen Werte über $1 \cdot 10^5 \text{ cm}^2/(\text{V s})$, mit Maximalwerten für Elektronen bis in die Größenordnung von $4 \cdot 10^5 \text{ cm}^2/(\text{V s})$ [16, 88]. Magnetokapazitätsmessungen konnten bestätigen, dass es sich bei den extrahierten Ladungsträgerdichten aus den SdH-Oszillationen im Niederfeldbereich um besetzte Zustände der oberen Oberfläche handelt. Dabei tritt neben der geometrischen Kapazität auch eine Quantenkapazität auf, die direkt mit der Zustandsdichte am Fermi-Niveau verknüpft ist [89]. Die sequenzielle Bandbesetzung wird zusätzlich durch die Messung der Zustandsdichte bei $B = 0 \text{ T}$ gestützt, die ein Minimum in der Bulk-Energielücke zeigt [90].

Befindet sich die Fermi-Energie in der Bulk-Bandlücke, so liefert die extrahierte Ladungsträgerdichte zunächst nur Aufschluss über die Verteilung der Ladungsträger auf die Oberflächenzustände der oberen und unteren Oberfläche, also über $n^{\text{tot}} = n^{\text{top}} + n^{\text{bot}}$. Ohne angelegtes äußeres elektrisches Feld sind im ideal symmetrischen Fall beide Oberflächen gleich besetzt. Bei angelegtem elektrischen Feld wird die untere Oberfläche aufgrund des Screening-Effekts deutlich schwächer beeinflusst als die obere, sodass sich

eine asymmetrische Ladungsträgerverteilung zwischen oberer und unterer Oberfläche einstellt. [16, 18, 91]

Für die weitere Auswertung ist besonders wichtig, dass sich die Ladungsträgerdichten im Valenzband nicht mit einem Ein-Kanal-Modell beschreiben lassen. Dort koexistieren Bulk-Löcher und Dirac-artige Oberflächenzustände, die mit unterschiedlichem Vorzeichen zum Hallsignal beitragen. Zusätzlich unterscheiden sich ihre Beweglichkeiten, effektiven Massen und Entartungen. Dadurch erfordert die Bestimmung der Lochdichte eine Mehrkanalinterpretation [16].

5.3. Banddiagramm und Transportregime

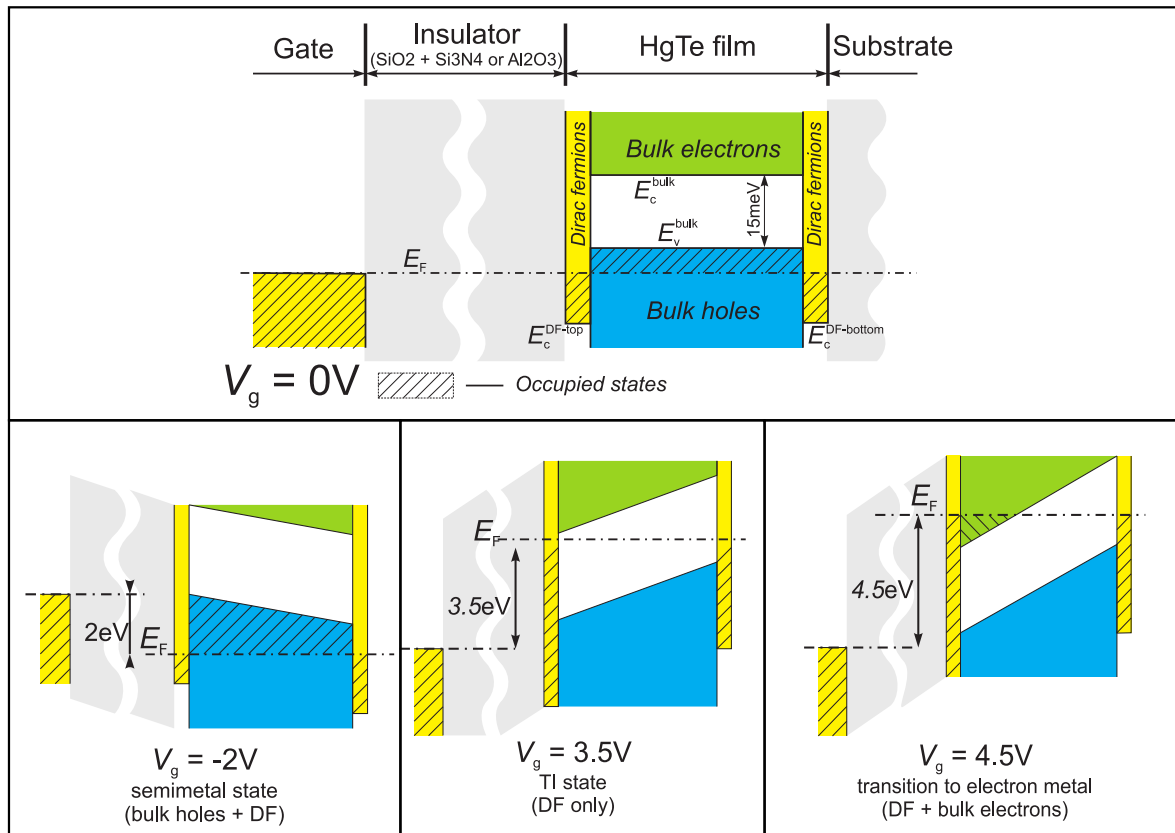


Abbildung 5.3.: Bandprofile für vier charakteristische Regime der Top-Gate-Abstimmung in verspanntem HgTe. Horizontal ist die Schichtfolge in z -Richtung vom Top-Gate über den Isolator bis durch die Heterostruktur dargestellt, vertikal die Energie sowie die besetzten Zustände. In (a) ist der Fall $V_g = 0$ gezeigt. Das Fermi-Niveau liegt bereits im Valenzband, sodass sowohl Bulk-Löcher als auch Dirac-artige Oberflächenzustände an oberer und unterer Grenzfläche besetzt sind. In (b) führt eine stärkere negative Top-Gate-Spannung zu einer stärkeren Bandverbiegung im Valenzband. Dadurch werden zusätzliche Bulk-Löcher besetzt, während die Dirac-artigen Oberflächenzustände weiterhin zum Transport beitragen. In (c) ist die Top-Gate-Spannung positiv genug, dass sich das Fermi-Niveau in der Bulk-Bandlücke befindet. In diesem Regime sind im Wesentlichen nur noch die topologischen Oberflächenzustände besetzt. Wird die Fermi-Energie weiter angehoben, so wird in (d) zusätzlich das Leitungsband besetzt, sodass neben den Oberflächenzuständen auch Bulk-Elektronen zum Transport beitragen. Aus [16].

Die in Abbildung 5.3 gezeigten Bandprofile zeigen die für den späteren Magnetotransport relevanten Gate-Regime des verspannten HgTe. Die Top-Gate-Spannung verschiebt nicht nur das Fermi-Niveau, sondern verändert zugleich die Bandverbiegung der HgTe-Schicht. Für $V_g = 0$ ist die Bandlage noch näherungsweise flach. Das Fermi-Niveau liegt jedoch bereits im Valenzband, sodass Dirac-artige OberflächenElektronen und Bulk-Löcher gleichzeitig vorhanden sind. Eine negativere Top-Gate-Spannung verstärkt die Bandverbiegung und erhöht den Anteil der besetzten Lochzustände. Gleichzeitig nimmt die Besetzung der Dirac-artigen Oberflächenzustände ab, sie tragen jedoch weiterhin zum Transport bei. Erst für hinreichend positive Top-Gate-Spannungen verschiebt sich das Fermi-Niveau in die Bulk-Bandlücke. In diesem Bereich wird der Transport im Wesentlichen von den beiden topologischen Oberflächenzuständen getragen. Bei noch positiverem Gatebias wird schließlich das Leitungsband erreicht, sodass zusätzlich Bulkelektronen besetzt werden.

Die bandstrukturelle Einordnung dieser Regime wird zusätzlich durch winkelaufgelöste Photoemissionsspektroskopie (ARPES, engl. *angle-resolved photoemission spectroscopy*) und Magnetotransportuntersuchungen an verspanntem HgTe gestützt. Insbesondere konnten topologische Oberflächenzustände mit Dirac-artiger Dispersion in verspanntem HgTe auch spektroskopisch nachgewiesen werden [92]. Zusammen mit den Transportuntersuchungen [15, 16, 18, 33, 46, 93] ergibt sich damit das in dieser Arbeit zugrunde gelegte Bild einer Bulk-Bandlücke mit koexistierenden Oberflächenzuständen sowie zusätzlichen Bulk-Beiträgen im Leitungs- und Valenzband. Für die spätere Auswertung wird das genaue elektrostatische Profil sowie die Einteilung in Transportregime entscheidend. Am interessantesten ist der Valenzbandbereich, da dort Bulk-Löcher und OberflächenElektronen gleichzeitig vorhanden sind und sich ihre Beiträge mit unterschiedlichen Ladungsträgerdichten und Beweglichkeiten in Hall- und Magnetowiderstand überlagern. Genau dieses Mehrkanalregime macht die Interpretation der Messdaten bei negativen Gate-Spannungen komplex.

5.4. Zwei-Ladungsträger-Drude-Modell

Sobald gleichzeitig Elektronen und Löcher oder mehrere Elektronenkanäle zum Transport beitragen, reicht die einfache Drude-Beschreibung eines einzelnen Kanals nicht mehr aus. Für den hier betrachteten Fall der Koexistenz von Elektronen und Löchern lässt sich der Magnetotransport im einfachsten Zugang durch ein Zwei-Ladungsträger-Drude-Modell beschreiben [16]. Dieses Modell wird auch zur Auswertung der gateabhängigen Magnetotransportdaten verwendet.

Für Elektronen mit Dichte n_e und Beweglichkeit μ_e sowie Löcher mit Dichte p_h und Beweglichkeit μ_h lauten die einzelnen Leitfähigkeitsbeiträge

$$\sigma_{xx}^{(e)} = \frac{n_e e \mu_e}{1 + \mu_e^2 B^2}, \quad \sigma_{xy}^{(e)} = -\frac{n_e e \mu_e^2 B}{1 + \mu_e^2 B^2}, \quad (5.1)$$

$$\sigma_{xx}^{(h)} = \frac{p_h e \mu_h}{1 + \mu_h^2 B^2}, \quad \sigma_{xy}^{(h)} = \frac{p_h e \mu_h^2 B}{1 + \mu_h^2 B^2}. \quad (5.2)$$

Die Gesamtleitfähigkeit ergibt sich durch Addition der Beiträge,

$$\sigma_{xx} = \sigma_{xx}^{(e)} + \sigma_{xx}^{(h)}, \quad \sigma_{xy} = \sigma_{xy}^{(e)} + \sigma_{xy}^{(h)}, \quad (5.3)$$

wobei für das isotrope zweidimensionale System weiterhin $\sigma_{yy} = \sigma_{xx}$ und $\sigma_{yx} = -\sigma_{xy}$ gilt.

Durch Tensorinversion erhält man den Widerstandstensor und damit die für die Fits verwendeten Größen

$$\rho_{xx} = \frac{\sigma_{xx}}{\sigma_{xx}^2 + \sigma_{xy}^2}, \quad \rho_{xy} = -\frac{\sigma_{xy}}{\sigma_{xx}^2 + \sigma_{xy}^2}. \quad (5.4)$$

Setzt man die Elektronen- und Lochbeiträge explizit ein, so folgen die bekannten Zwei-Ladungsträger-Formeln

$$\rho_{xx}(B) = \frac{1}{e} \frac{(n_e \mu_e + p_h \mu_h) + (n_e \mu_h + p_h \mu_e) \mu_e \mu_h B^2}{(n_e \mu_e + p_h \mu_h)^2 + (p_h - n_e)^2 \mu_e^2 \mu_h^2 B^2}, \quad (5.5)$$

$$\rho_{xy}(B) = \frac{B}{e} \frac{(p_h \mu_h^2 - n_e \mu_e^2) + (p_h - n_e) \mu_e^2 \mu_h^2 B^2}{(n_e \mu_e + p_h \mu_h)^2 + (p_h - n_e)^2 \mu_e^2 \mu_h^2 B^2}. \quad (5.6)$$

Diese Ausdrücke bilden die praktische Grundlage für die spätere Auswertung der Hall- und Magnetowiderstandsdaten. In der Bulk-Bandlücke reduziert sich das Drude-Modell wieder auf einen effektiven Ein-Ladungsträger-Fall, da die oberen und unteren Oberflächenzustände vergleichbar hohe Beweglichkeiten besitzen und daher gemeinsam als eine Ladungsträgergruppe beschrieben werden können. Im Valenzband dagegen ist das Zwei-Ladungsträger-Bild unverzichtbar, weil dort Bulk-Löcher und Oberflächenelektronen gleichzeitig vorhanden sind. Für noch allgemeinere Situationen mit zusätzlichen Kanälen lässt sich das Modell durch Summation weiterer Leitfähigkeitsbeiträge erweitern. [16]

6. Probengeometrie und Herstellung

Die verwendeten Hall-Bar-Strukturen bestehen aus einer lateral modulierten Mess-Hall-Bar und einem unmodulierten Referenzbereich auf demselben Probenstück. Die Modulation wird durch ein Streifen-Gate erzeugt, während ein darüberliegendes Top-Gate die mittlere Ladungsträgerdichte steuert. Dadurch lassen sich die modulierte und die unmodulierte Transportantwort direkt miteinander vergleichen. Die Herstellung der Doppel-Gate-Geometrie umfasst Mesa-Ätzen, Oxidabscheidung, Elektronenstrahllithographie, Metallisierung und Lift-off.

Die eindimensionale laterale Modulation des elektrostatischen Potentials wird durch die schon erwähnte Doppel-Gate-Struktur erzeugt. Unterhalb eines planaren Top-Gates befindet sich ein Streifen-Gate, dessen einzelne Finger bzw. Streifen außerhalb des Transportkanals elektrisch miteinander verbunden sind. Durch die getrennte Ansteuerung beider Gates lassen sich sowohl die Flächenladungsträgerdichte in der HgTe-Schicht als auch die Stärke der lateralen Potentialmodulation gezielt variieren. Im Unterschied zu Ansätzen, bei denen die Modulation durch geätzte Streifenstrukturen [21] oder durch Resiststreifen realisiert wurde, was sowohl in anderen Materialsystemen [61, 94–96] als auch für HgTe-Heterostrukturen unter Verwendung eines calixarenbasierten Elektronenstrahlresists gezeigt wurde [24, 25, 97, 98], basiert die hier vorgestellte und verwendete Geometrie vollständig auf einer gate-definierten Potentialmodulation.

6.1. Probendesign

Die Probenherstellung beginnt mit der Definition der makroskopischen Hall-Bar-Geometrie durch nasschemisches Mesa-Ätzen. Für HgCdTe- und HgTe-Heterostrukturen haben sich nasschemische Ätzverfahren auf der Basis von Brom und Ethylenglykol als schonende Methode bewährt, da sie im Vergleich zu trockenen Ätzverfahren keine strahlungsinduzierten Schäden und damit weniger zusätzliche Störstellen im Material hinterlassen. Nachteilig ist das isotrope Ätzprofil, das zu Unterätzungen führen kann [99, 100]. Für die hier zunächst strukturierte große Mesa stellt diese Isotropie noch keinen kritischen Nachteil dar, da in diesem Schritt nur die makroskopische Transportgeometrie festgelegt wird. Darüber hinaus hat sich das nasschemische Ätzen in früheren Arbeiten am Lehrstuhl Weiss bewährt, da es reproduzierbare und gut kontrollierbare Ätzraten ermöglicht, ohne die Eigenschaften der im Nachhinein gemessenen Proben nachteilig zu beeinflussen [6, 18, 87, 90].

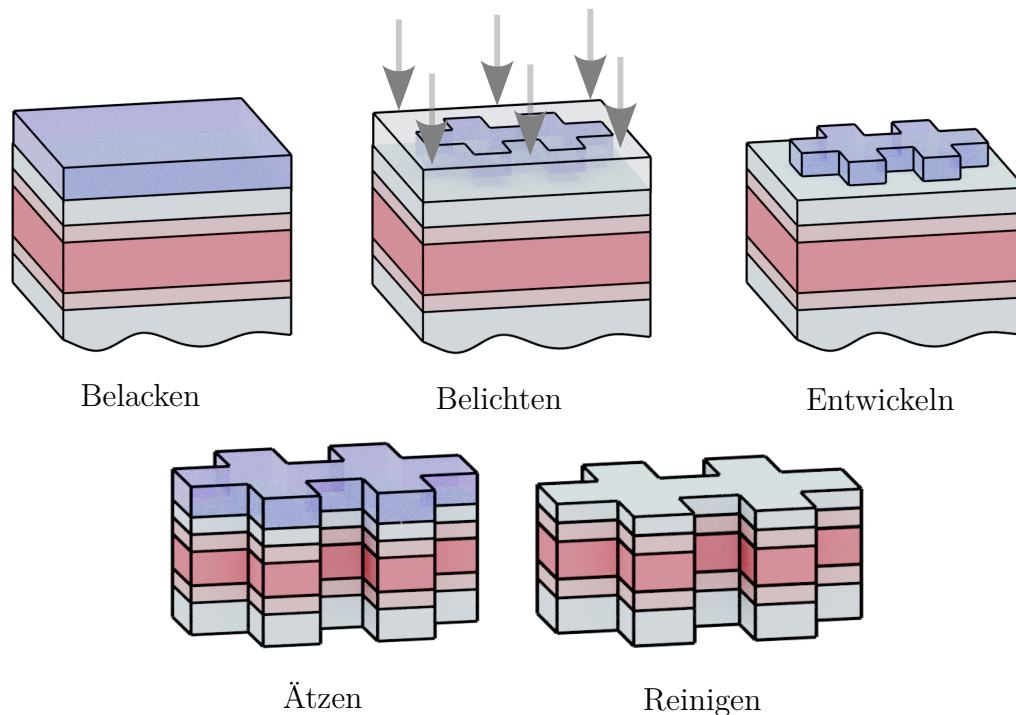


Abbildung 6.1.: Schematische Darstellung des Herstellungszyklus für die makroskopische Mesa-Struktur. Die fünf Teilbilder zeigen das Belacken, die optische Belichtung mit Maske, das Entwickeln, das nasschemische Ätzen mit Bromlösung sowie das anschließende Entfernen des Lacks (Reinigen). In diesem ersten Strukturierungsschritt wird die spätere Hall-Bar-Geometrie festgelegt. Eigene Darstellung in Anlehnung an [87].

Abbildung 6.1 zeigt diesen ersten Herstellungszyklus. Nach dem Aufbringen des Photoresists wird die spätere Mesa-Geometrie mit einer optischen Maske belichtet und anschließend entwickelt. Die freigelegten Bereiche der Heterostruktur werden daraufhin mit der Brom-Ethylenglykol-Lösung geätzt, bevor die Probe gereinigt wird. Auf diese Weise wird die makroskopische Hall-Bar-Geometrie erzeugt, auf der in den folgenden Schritten die Doppel-Gate-Struktur aufgebaut wird.

Die gezeigte Reihenfolge dieser Prozessschritte folgt dem in früheren Arbeiten an HgTe-Heterostrukturen bewährten Vorgehen. Die optische Lithographie dient hier zunächst dazu, die makroskopische Transportgeometrie mit Stromkontakten, Spannungsabgriffen und ausreichend großem Randabstand zu definieren. Die feinen Gate-Strukturen werden erst in späteren Schritten erzeugt. Erst nach diesem Zyklus ist festgelegt, in welchem Bereich der Probe der Stromfluss später geführt wird und wo die Hall-Bar liegt, in der eine 4-Punkt-Messung durchgeführt werden kann. Das nasschemische Ätzen mit Brom in Ethylenglykol entfernt anschließend die freigelegten Bereiche der Heterostruktur schonend und reproduzierbar. Gerade für HgTe hat sich das nasschemische Ätzen bewährt, da es die Materialeigenschaften weitgehend erhält und keine Störstellen einbringt. Nach dem Ätzen wird die Probe gründlich gereinigt, um die schützende Resistschicht zu entfernen.

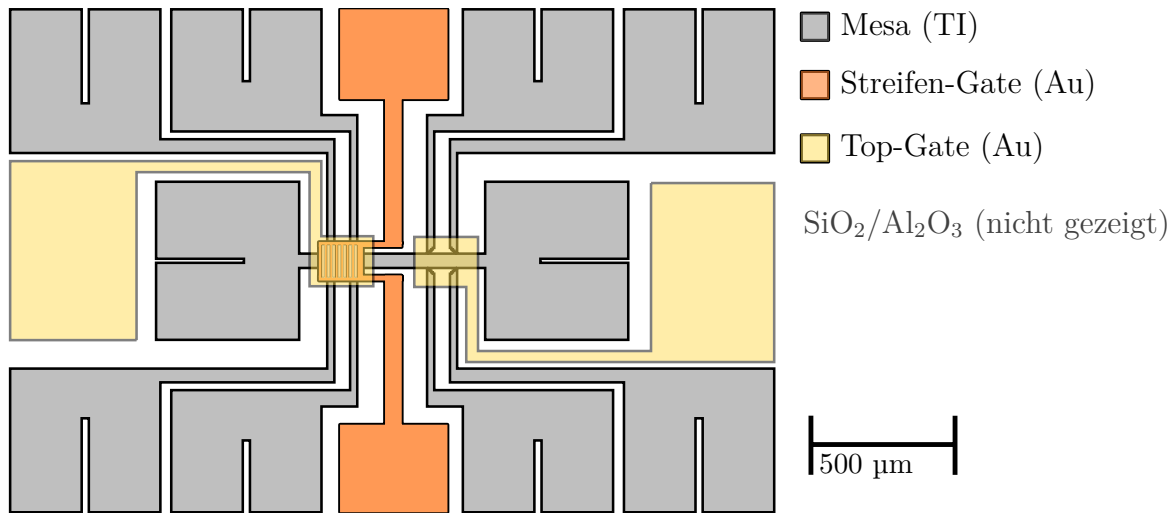


Abbildung 6.2.: Bildliche Darstellung der Probengeometrie mit strukturierter Mesa in Grau, dem Streifen-Gate in Orange und dem Top-Gate in Gelb. Insgesamt besitzt die Probe zehn Kontakte. Die beiden mittleren Kontakte dienen als Source und Drain. Die übrigen acht Kontakte sind als Spannungsabgriffe ausgeführt, sodass für jede der beiden Hall-Bars jeweils vier Kontakte für Längs- und Hall-Messungen zur Verfügung stehen. Eine Hall-Bar wird für die Messungen mit lateralem Gitter verwendet, die rechte Hall-Bar dient als Referenz. Das Streifen-Gate ist nur auf der linken Hall-Bar vorhanden und seine einzelnen Streifen sind über die beidseitigen Zuleitungen elektrisch kurzgeschlossen, sodass alle Streifen auf demselben Potential liegen. Darüber befindet sich das Top-Gate. In der rechten Hall-Bar fehlt das Streifen-Gate vollständig, sodass dort nur das planare Top-Gate aufgebracht ist. Die im Bild nicht dargestellten Oxidschichten SiO₂/Al₂O₃ trennen die Gate-Elektroden elektrisch von der HgTe-Struktur.

Die resultierende Probengeometrie ist in Abbildung 6.2 dargestellt. Im zentralen Bereich der Mesa befinden sich zwei Hall-Bars, die die links und rechts angeordneten Stromkontakte zur Stromeinspeisung (Source) und zum Stromabgriff (Drain) gemeinsam nutzen. Zusätzlich sind acht Spannungsabgriffe vorhanden, sodass für jede Hall-Bar jeweils vier Kontakte für Längs- und Hall-Messungen zur Verfügung stehen. Diese Anordnung erlaubt den direkten Vergleich zwischen einer lateral modulierten Hall-Bar und einem unmodulierten Referenzbereich auf demselben Probenstück. Wie in Abbildung 6.3 zu sehen ist, besitzt die für das eigentliche Experiment verwendete Hall-Bar eine Länge von 100 μm und eine Breite von 50 μm. Auf dieser Hall-Bar wird das laterale Gitter mit einer Gitterkonstante von $a = 500$ nm realisiert, während der Referenzbereich keine Streifen-Gates trägt. Nach dem Mesa-Ätzen wird die Probe gründlich gereinigt und die erreichte Ätztiefe überprüft, etwa über AFM- oder Dektak-Höhenmessungen. Erst danach folgt der Aufbau der Doppel-Gate-Struktur.

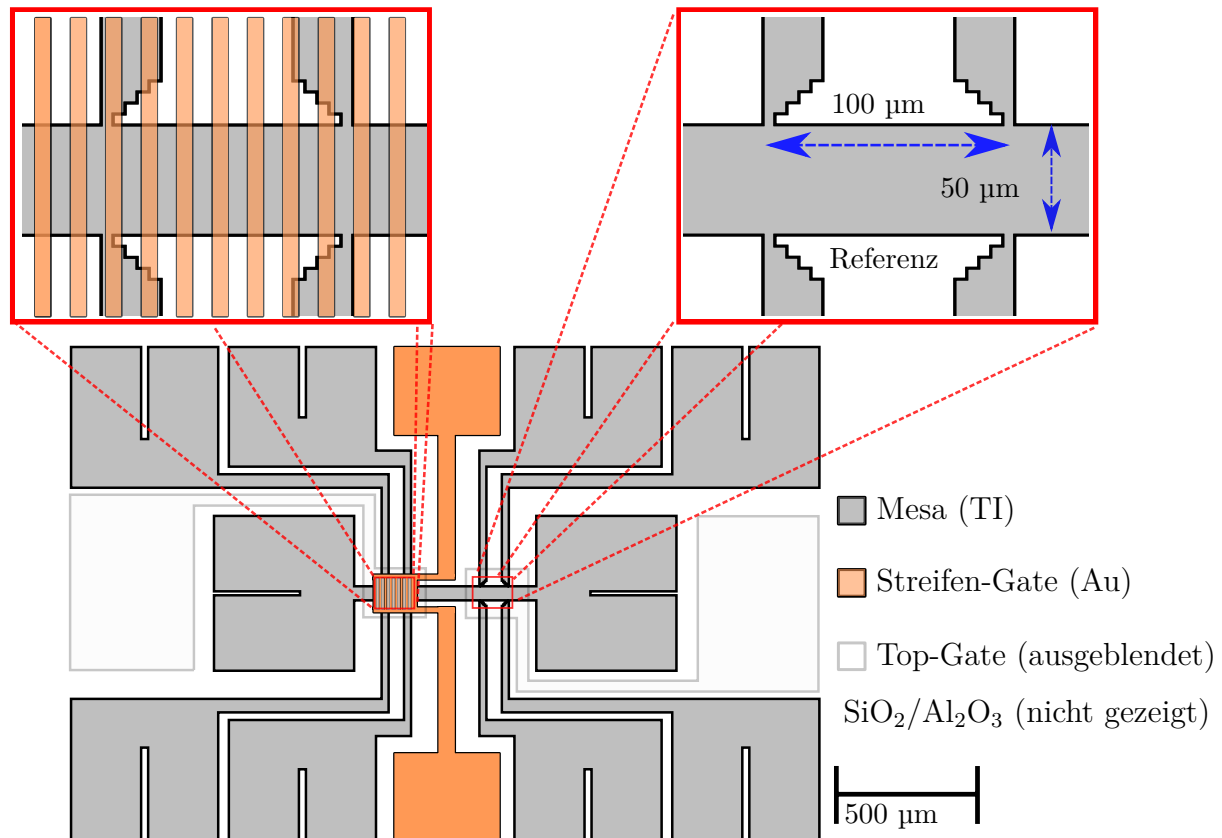


Abbildung 6.3.: Schematische Darstellung der Probengeometrie mit grauer Mesa, wobei das Top-Gate zur besseren Sichtbarkeit der lateralen Struktur ausgeblendet ist. Oberhalb der Gesamtansicht sind die beiden kleinen Hall-Bars als vergrößerte Bildausschnitte dargestellt. Links ist die für das Experiment verwendete Hall-Bar mit Streifen-Gate zu sehen. Die hier gemessene Probe weist ein laterales Gitter mit einer Gitterkonstante von $a = 500 \text{ nm}$ auf. Die Hall-Bar hat eine Länge von $100 \text{ }\mu\text{m}$ und eine Breite von $50 \text{ }\mu\text{m}$. Rechts ist der Referenzbereich gezeigt, der keine Streifen-Gates aufweist.

6.2. Herstellung der Doppel-Gate-Struktur

Nach der Definition der makroskopischen Mesa wird die Doppel-Gate-Struktur in vier Teilzyklen aufgebaut: SG.1 und SG.2 bezeichnen die Isolations- und Strukturierungsschritte des Streifen-Gates (SG), TG.1 und TG.2 die entsprechenden Schritte des Top-Gates (TG). Abbildung 6.4 fasst den Ablauf schematisch zusammen und orientiert sich in ihrer prozessschrittweisen Darstellung an der Dissertation von Maier [87]. In SG.1 wird zunächst der erste Oxidstapel zur elektrischen Isolation des späteren Streifen-Gates abgeschieden. SG.2 zeigt die anschließende Strukturierung des Streifen-Gates über Belacken, Elektronenstrahlbelichtung, Entwickeln, Metallisierung und Lift-off. In TG.1 folgt eine zweite Oxidabscheidung, die das spätere Top-Gate elektrisch vom Streifen-Gate trennt. TG.2 zeigt schließlich das Endresultat nach einem an die Top-Gate-Geometrie angepassten Wiederholen des in SG.2 gezeigten Strukturierungszyklus.

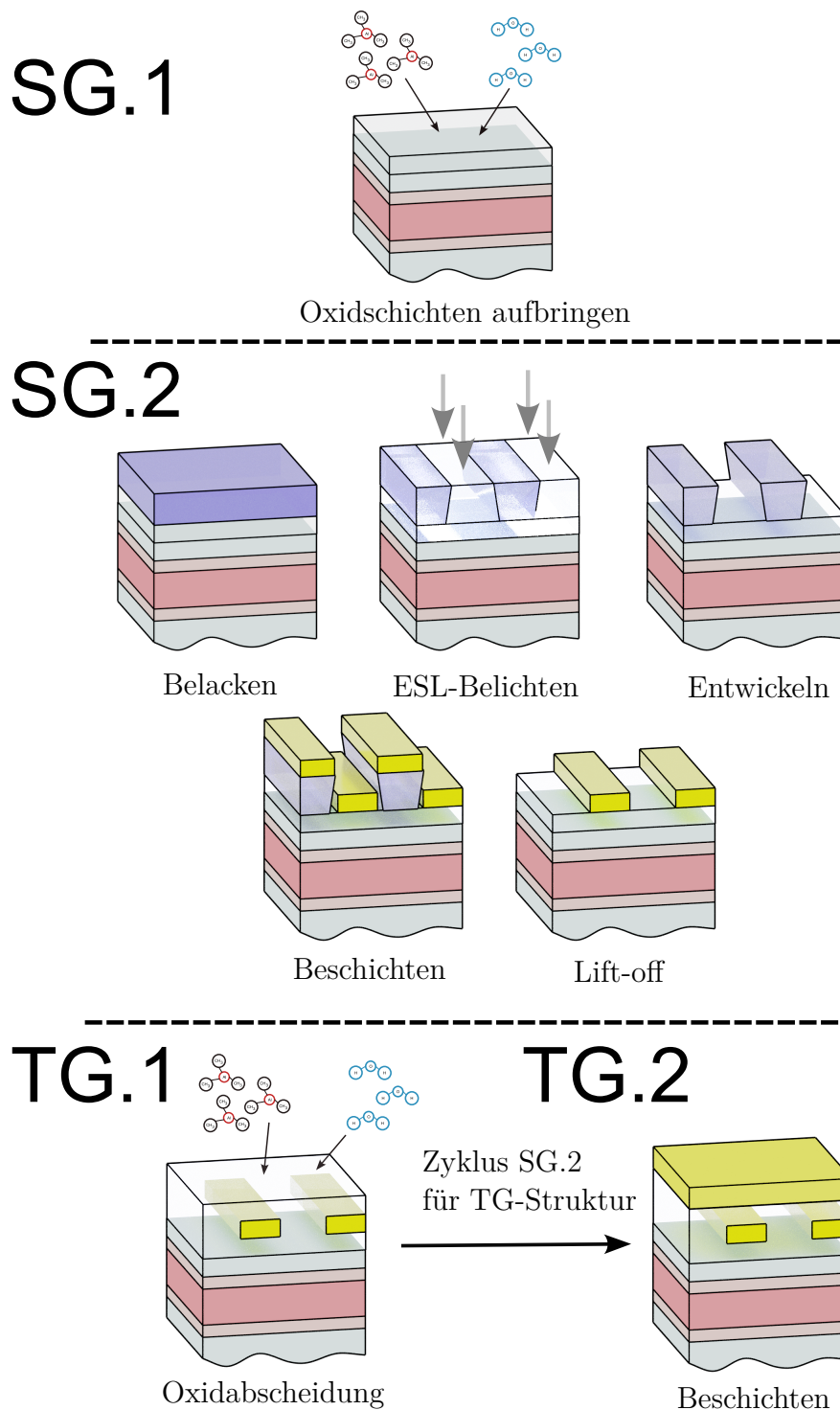


Abbildung 6.4.: Schematische Übersicht des Herstellungsablaufs der Doppel-Gate-Struktur. Die acht Teilbilder sind zu den vier Teilzyklen SG.1, SG.2, TG.1 und TG.2 zusammengefasst. In SG.1 wird der erste Oxidstapel zur elektrischen Isolation des späteren Streifen-Gates abgeschieden. SG.2 zeigt die anschließende Strukturierung des Streifen-Gates über Belacken, Elektronenstrahlbelichtung, Entwickeln, Metallisierung und Lift-off. In TG.1 folgt die zweite Oxidabscheidung zur elektrischen Isolation des darüberliegenden Top-Gates. TG.2 zeigt das Endresultat nach einem an die Top-Gate-Geometrie angepassten Wiederholen des in SG.2 gezeigten Lithographie- und Metallisierungsschritts. Eigene Darstellung in Anlehnung an [87].

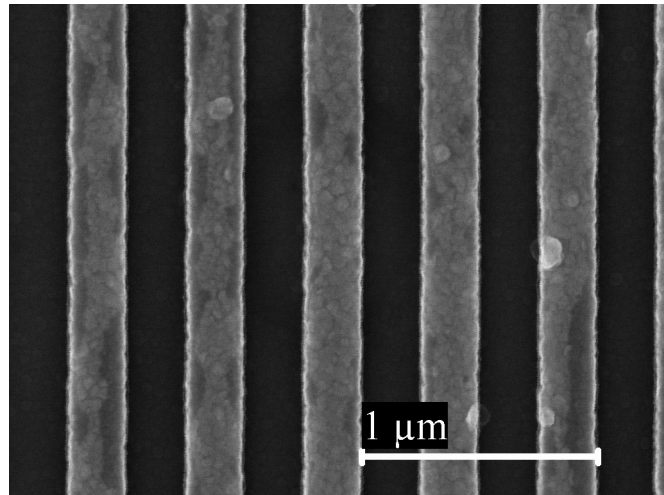
Im Folgenden werden nur diejenigen Prozessschritte etwas ausführlicher beschrieben, die für die spätere Probenqualität besonders wichtig sind. Das betrifft vor allem den Aufbau des Gate-Dielektrikums und die Herstellung der beiden Gate-Ebenen.

6.2.1. Streifen-Gate

Der kritischste Schritt nach dem Mesa-Ätzen ist der Aufbau des Gate-Dielektrikums. Gerade die ersten Zyklen der Atomlagenabscheidung (engl. Atomic Layer Deposition, ALD) hängen stark von der chemischen Beschaffenheit der CdTe-Oberfläche ab, da der Prozess über sequentielle, selbstlimitierende Oberflächenreaktionen abläuft [101]. Für luft-exponiertes CdTe wurde gezeigt, dass wasserbasiertes Beschichten mit Trimethylaluminium das Oxidwachstum von Al_2O_3 einleitet. Gleichzeitig werden vorhandene Telluroxide entfernt, und die Grenzfläche verändert sich bereits während der ersten Zyklen chemisch [102]. Das schwache Anfangswachstum von Al_2O_3 auf CdTe entsteht daher, dass die eigentliche Oxidbildung und der gleichzeitige Umbau der CdTe-Oberfläche miteinander konkurrieren, was den Aufbau der Schicht verzögern und lokal inhomogen machen kann [101, 102]. Um auf der HgTe-Heterostruktur dennoch ein homogenes und elektrisch stabiles Gate-Dielektrikum zu erhalten, wird zunächst eine 30 nm dicke SiO_2 -Schicht mittels plasmaunterstützter chemischer Gasphasenabscheidung (engl. plasma-enhanced chemical vapor deposition, PECVD) aufgebracht. Diese Schicht dient als Seedlayer für das nachfolgende Wachstum von Al_2O_3 . Sowohl die SiO_2 -Abscheidung als auch die späteren ALD-Schritte werden bei maximal 80 °C durchgeführt. Diese Begrenzung ist durch die Temperatursensibilität der HgTe-Heterostruktur vorgegeben, wirkt sich aber zugleich auf die erreichbare Oxidqualität aus, da ideale Wachstumsbedingungen für beide Prozesse üblicherweise bei höheren Temperaturen liegen. Auf den Seedlayer folgt anschließend eine 30 nm dicke Al_2O_3 -Schicht. Dieser erste Oxidstapel entspricht dem in Abbildung 6.4 gezeigten Schritt SG.1 und bildet die elektrische Isolation zwischen HgTe und dem späteren Streifen-Gate.

Der in Abbildung 6.4 gezeigte Zyklus SG.2 beschreibt die Herstellung des Streifen-Gates. Zunächst wird ein für die Elektronenstrahlolithographie geeigneter elektronenstrahlempfindlicher Resist aufgebracht. Anschließend wird das periodische Muster des Streifen-Gates in den Resist geschrieben, entwickelt und damit für die Metallisierung vorbereitet. Die Metallisierung erfolgt durch Aufdampfen einer dünnen Titanschicht und einer darüberliegenden Goldschicht. Titan verbessert die Haftung auf dem Oxid, Gold bildet die eigentliche Gate-Elektrode. Im anschließenden Lift-off werden die Metallbereiche entfernt, die sich nur auf dem Resist befinden. Auf dem Dielektrikum verbleibt damit ausschließlich die definierte periodische Streifenstruktur, die in Abbildung 6.5 anhand einer Rasterelektronenmikroskop-Aufnahme gezeigt ist. Sie bildet das untere Gate der späteren Doppel-Gate-Geometrie und legt die Gitterperiode des künstlich aufgeprägten lateralen Potentials fest. Für die spätere Funktion der Probe sind dabei die Gitterperiode, die saubere laterale Begrenzung der einzelnen Streifen und ihre korrekte Positionierung relativ zur Hall-Bar entscheidend.

Abbildung 6.5.: Raster-elektronenmikroskop-Aufnahme der auf dem unteren Gate realisierten Goldstreifen nach Zyklus SG.2. Die periodische Struktur besitzt eine Gitterkonstante von 500 nm und eine effektive Streifenbreite von etwa 250 nm. Sichtbar ist die regelmäßige laterale Metallisierung, mit der später das eindimensionale Modulationspotential in der HgTe-Heterostruktur eingestellt wird.



6.2.2. Top-Gate

Nach der Fertigstellung des Streifen-Gates folgt in TG.1 der zweite dielektrische Schritt. Erneut wird Al_2O_3 abgeschieden, hier mit einer Dicke von 100 nm, um das darunterliegende Streifen-Gate elektrisch vom darüberliegenden planaren Top-Gate zu trennen. Anschließend wird das Top-Gate lithographisch definiert und ebenfalls über eine Ti/Au-Metallisierung hergestellt. Im Prozessablauf entspricht dieser letzte Schritt dem in SG.2 gezeigten Ablauf, wird jedoch an die Geometrie des flächigen Top-Gates angepasst. Erst mit diesem Schritt ist die Doppel-Gate-Struktur vollständig. Der zweite Oxidstapel trennt beide Gate-Ebenen elektrisch voneinander. Gleichzeitig beeinflusst sein Abstand, wie stark das obere Gate kapazitiv auf den darunterliegenden Bereich der Heterostruktur wirkt.

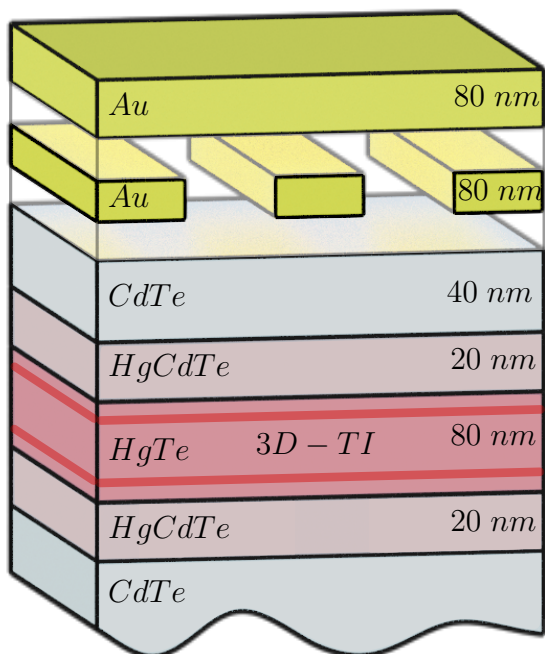


Abbildung 6.6.: Querschnitt der in dieser Arbeit verwendeten HgTe-Heterostruktur mit aufgebrachtener Doppel-Gate-Struktur nach [24]. Auf der Heterostruktur befindet sich zunächst ein dielektrischer Schichtstapel aus 30 nm SiO_2 und 30 nm Al_2O_3 , der das Streifen-Gate elektrisch gegenüber der Heterostruktur isoliert. Oberhalb des Streifen-Gates folgt eine weitere 100 nm dicke Al_2O_3 -Schicht, die das untere Gate vom darüberliegenden planaren Top-Gate trennt. Die Oxidschichten sind zur besseren Übersicht transparent dargestellt. Durch die getrennte Ansteuerung von Streifen-Gate und Top-Gate lassen sich sowohl die Stärke des Modulationspotentials als auch die Lage des Fermi-Niveaus gezielt einstellen.

Wie in Abbildung 6.6 schematisch dargestellt, besteht die resultierende Struktur aus einem unteren Streifen-Gate, das vor allem zur Erzeugung der eindimensionalen Potentialmodulation dient, und einem darüberliegenden flächigen Top-Gate, das in Kombination mit dem Streifen-Gate die Einstellung der Flächenladungsträgerdichte erlaubt, aber zugleich auch die Modulationsstärke beeinflusst.

6.3. Messaufbau

Abbildung 6.7 zeigt die elektrische Kontaktierung der Probe und den verwendeten Messaufbau. Der Transportstrom wird mit einem AC-Lock-In-Verstärker angelegt und beträgt in den hier gezeigten Messungen $I = 100 \text{ nA}$ bei einer Frequenz von $f = 13 \text{ Hz}$. Zur Stabilisierung des Transportstroms wird ein zusätzlicher hoher Vorwiderstand in Serie zur Probe geschaltet. Die longitudinalen U_{xx} und Hall-Spannungen U_{xy} werden an der modulierten Hall-Bar und am Referenzbereich getrennt abgegriffen. Die Spannungseingänge der Lock-In-Verstärker haben Eingangswiderstände von bis zu $T\Omega$, sodass die Messung der Spannungen keinen nennenswerten Stromfluss durch die Spannungsabgriffe verursacht [103, 104]. Die Gate-Spannungen für Streifen-Gate und Top-Gate werden jeweils über eine separate DC-Spannungsquelle angelegt.

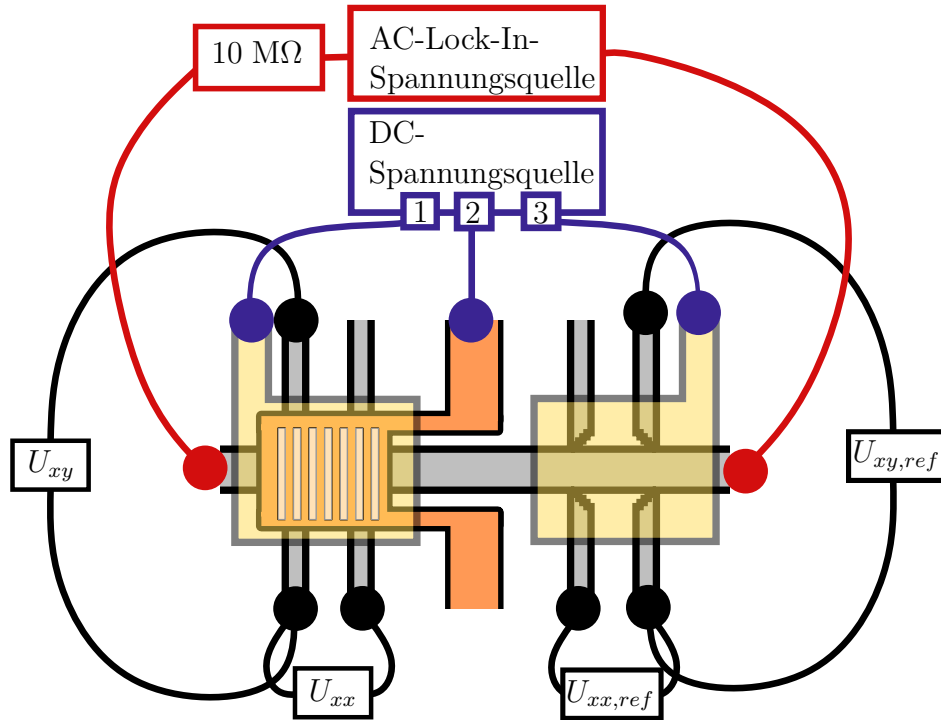


Abbildung 6.7.: Darstellung der elektrischen Kontaktierung der Probe und des verwendeten Messaufbaus. Der Transportstrom von 100 nA bei 13 Hz wird mithilfe eines AC-Lock-In-Verstärkers über eine AC-Spannung und einen $10 \text{ M}\Omega$ -Vorwiderstand angelegt. Über die roten Leitungen wird der Strom an die Source- und Drain-Kontakte der Probe angelegt. Die Spannungsabgriffe des Lock-In-Verstärkers für longitudinale und Hall-Spannungen erfolgen getrennt an der modulierten Hall-Bar und an der Referenz-Hall-Bar. Die Spannungen für Streifen-Gate und Top-Gate werden jeweils über eine separate DC-Spannungsquelle (1,2,3) eingestellt. Die Messungen finden im Kryostaten bei Temperaturen zwischen 295 mK und 1.6 K statt.

Der in Abbildung 6.8 gezeigte Aufbau basiert auf einem ^4He -Badkryostaten mit variablem Temperatureinsatz (Variable Temperature Insert, VTI) [105]. Das VTI stellt den Temperaturbereich bis etwa 1.5 K bereit und dient hier zugleich als Vorkühlstufe für ein zusätzliches ^3He -Insert. Hierzu ist das Insert über einen zusätzlichen Pumpstand und ein separates ^3He -Volumen mit der Gasführung verbunden. Die Probe ist auf einem vakuumdichten Probenstab im Insert montiert und wird zusammen mit diesem in das VTI eingeführt. Der Insertstab besitzt eine zusätzliche Hülle mit H_2 -Austauschgas. Dieses Austauschgas stellt während der Vorkühlung die thermische Ankopplung an das VTI her. Im gelb markierten Innenraum des Inserts wird ^3He an der auf etwa 1.5 K gekühlten Kondensationsstufe verflüssigt. Der normale Siedepunkt von ^3He liegt bei 3.19 K [106]. Nach vollständiger Kondensation wird die Pumpführung umgeschaltet. Wie in Abbildung 6.8 orange angedeutet, wird anschließend am ^3He -Insert gepumpt. Durch die Absenkung des Dampfdrucks kühlt die ^3He -Stufe weiter ab und erlaubt Proben Temperaturen von etwa 295 bis 300 mK. Die so erreichten Temperaturen liegen im Bereich kommerzieller ^3He -Inserts an nassen Kryostatsystemen [107].

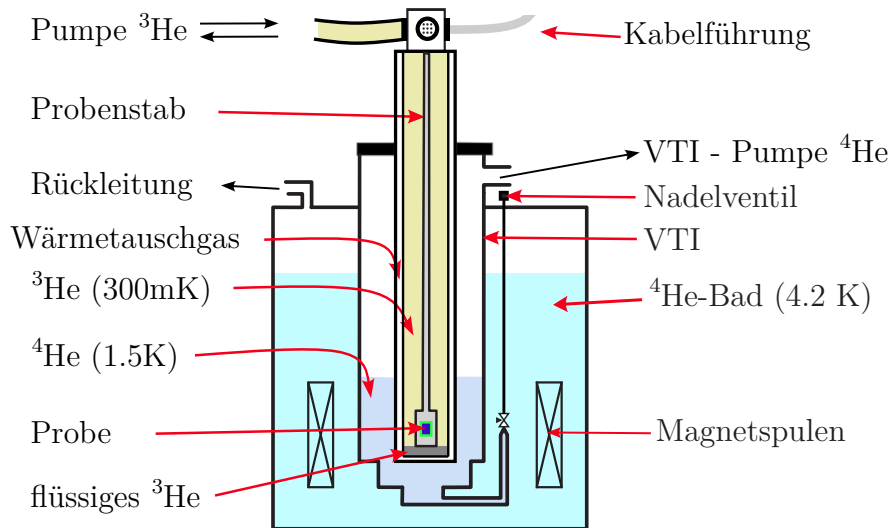


Abbildung 6.8.: Darstellung des für die Magnetotransportmessungen verwendeten ^4He -Badkryostaten mit VTI und zusätzlichem ^3He -Insert. Die Magnetspulen befinden sich im flüssigen ^4He -Bad. Der Probenstab mit der eingebauten Probe ist vakuumdicht im ^3He -Insert montiert und von einer Hülle mit Austauschgas umgeben, die während der Vorkühlung die thermische Ankopplung an das VTI herstellt. Über das Nadelventil wird ^4He aus dem Bad in das VTI geführt, sodass das Insert durch Abpumpen des ^4He bis auf etwa 1.5 K vorgekühlt werden kann. Bei einem Druck von 1 bar liegt die Kondensationstemperatur des gelb dargestellten ^3He bei etwa 3.19 K. Die Pumpführung am Helium-3-Stand wird umgeschaltet, und es wird am ^3He -Insert gepumpt. Dadurch sinkt der Dampfdruck und die Probe wird auf etwa 295 bis 300 mK abgekühlt.

6.4. Bezug zu früheren Arbeiten

Für die Einordnung der im Folgenden gezeigten experimentellen Ergebnisse sind vor allem drei frühere Arbeiten relevant. Kozlov et al. [16] untersuchten den gateabhängigen Magnetotransport in durch ein Top-Gate gesteuerten, verspannten 80 nm-HgTe-

Schichten ohne zusätzliche laterale Modulation und bilden damit den wichtigsten Referenzfall für die hier betrachteten Transportregime. Ziegler [18, 46] behandelte verwandte HgTe-basierte Nanostrukturen und zeigte, wie sich verschiedene Transportkanäle im Magnetotransport voneinander unterscheiden lassen. Für modulationsinduzierte Transporteffekte ist außerdem die Dissertation von Maier [87] wichtig, in der geometrische Resonanzen in einem HgTe-basierten dreidimensionalen topologischen Isolator mit zweidimensionaler Modulation untersucht wurden.

Die vorliegende Arbeit behandelt gespannte 80 nm-HgTe-Schichten mit eindimensionaler lateraler Modulation. Untersucht wird, wie sich Oberflächenzustände, Bulk-Kanäle und das periodische Potential gemeinsam im Magnetotransport zeigen und wie die Dirac-Fermionen der Oberfläche auf die Modulation reagieren.

7. Experimentelle Ergebnisse

Die Gate-Spannung verschiebt das Fermi-Niveau der verspannten HgTe-Schicht durch Valenzband, Bulk-Bandlücke und Leitungsband und verändert damit die jeweils beteiligten Transportkanäle. Dadurch wechseln sich Regime mit Bulk-Löchern, Dirac-artigen Oberflächenzuständen und Bulk-Elektronen ab, teilweise mit parallelen Beiträgen mehrerer Kanäle. Diese Gate-Abhängigkeit wird zunächst im unmodulierten Referenzbereich über Längs- und Hall-Widerstand sowie SdH-Oszillationen charakterisiert. Daraus werden Ladungsträgerdichten, Beweglichkeiten und mittlere freie Weglängen bestimmt und die Transportregime voneinander abgegrenzt. Auf dieser Grundlage werden anschließend die Messungen an den lateral modulierten Strukturen ausgewertet, insbesondere die Kommensurabilitätsoszillationen im Leitungsband, in der Bulk-Bandlücke und im Valenzband.

7.1. Charakterisierung des unmodulierten Referenzbereichs

Zur Einordnung der im Folgenden diskutierten Gate-Regime wird auf die für verspannte HgTe-Schichten etablierte Transportanalyse zurückgegriffen [16, 33, 46, 90]. Auf dieser Grundlage lassen sich Leitungsband, Bulk-Bandlücke und Valenzband im gateabhängigen Magnetotransport voneinander abgrenzen. In Indizes, Achsenbeschriftungen und kompakten Abbildungsbeschriftungen werden diese Bereiche mit CB für das Leitungsband, gap für die Bulk-Bandlücke und VB für das Valenzband bezeichnet. Dabei wurden im Wesentlichen vier relevante Ladungsträgerbeiträge identifiziert: Bulk-Löcher im Valenzband, Bulk-Elektronen im Leitungsband sowie Dirac-artige Elektronen an der oberen und unteren Oberfläche der HgTe-Schicht. Magnetotransportmessungen erlauben es damit, aus Widerstands-, Hall- und Oszillationsdaten die zugehörigen Leitfähigkeiten, Ladungsträgerdichten und Beweglichkeiten zu bestimmen und ihre Gate-Abhängigkeit zu charakterisieren.

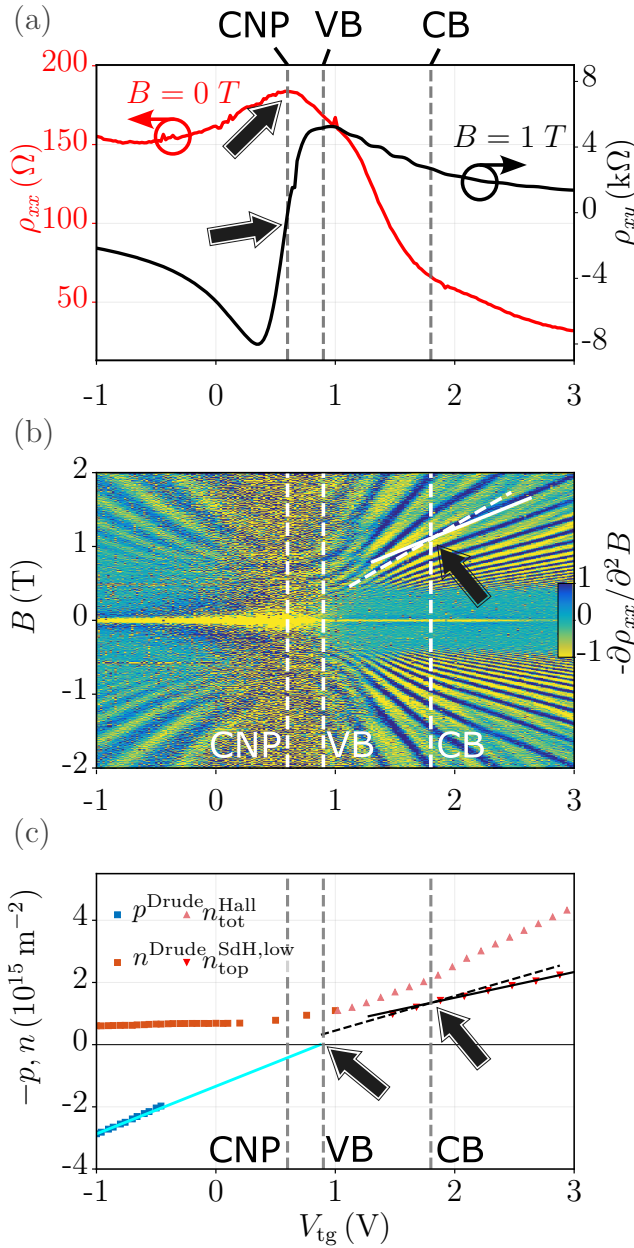


Abbildung 7.1.: Charakterisierung der Probe im Bereich der Referenz-Hall-Bar ohne Streifen-Gate, aufgenommen bei einer Temperatur von $T = 1.4$ K. In allen Teilabbildungen ist auf der x-Achse die Top-Gate-Spannung V_{tg} aufgetragen. Die drei vertikalen gestrichelten Linien markieren den Ladungsneutralitätspunkt (CNP), die Valenzbandkante (VB) und die Leitungsbandkante (CB). Die Pfeile markieren die experimentellen Kriterien zur Festlegung dieser Positionen: das Maximum von ρ_{xx} und den Vorzeichenwechsel von ρ_{xy} am CNP sowie Änderungen der Fächerstruktur beziehungsweise der extrahierten Ladungsträgerdichten an den Bandkanten. (a) Die rote Kurve zeigt den spezifischen Längswiderstand $\rho_{xx}(V_{tg})$ bei $B = 0$ T, die zugehörige Skala ist auf der linken y-Achse dargestellt. Die schwarze Kurve zeigt den Hall-Widerstand $\rho_{xy}(V_{tg})$ bei $B = 1$ T, die entsprechende Skala befindet sich auf der rechten y-Achse. (b) Negative zweite Ableitung des Magnetowiderstands der Referenzfläche (nur Top-Gate), gemessen im Magnetfeldbereich von $B = -2$ T bis 2 T. (c) Ladungsträgerdichten der Elektronen n_{top} , zugeordnet zur oberen Oberfläche und bestimmt aus den Niedrigfeld-SdH-Oszillationen, sowie der gesamten Elektronendichte n_{tot} im Leitungsband, bestimmt aus der Hall-Steigung. Die Ladungsträgerdichten der Löcher p^{Drude} und Elektronen n^{Drude} im Valenzband wurden mithilfe des Zwei-Ladungsträger-Drude-Modells bestimmt.

Die im Referenzbereich gemessenen Ergebnisse verifizieren die bereits in früheren Arbeiten beschriebenen Charakteristika des verspannten HgTe und sind in Abbildung 7.1 zusammengefasst. Zunächst zeigt Abbildung 7.1(a) die Gate-Abhängigkeit des Längswiderstands $\rho_{xx}(V_{tg})$ bei $B = 0$ T sowie des Hallwiderstands $\rho_{xy}(V_{tg})$ bei $B = 1$ T. Beide Kurven erlauben bereits eine erste Einordnung der verschiedenen Transportregime. Der Ladungsneutralitätspunkt (CNP) ist durch das Maximum von ρ_{xx} sowie den Vorzeichenwechsel von ρ_{xy} klar erkennbar. Die zusätzlich eingezeichneten gestrichelten Linien markieren die Valenzbandkante (VB) und die Leitungsbandkante (CB) und helfen bei der Orientierung der anderen Teilbilder. Wird ohne angelegtes Magnetfeld die Gate-Spannung aus dem Valenzband in Richtung der Bulk-Bandlücke erhöht, sinkt der Längswiderstand deutlich ab, was auf den Übergang zu einem Regime mit dominieren-

dem Transport durch hochbewegliche Dirac-artige Oberflächenzustände hinweist. Wird die Gate-Spannung weiter erhöht, tritt das System in das Leitungsband ein und der Längswiderstand nimmt leicht zu. Dieser Anstieg ist in Abbildung 7.1(a) bei $B = 0$ T nur schwach ausgeprägt, wird jedoch bei angelegtem Magnetfeld an derselben Position deutlich sichtbar. Er lässt sich auf den zusätzlichen Beitrag von Bulk-Elektronen mit geringerer Beweglichkeit zurückführen, sowie eine verstärkte Streuung von Dirac-Elektronen an Bulk-Zuständen. [16, 18, 25, 87, 90]

Die Charakterisierung des Systems lässt sich durch Anlegen eines Magnetfelds erweitern, wie in Abbildung 7.1(b) dargestellt ist. Aufgrund der hohen Beweglichkeit der Ladungsträger treten ausgeprägte Shubnikov-de-Haas-Oszillationen auf, deren Abstände von der Ladungsträgerdichte abhängen. Im Farbplot der zweiten Ableitung des Magnetowiderstands werden diese Oszillationen besonders deutlich sichtbar. Dadurch können auch schwächer aufgelöste Beiträge erkannt und analysiert werden, die im direkten Widerstandssignal wegen ihrer geringeren Amplitude oder eines erhöhten Hintergrundwiderstands leicht übersehen würden. Der Farbplot selbst weist eine Datenpunktauflösung von 200×658 auf. Dies bedeutet, dass der Plot entlang der horizontalen Achse ($V_{tg} = -1$ V bis 3 V) 200 Messpunkte und entlang der vertikalen Achse ($B = -2$ T bis 2 T) 658 Messpunkte darstellt.

Die Oszillationen setzen ab Magnetfeldern von etwa $B \gtrsim 0.5$ T ein und bestätigen sowohl die hohe Qualität der Referenz-Hall-Bar als auch die gute Auflösung der Landau-Quantisierung. Gleichzeitig zeigt ihre Gate-Abhängigkeit, dass die hochbeweglichen Oberflächenzustände bereits bei vergleichsweise kleinen Magnetfeldern zum Magnetotransport beitragen, während sich der löcherdominierte Bereich im Valenzband klar von den Elektronenregimen abgrenzen lässt. Besonders wichtig ist, dass im Landau-Fächer auch der Übergang von der Bulk-Bandlücke in das Leitungsband erkennbar wird: Ein Knick der Fächerstruktur zeigt an, dass ab dieser Position zusätzlich Zustände im Leitungsband besetzt werden.

Zur Beschreibung der Gate-Abhängigkeit ist es hilfreich, die Füllrate

$$\alpha = \frac{\partial n}{\partial V_g} \quad (7.1)$$

einzuführen. Sie gibt an, wie stark sich die Ladungsträgerdichte eines bestimmten Kanals mit der Gate-Spannung ändert und ist damit eine kapazitive Größe. Diese Füllrate ist hier nicht mit dem Landau-Füllfaktor ν zu verwechseln.

In der Bulk-Bandlücke wird die durch das Top-Gate eingebrachte zusätzliche Ladung im Wesentlichen auf die obere und untere Oberfläche verteilt. Beim Eintritt in das Leitungsband werden zusätzlich Bulk-Elektronen besetzt. Obwohl sich die Besetzung einzelner Zustände teilweise ändert, bleibt die Gesamtfüllrate näherungsweise konstant

$$\alpha_{\text{tot}} = \alpha_{\text{top}} + \alpha_{\text{bot}} + \alpha_{\text{bulk}}. \quad (7.2)$$

Da ein Teil der zusätzlich eingebrachten Ladung nun in Bulk-Zustände geht, verringert sich die partielle Füllrate der oberen Oberfläche. Genau dies zeigt sich als Knick der Niedrigfeld-SdH-Fächer und als kleinere Steigung von $n_{\text{top}}(V_{tg})$ oberhalb der Leitungsbandkante [16, 18].

Die in Abbildung 7.1(c) dargestellten Ladungsträgerdichten wurden aus den Abstän-

den der SdH-Oszillationen sowie aus separaten, hier nicht gezeigten Hall-Messungen bestimmt. Oberhalb der Valenzbandkante lassen sich die Hall-Messungen bei kleinen Magnetfeldern linear fitten, sodass aus der Hall-Steigung die gesamte Elektronendichte n_{tot} im Leitungsband gewonnen werden kann. Die Elektronendichte der oberen Oberfläche n_{top} wird dagegen aus den hier gezeigten Niedrigfeld-SdH-Oszillationen extrahiert. In Abbildung 7.1(c) ist n_{tot} durch rote, nach oben gerichtete Dreiecke und n_{top} durch rote, nach unten gerichtete Dreiecke dargestellt. Dabei zeigt sich, dass n_{top} im Leitungsband deutlich kleiner ist als n_{tot} , was auf zusätzliche Elektronenbeiträge der unteren Oberfläche und insbesondere auf einen ansteigenden Anteil von Bulk-Elektronen hinweist. Der gestrichelte schwarze Fit beschreibt die Gate-Abhängigkeit der Elektronen der oberen Oberfläche in der Bulk-Bandlücke, während der durchgezogene schwarze Fit die entsprechende Entwicklung der Elektronen der oberen Oberfläche im Leitungsband hervorhebt. Der Schnittpunkt beider Geraden markiert die Leitungsbandkante. Bei hinreichend hohen Magnetfeldern wäre zu erwarten, dass die aus den SdH-Oszillationen bestimmte Elektronendichte die Gesamtdichte vollständiger widerspiegelt. Entsprechende Hochfeldmessungen wurden im Rahmen dieser Arbeit jedoch nicht durchgeführt.

Im Valenzband erfolgt die Auswertung dagegen nicht allein über die Hall-Steigung, sondern über die kombinierte Analyse von Hall- und Längswiderstand. Mithilfe des Zwei-Ladungsträger-Drude-Modells (siehe Kapitel 5.4) werden dort die Ladungsträgerdichten und Beweglichkeiten der Bulk-Löcher p^{Drude} und der Elektronen n^{Drude} bestimmt. Dabei setzen sich die Elektronen im Valenzband aus besetzten Zuständen der unteren und oberen Oberfläche zusammen, während die Löcher ausschließlich im Bulk besetzt sind. Die daraus extrahierten Ladungsträgerdichten sind in Abbildung 7.1(c) als blaue Vierecke für p^{Drude} und rote Vierecke für n^{Drude} dargestellt. Die Valenzbandkante lässt sich abschätzen, indem die Lochdichte linear extrapoliert wird. Auf diese Weise kann auch der Ladungsneutralitätspunkt gekennzeichnet werden, für den $n|_{V_{tg}=V_{tg}^{\text{CNP}}} = p|_{V_{tg}=V_{tg}^{\text{CNP}}}$ gilt.

Beweglichkeiten und mittlere freie Weglängen

Die aus den Transportdaten bestimmten Beweglichkeiten sowie die daraus abgeleiteten mittleren freien Weglängen der Ladungsträger werden in Abbildung 7.2 dargestellt. An der Leitungsbandkante erreicht die Beweglichkeit der Elektronen Werte von bis zu $\mu_n \approx 4.5 \cdot 10^5 \text{ cm}^2/(\text{Vs})$, während Löcher im Valenzband maximal etwa $\mu_p \approx 1.8 \cdot 10^5 \text{ cm}^2/(\text{Vs})$ erreichen. Die mittlere freie Weglänge der Elektronen mit $l_n \approx 3.5 \mu\text{m}$ an der Leitungsbandkante ist somit auch deutlich größer als die maximale mittlere freie Weglänge der Löcher mit $l_p \approx 1 \mu\text{m}$. Darüber hinaus markiert die Gate-Abhängigkeit der Beweglichkeiten erneut die relevanten Bandübergänge: Die Valenzbandkante wird durch das Verschwinden der Lochbeweglichkeit sichtbar, während sich die Leitungsbandkante in einer charakteristischen Struktur der Elektronenbeweglichkeit bemerkbar macht.

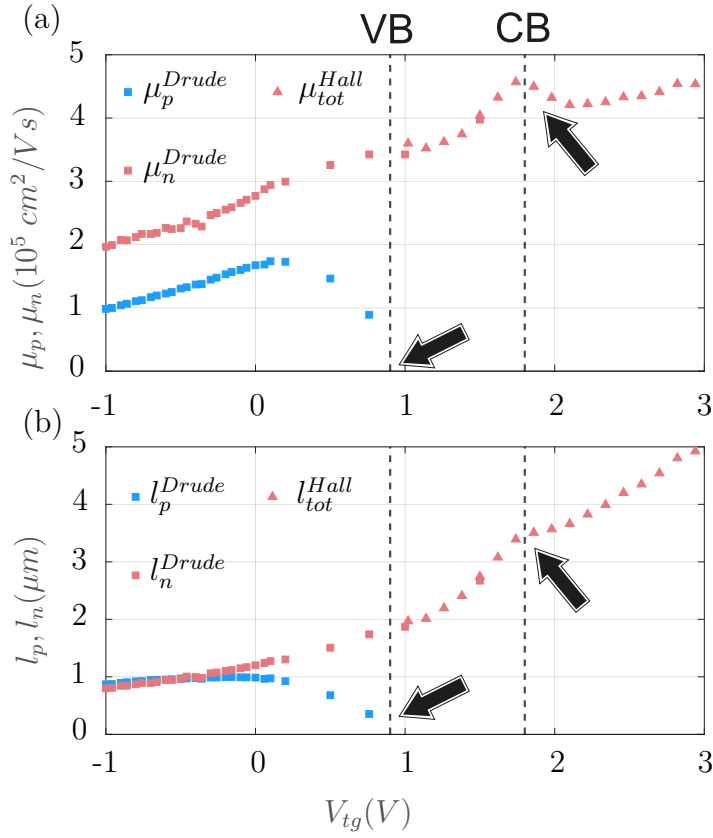


Abbildung 7.2.: Beweglichkeiten (a) und mittlere freie Weglängen (b) der Referenz-Hall-Bar als Funktion der Top-Gate-Spannung V_{tg} . Die Valenzbandkante und insbesondere die Leitungsbandkante sind durch charakteristische Strukturen in der Beweglichkeit erkennbar. Die Valenzbandkante zeigt sich zusätzlich an der Gate-Spannung, bei der die Lochbeweglichkeit verschwindet. Die roten Dreiecke wurden aus Fits des Hall-Widerstands bestimmt. Die roten Vierecke zeigen die Elektronenbeweglichkeit und die blauen Vierecke die Lochbeweglichkeit. Beide wurden mit dem Zwei-Ladungsträger-Drude-Modell extrahiert.

7.2. Einstellung des Modulationspotentials mit der Doppel-Gate-Struktur

Analyse der Gates

Um die Funktionalität und Zuverlässigkeit der Gates sicherzustellen, wurden sowohl das Streifen-Gate als auch das Top-Gate unabhängig voneinander geprüft. Es wurde untersucht, ob die Gate-Isolierung intakt ist. Zunächst wurde der Gate-Leckstrom gemessen, indem eine Spannung am Gate angelegt und der resultierende Stromfluss durch das Oxid erfasst wurde. Beide Gates wurden unabhängig voneinander geprüft, während das unbeteiligte Gate auf Floating-Potential gelegt wurde. Im Vergleich zum Streifen-Gate muss das elektrische Feld des Top-Gates eine zusätzliche Oxidschicht durchdringen, wie im Querschnitt der Doppel-Gate-Struktur in Abbildung 6.6 gezeigt.

Die Ergebnisse in Abb. 7.3(a) zeigen, dass das Oxid unter den Streifen eine Spannung von bis zu 4 V ohne Auffälligkeiten aushält. Der gemessene Strom lag im Bereich von 0 bis 4 V bei etwa 40 pA und damit nahe der Messgrenze beziehungsweise der Offset-Baseline. Daraus ergibt sich bei 4 V eine untere Grenze für den Isolationswiderstand von $R_{\text{iso}} > 100 \text{ G}\Omega$. Da die Transportmessungen an der Probe mit 100 nA durchgeführt werden, sind etwa 40 pA als vernachlässigbar zu betrachten und in realen Systemen üblich. In Abbildung 7.3(b) wurde eine identische Messung für das Top-Gate durchgeführt, jedoch mit einer Spannung von bis zu 6 V. Der Leckstrom erwies sich auch hier als vernachlässigbar klein, und es ergibt sich bei 6 V eine untere Grenze für den Isolationswiderstand von $R_{\text{iso}} > 150 \text{ G}\Omega$.

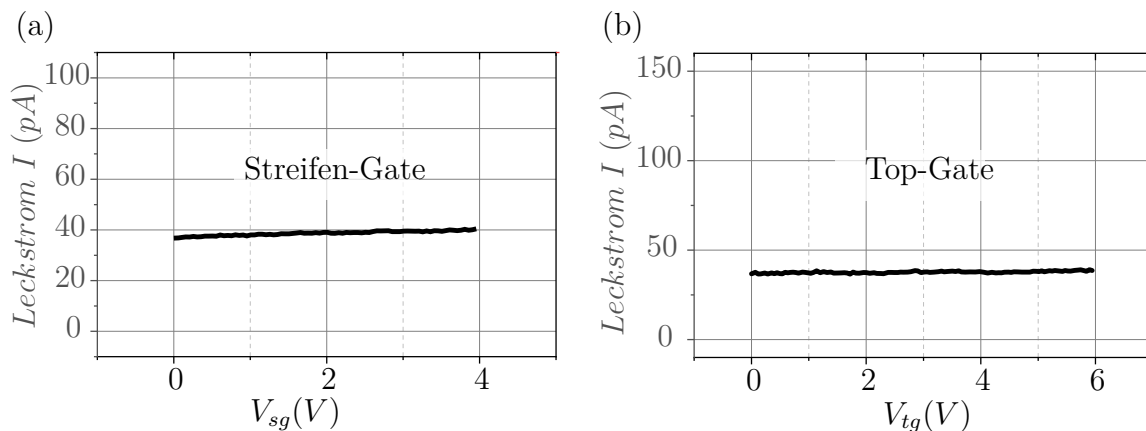


Abbildung 7.3.: Messung des Leckstroms der Gates. Die Graphen zeigen den Leckstrom in Abhängigkeit von der Gate-Spannung. (a) Die Streifen-Gate-Spannung wurde im Bereich von $V_{sg} = 0 \text{ V}$ bis 4 V geprüft, während der Leckstrom gemessen wurde. Es zeigt sich, dass das Oxid einen Widerstand von mindestens $100 \text{ G}\Omega$ aufweist. (b) Analog wurde das Top-Gate im Bereich von $V_{tg} = 0 \text{ V}$ bis 6 V geprüft.

Hysteresis-Effekte

Wie in Abschnitt 7.1 gezeigt, lässt sich das Fermi-Niveau mithilfe eines Top-Gates einstellen. In realen Messungen wird üblicherweise dieselbe Fermi-Position beziehungsweise dieselbe Gate-Spannung als Startpunkt gewählt, um Hysteresis und damit verbundene Verschiebungen in den Messdaten zu minimieren. Bei Strukturen mit nur einem Top-Gate ist diese Problematik vergleichsweise leicht zu kontrollieren und daher

meist von untergeordneter Bedeutung. Bei strukturierten Doppel-Gate-Strukturen ist die Situation hingegen komplizierter, da die Hysterese nicht nur von einer einzelnen angelegten Spannung, sondern von der Kombination beider Gates abhängt. Insbesondere bei der Aufnahme einer Gate-Map, anhand derer im Nachhinein ein Bereich mit konstantem Modulationspotential identifiziert werden soll, muss dieser Effekt berücksichtigt werden. Bei Streifen-Gates mit Bor-Nitrid als Isolationsschicht scheint dieses Problem deutlich schwächer ausgeprägt zu sein [75, 78]¹. Außerdem ist in der vorliegenden Arbeit nicht eindeutig geklärt, ob die Hysterese ausschließlich durch das aufgewachsene Oxid verursacht wird oder ob auch die Grenzfläche zwischen CdTe und Oxid beteiligt ist. In beiden Bereichen können Defekte Ladungen einfangen und so eine Hysterese hervorrufen.

Die hier verwendeten Oxidschichten SiO_2 und Al_2O_3 wurden bereits in anderen Arbeiten mit einzelnen Top-Gates untersucht, unter anderem auch in Kombination mit Materialien wie GaAs. Da dabei ebenfalls Hystereseeffekte beobachtet wurden, liegt nahe, dass die Hysterese im vorliegenden Fall hauptsächlich durch das Oxid verursacht wird [108, 109]. Diese Defekte können beispielsweise im Al_2O_3 aufgrund von Gitterfehlanpassungen entstehen, die während des Wachstumsprozesses auftreten. Um die Probe nicht zu beschädigen, wird der hier verwendete Aufwuchsprozess von AlOx bei 80°C durchgeführt. Es ist jedoch bekannt, dass die Qualität des Oxids bei höheren Temperaturen verbessert werden könnte, was wiederum zu einer geringeren Dichte von Defektstellen führen würde [110].

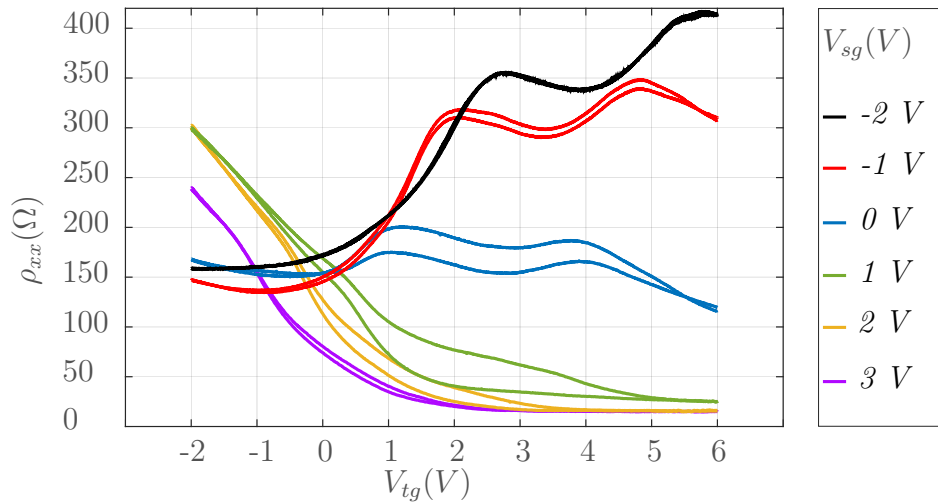


Abbildung 7.4.: Hystereseverhalten der Doppel-Gate-Struktur bei konstanter Streifen-Gate-Spannung V_{sg} und Hin- sowie Rückswep der Top-Gate-Spannung V_{tg} . Gezeigt sind sechs Messungen für unterschiedliche konstante Werte von V_{sg} . Der jeweils in beide Richtungen durchlaufene Sweep zeigt, dass Vorwärts- und Rückwärtskurven nicht aufeinander fallen. Stattdessen hängt die Lage der Kurven und damit die effektive elektronische Konfiguration der Probe von der Sweep-Richtung und von der zuvor angelegten Spannungsfolge ab. Die Hysterese fällt dabei für die verschiedenen konstanten Streifen-Gate-Spannungen unterschiedlich stark aus, was zeigt, dass sie nicht nur durch ein einzelnes Gate, sondern durch die Kombination beider Gates bestimmt wird.

¹Der Herstellungsaufwand ist dabei jedoch höher, da das Bor-Nitrid zunächst exfoliert und anschließend nach geeigneten Flocken mit lateralen Abmessungen von etwa $50\mu\text{m} \times 100\mu\text{m}$ gesucht werden muss.

Bei der hier verwendeten Streifen-Gate- und Top-Gate-Struktur entstehen aufgrund der Streifen inhomogene Grenzflächen. Zudem gibt es durch die beiden Gate-Strukturen auch mehr Oxid, was eine eigenständige Analyse des Hystereseverlaufs erfordert. In Abbildung 7.4 sind Hysterese-Kurven gezeigt, bei denen die Streifen-Gate-Spannung jeweils auf einen festen Wert gesetzt und die Top-Gate-Spannung im Bereich von $V_{tg} = -2\text{ V}$ bis 3 V in Hin- und Rückrichtung variiert wird.

Dadurch lässt sich untersuchen, wie der Hystereseverlauf vom gewählten Arbeitspunkt des Streifen-Gates abhängt. Insbesondere für fest eingestellte Streifen-Gate-Spannungen von $V_{sg} = 0\text{ V}$ und $V_{sg} = 1\text{ V}$ zeigt sich eine deutliche Abweichung zwischen Hin- und Rücksweep. Bei anderen Streifen-Gate-Spannungen, beispielsweise bei $V_{sg} \approx -1\text{ V}$, ist die Hysterese weniger stark ausgeprägt, jedoch weiterhin klar erkennbar. Die Sweep-Geschwindigkeit wurde bereits hinreichend klein gewählt, sodass eine weitere Verringerung keinen messbaren Einfluss mehr auf das Ergebnis hatte. Die Abbildung verdeutlicht damit, dass Hysterese-Effekte bei der Auswertung von Gate-Maps sowie bei Sweeps entlang konstanten Modulationspotentials explizit berücksichtigt werden müssen.

7.2.1. Gateabhängigkeit unterschiedlicher Perioden und Symmetrien

In der Doppel-Gate-Struktur wird das Fermi-Niveau über die beiden Gate-Spannungen elektrostatisch eingestellt. Das Streifen-Gate gibt eine lateral periodische Metallstruktur vor, während das darüberliegende Top-Gate vor allem in den Bereichen zwischen den Streifen an die HgTe-Schicht koppelt. Dadurch hängt die Gate-Map nicht nur von den angelegten Spannungen, sondern auch von der Periode und der Streifenbreite des Streifen-Gates ab. In Abbildung 7.5 sind drei Gate-Maps für unterschiedliche Geometrien dargestellt. In allen Fällen wurde ohne Magnetfeld gemessen, sodass der dargestellte Schichtwiderstand die gateabhängige Verschiebung der Transportregime zeigt.

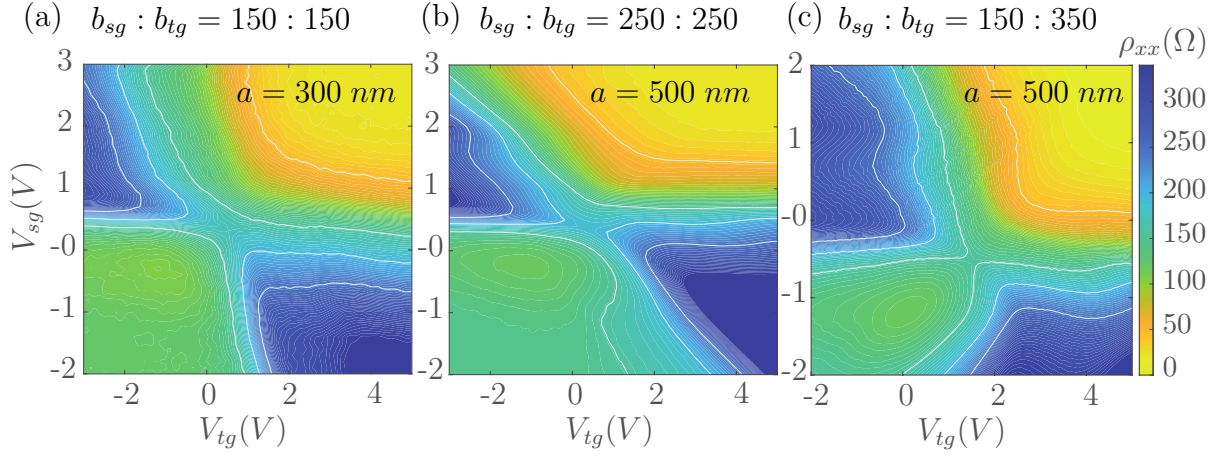


Abbildung 7.5.: Gate-Charakterisierung verschiedener Doppel-Gate-Übergitterstrukturen, bestehend aus einem Streifen-Gate und einem flächigen Top-Gate. Dargestellt ist der spezifische Längswiderstand ρ_{xx} als Funktion der Top-Gate-Spannung V_{tg} (x-Achse) und der Streifen-Gate-Spannung V_{sg} (y-Achse). Der Widerstand ist farbkodiert dargestellt. Zusätzlich heben weiße Höhenlinien Bereiche gleichen Widerstands hervor. Alle Messungen wurden bei einer Temperatur von $T = 1.7$ K aufgenommen. Die untersuchten Proben unterscheiden sich durch die Gitterperiode a , die Breite des Streifen-Gates b_{sg} sowie die Breite der Zwischenbereiche b_{tg} , in denen das Top-Gate direkt auf die Heterostruktur wirkt.

- (a) Probe mit Periode $a = 300$ nm und symmetrischer Geometrie $b_{sg} : b_{tg} = 150$ nm : 150 nm.
- (b) Probe mit Periode $a = 500$ nm und symmetrischer Geometrie $b_{sg} : b_{tg} = 250$ nm : 250 nm.
- (c) Probe mit Periode $a = 500$ nm und asymmetrischer Geometrie $b_{sg} : b_{tg} = 150$ nm : 350 nm.

Der Vergleich der drei Gate-Maps verdeutlicht den Einfluss der Gate-Geometrie auf die elektrostatische Kopplung der Doppel-Gate-Struktur. Das Streifen-Gate koppelt stärker an die Heterostruktur als das flächige Top-Gate. Ursache ist die geringere Oxiddicke zwischen Streifen-Gate und HgTe-Struktur ($\text{SiO}_2/\text{Al}_2\text{O}_3 = 30$ nm/30 nm) im Vergleich zum Top-Gate ($\text{SiO}_2/\text{Al}_2\text{O}_3 = 30$ nm/130 nm). Entsprechend ist am Streifen-Gate eine kleinere Spannung ausreichend, um ein vergleichbares elektrisches Potential an der Materialoberfläche zu erzeugen. Diese unterschiedliche kapazitive Einkopplung spiegelt sich in der Form und Neigung der Gate-Maps wider. Für die symmetrischen Geometrien in Abbildung 7.5(a) und (b) zeigt sich dabei ein nahezu identisches Verhalten. Wird bei gleicher Periode von $a = 500$ nm die Streifenbreite auf $b_{sg} = 150$ nm reduziert, wie in Abbildung 7.5(c), vergrößert sich der Zwischenbereich zwischen den Streifen. Dadurch nimmt die Einkopplung des Top-Gates zu, sodass sich die Beiträge von Streifen- und Top-Gate an das effektive Potential einander annähern. Experimentell äußert sich dies in einer stärkeren Top-Gate-Abhängigkeit, einer leichten Verdrehung der Gate-Map sowie in einer im dargestellten Bereich ausgeprägteren Symmetrie bezüglich der Diagonalen. Gleichzeitig verschiebt sich der Bereich hohen Widerstands in Richtung kleinerer V_{tg} . Die Variation der Streifenbreite verändert damit nicht nur die relative kapazitive Kopplung beider Gates, sondern auch die Form des resultierenden lateralen Modulationspotentials.

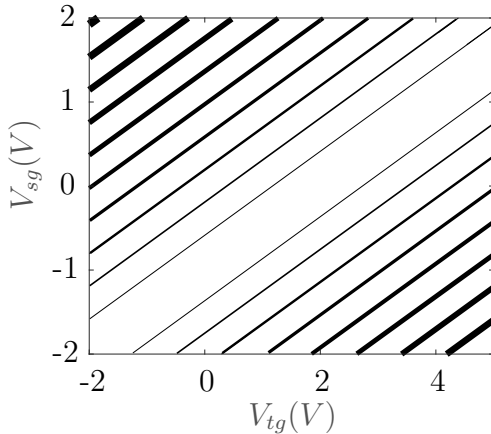


Abbildung 7.6.: Darstellung der abgeschätzten Richtung konstanten Modulationspotentials als Funktion der Top-Gate-Spannung und der Streifen-Gate-Spannung. Die Konturlinien markieren Bereiche gleichen Modulationspotentials. Eine größere Linienstärke stellt dabei ein stärkeres zu erwartendes Modulationspotential dar. In dem Bereich, in dem die diagonale Linienbreite verschwindet, ist das Modulationspotential nahezu null. Dort haben beide Gates in etwa die gleiche kapazitive Kopplung und wirken zusammen näherungsweise wie ein einzelnes flächiges Gate.

In Abbildung 7.7(a) ist der Farbplot des spezifischen Widerstands für die Probe mit einer Streifenperiode von $a = 500$ nm und einer Streifenbreite von $b_{sg} = 150$ nm nochmals als Funktion der Top-Gate- und der Streifen-Gate-Spannung dargestellt. Zusätzlich sind zwei Sweep-Richtungen durch schwarze beziehungsweise weiße gepunktete Linien markiert. Die schwarzen Punkte kennzeichnen Messpositionen, an denen ein schwaches und näherungsweise konstantes Modulationspotential zu erwarten ist, während die weißen Punkte Bereiche mit minimalem Modulationspotential markieren.

Die Symmetrie des Farbplots erlaubt dabei eine erste Abschätzung der Lage des Modulationsminimums. Eine präzisere Bestimmung anhand gezielter Messungen der Änderung des Modulationspotentials erfolgt in Kapitel 9.

Für den Vergleich mit der Referenzprobe wird für die Gate-Spannungsabhängigkeit von ρ_{xx} entlang der schwarz gepunkteten Linie die effektive eindimensionale Spannungsskala V_g^* eingeführt:

$$V_g^* = (V_{tg} - V_{tg}^{\text{CNP}}) \sqrt{1 + \left(\frac{dV_{sg}}{dV_{tg}} \right)^2} \quad (7.3)$$

Hierbei dient V_{tg}^{CNP} als Offset, sodass der Ladungsneutralitätspunkt auf den Ursprung verschoben wird und damit $V_g^*(V_{tg}^{\text{CNP}}) = 0$ gilt.

Die Messwerte können entweder direkt aus dem Farbplot entnommen oder durch gezielte Sweeps entlang der markierten Punkte aufgenommen werden. Die entlang dieser Punkte gemessenen spezifischen Widerstände sind in Abbildung 7.7(b) dargestellt. Der Verlauf ohne angelegtes Modulationspotential stimmt dabei nahezu mit der Messung des Referenzbereichs in Abb. 7.1(a) überein. Der Sweep bei angelegtem Modulationspotential führt hingegen aufgrund der modulierten Ladungsträgerdichte zu einem Anstieg des Widerstands. Bei schwacher Modulation mit $V_0 \ll E_{\text{gap}}$ bleiben die wesentlichen Merkmale der zugrunde liegenden Bandstruktur jedoch erhalten, sodass sich Ladungsneutralitätspunkt, Valenzbandkante und Leitungsbandkante weiterhin erkennen und eindeutig identifizieren lassen.

Sweep-Richtung der Gate-Maps

Wird ein Farbplot wie in Abbildung 7.7(a) aufgenommen, in dem Streifen-Gate- und Top-Gate-Spannung systematisch variiert werden, so besteht der naheliegende experimentelle Ansatz darin, eine der beiden Gate-Spannungen konstant zu halten, beispiels-

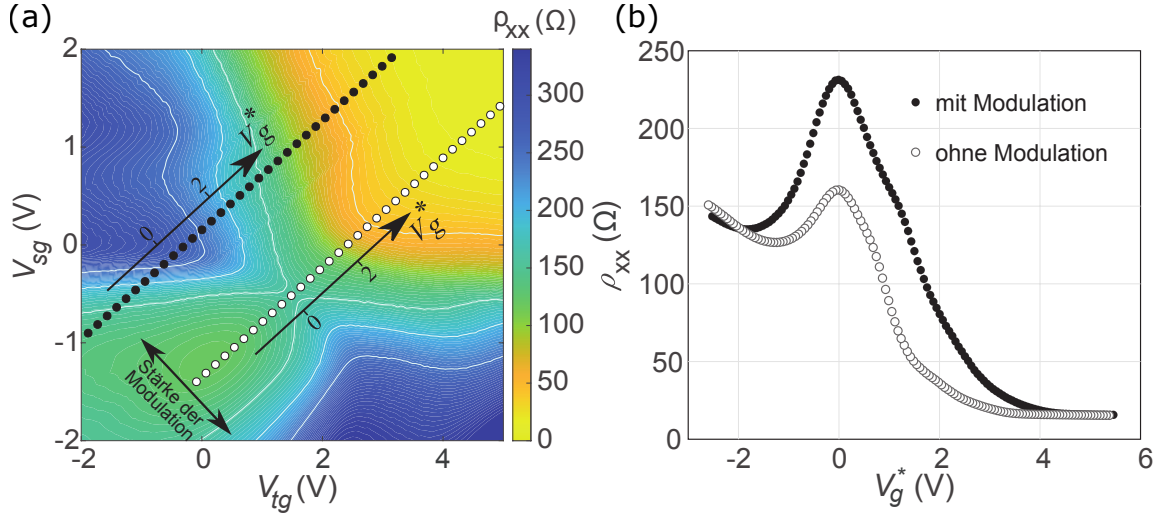


Abbildung 7.7.: (a) Gate-Map der Probe mit einer Periode von $a = 500 \text{ nm}$ und dem Breitenverhältnis von Streifen-Gate zu Zwischenbereich $b_{sg} : b_{tg} = 150 \text{ nm} : 350 \text{ nm}$. Die Farbskala zeigt den spezifischen Widerstand ρ_{xx} als Funktion der Top-Gate-Spannung V_{tg} und der Streifen-Gate-Spannung V_{sg} . Entlang der weißen gepunkteten Linie ist das Modulationspotential näherungsweise minimal, während entlang der schwarzen gepunkteten Linie ein schwaches und nahezu konstantes Modulationspotential vorliegt. Zur Darstellung der Gate-Spannungsabhängigkeit von ρ_{xx} entlang beider Linien wurde eine effektive eindimensionale Spannungsskala V_g^* eingeführt, deren Ursprung jeweils am Ladungsneutralitätspunkt liegt, also durch $V_g^*(V_{tg}^{\text{CNP}}) = 0$ definiert ist. Die zugehörigen Skalen sind in der Gate-Map eingetragen. (b) Spezifischer Widerstand ρ_{xx} als Funktion von V_g^* für den modulierten Fall (gefüllte Kreise) und den unmodulierten Fall (offene Kreise) (aus [24]).

weise V_{tg} , und das Streifen-Gate V_{sg} jeweils vom negativen zum positiven Spannungsbereich durchzusweepen. Dieser Hinsweep wird anschließend für alle im Messbereich definierten Werte von V_{tg} schrittweise wiederholt.

Ein Problem entsteht jedoch, wenn die Magnetotransportmessung nicht entlang einer konstanten Gate-Spannung durchgeführt werden soll. Stattdessen verläuft sie diagonal entlang einer Linie konstanten Modulationspotentials, also entlang der in Abbildung 7.7(a) markierten Richtung, die durch V_g^* beschrieben wird. Infolge der Hysterese hängt die effektive Position im Gate-Raum dann von der Sweep-Richtung ab, sodass die Symmetrieachse der Gate-Map nicht mehr eindeutig festgelegt ist. Messdaten, die entlang V_g^* aufgenommen werden, können daher nicht mehr eindeutig dem ursprünglich gewählten Modulationspotential zugeordnet werden.

Anpassung der Sweep-Richtung der Gate-Maps

Um entlang eines konstanten Modulationspotentials zu sweepen und dabei das Modulationsminimum zu durchlaufen, muss die Sweep-Richtung der Gate-Map angepasst werden. Je parallel die Sweep-Richtung am Modulationsminimum orientiert ist, desto genauer lässt sich die Symmetrieachse bestimmen. Dadurch kann das Modulationspotential während der Magnetotransportmessung besser kontrolliert werden. Dieser Schritt lässt sich am besten iterativ durchführen. Zunächst wird eine Gate-Map mit einer Sweep-Richtung entlang eines der beiden Gates aufgenommen, beispielsweise entlang von V_{sg} bei konstantem V_{tg} . Anhand der Symmetrie des aufgenommenen Farbplots lässt sich dann eine erste Abschätzung der Lage des Modulationsminimums

vornehmen. Daraufhin wird eine zweite Gate-Map aufgenommen, bei der die Sweep-Richtung bereits näherungsweise entlang der zuvor abgeschätzten Symmetrieachse orientiert ist. Anhand dieser zweiten Gate-Map kann die Lage des Modulationsminimums weiter präzisiert werden, sodass die Sweep-Richtung für die nächste Gate-Map noch genauer angepasst werden kann. Dieser iterative Prozess wird so lange fortgesetzt, bis die Sweep-Richtung schließlich parallel zum Modulationsminimum verläuft und damit ein konstanter Modulationspotentialverlauf während der Magnetotransportmessung gewährleistet ist. In Kapitel 9 wird durch gezielte Messungen der Modulationspotentialstärke entlang der Gate-Map bestätigt, dass die Symmetrieachse dem Minimum des Modulationspotentials entspricht.

Ergebnis und Vergleich

Durch die explizite Berücksichtigung des Hystereseverlaufs konnte jeder Messpunkt vom Valenzband bis in das Leitungsband bei näherungsweise konstantem Modulationspotential aufgenommen werden. Die Symmetrie der Messung liefert dabei zusätzlich eine Abschätzung des Bereichs, in dem das Modulationspotential nahezu verschwindet, wie in Abbildung 7.6 dargestellt. Auf diese Weise wird ein direkter Vergleich mit der Referenzmessung sowie mit den Ergebnissen von Kozlov et al. [16] möglich. Gleichzeitig zeigt die Analyse, dass Sweep-Messungen in der Doppel-Gate-Struktur nur dann eindeutig interpretierbar sind, wenn die Hysterese und die damit verbundene Verschiebung der effektiven Potentiallandschaft explizit berücksichtigt werden.

7.3. Auftreten von Weiss-Oszillationen mit der Doppel-Gate-Struktur

Nach der elektrostatischen Charakterisierung der Doppel-Gate-Struktur wird nun der Magnetotransport betrachtet. Im Mittelpunkt steht dabei zunächst der Bereich oberhalb des Ladungsneutralitätspunktes, in dem sich die Transportregime trotz schwacher lateraler Modulation noch in guter Näherung mit der Referenzprobe vergleichen lassen.

Zunächst werden die Messungen in dem Spannungsbereich diskutiert, in dem die Oberflächenzustände den Transport in der Bandlücke und im angrenzenden Leitungsband dominieren. In diesem Regime treten deutliche Kommensurabilitätsoszillationen auf, deren Lage und Ausprägung zuerst analysiert werden. Die genaue Zuordnung der einzelnen Bereiche im zweidimensionalen Gate-Raum wird anschließend anhand der systematischen Gate-Abhängigkeit weiter verfeinert.

Kommensurabilitätsoszillationen

Abbildung 7.8 zeigt deutliche Kommensurabilitätsoszillationen sowohl in der Bulk-Bandlücke (a) als auch im Leitungsband (b). Die aus den SdH-Oszillationen gewonnene Ladungsträgerdichte wird verwendet, um über die Flachbandbedingung die Positionen der Minima der Kommensurabilitätsoszillationen zu bestimmen. Durch Einsetzen des Zyklotronradius $R_c = \hbar k_F / eB$ in die Flachbandbedingung lassen sich die Magnetfeldpositionen der einzelnen Minima berechnen:

$$B_{\lambda,min} = \frac{2\hbar k_F}{e(\lambda - \frac{1}{4})a} \quad (7.4)$$

Der Fermi-Wellenvektor $k_F = \sqrt{4\pi n_{top}}$ wird dabei für Dirac-Fermionen verwendet. Die berechneten Positionen der Minima sind in Abbildung 7.8(a) und (b) durch rote gestrichelte vertikale Linien markiert. Somit lassen sich auch die Ergebnisse der Dissertation von Maier [87] bestätigen, dass die Kommensurabilitätseffekte in 3D-HgTe-Übergitterstrukturen durch die Ladungsträgerdichte der oberen Oberfläche bestimmt werden. Dies wird damit erklärt, dass der Abstand der Gates zur oberen Oberfläche relativ klein ist und das erzeugte Modulationspotential dort entsprechend stärker ausfällt.

Gitterperiodenabhängigkeit der Doppel-Gate-Struktur

Die Gitterperiode hat vor allem einen Einfluss auf die Magnetfeldpositionen der Kommensurabilitätsoszillationen. Mit abnehmender Gitterperiode verschieben sich die Minima der Weiss-Oszillationen zu höheren Magnetfeldern, was sich unmittelbar aus der Flachbandbedingung ergibt. Eine Untersuchung und Gegenüberstellung der Proben in Abbildung 7.9 mit unterschiedlichen Gitterperioden zeigt jedoch, dass die Kommensurabilitätsoszillationen bei einer Periode von 300 nm nicht mehr so deutlich aufgelöst werden können wie bei einer Periode von 500 nm. Dies könnte darauf hindeuten, dass das Modulationspotential bei der kleineren Periode zunehmend unscharf wird oder an Stärke verliert, bevor es die HgTe-Oberfläche erreicht. Zu beachten ist, dass die Messung der 300 nm-Probe bei einer höheren Temperatur von 1.52 K aufgenommen wurde, während die Messung der 500 nm-Probe bei 295 mK durchgeführt wurde. Da

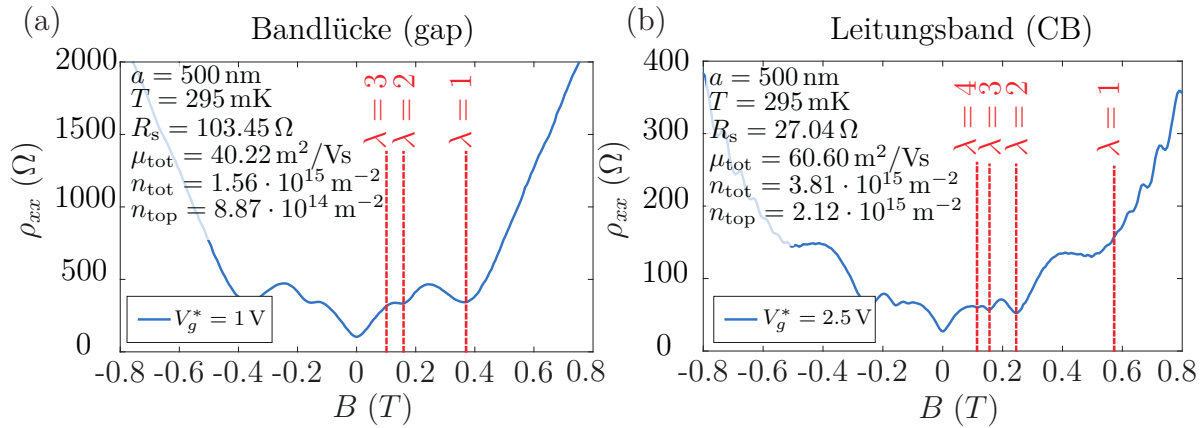


Abbildung 7.8.: Spezifischer Längswiderstand ρ_{xx} in Abhängigkeit vom Magnetfeld B für eine Doppel-Gate-Struktur mit Streifenperiode $a = 500$ nm. Die Messungen wurden bei $T = 295$ mK für zwei verschiedene effektive Gate-Spannungen V_g^* durchgeführt. In beiden Fällen wurde ein schwaches Modulationspotential gleicher Amplitude angelegt. Ausgehend von der Ladungsträgerdichte befindet sich das Fermi-Niveau in Messung (a) in der Bulk-Bandlücke und in Messung (b) im Leitungsband. Die erwarteten Minima-Magnetfeldpositionen der ersten drei bzw. vier λ wurden mithilfe der Flachbandbedingung aus Gleichung (7.4) bestimmt und sind durch rote gestrichelte Linien markiert. Die verwendete Ladungsträgerdichte wurde aus den SdH-Oszillationen im Niedrigfeldbereich bis 2 T bestimmt, die in dem hier dargestellten Magnetfeldbereich bis 0.8 T noch nicht hinreichend deutlich aufgelöst sind.

Weiss-Oszillationen im Allgemeinen jedoch eine vergleichsweise schwache Temperaturabhängigkeit aufweisen [20], spielt dieser Temperaturunterschied hier für die WO's keine wesentliche Rolle.

Der Hauptgrund für die schlechtere Auflösung der Oszillationen bei der kleineren Periode liegt daher vermutlich im großen Abstand der Streifen von mehr als 120 nm zur Oberseite des HgTe. Damit zeigt sich eine grundlegende Einschränkung des Doppel-Gate-Designs, da die laterale Periodizität des Modulationspotentials nicht mehr hinreichend aufgelöst wird, sobald der Abstand zum Gate mit der halben Gitterperiode $a/2 = 150$ nm vergleichbar wird. Dass beide Gates unabhängig voneinander die Ladungsträgerdichte beeinflussen und prinzipiell funktionieren, lässt sich anhand der Gate-Map der 300-nm-Probe bestätigen (siehe Abbildung 7.5). Um den Einfluss dieses großen Abstands genauer zu untersuchen, wurden parallel in der Masterarbeit von Altmann [25] Proben mit Lackstreifen und einer flächigen Top-Gate-Struktur untersucht, bei denen die Streifen deutlich näher an der Oberfläche liegen. Dort konnten ebenfalls Kommensurabilitätsoszillationen beobachtet werden, was darauf hindeutet, dass die schlechtere Auflösung der Oszillationen bei der kleineren Periode mit dem Doppel-Gate durch den großen Abstand der Streifen zur Oberfläche bedingt ist.

Symmetrieabhängigkeit der Doppel-Gate-Struktur

Für eine Periode von 500 nm wäre es zunächst naheliegend, die Streifenbreite gleich der Zwischenbreite zu wählen, also $b_{sg} = b_{tg} = 250$ nm, um eine symmetrische Modulation zu erzeugen. Erste Vergleichsmessungen zeigten jedoch, dass sich die WO-Struktur in dieser symmetrischen Geometrie schwieriger auswerten lässt. Insbesondere treten zusätzliche Minima auf, die sich nicht allein durch die Grundharmonische beschreiben lassen und die Zuordnung der Widerstandsminima erschweren. Für die asymmetrische

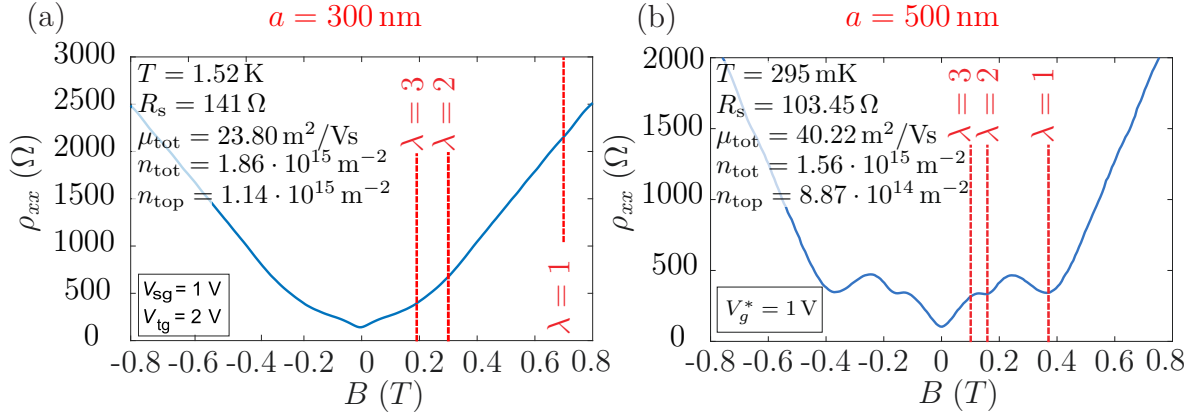


Abbildung 7.9.: Gegenüberstellung der Längswiderstände zweier Proben mit unterschiedlichen Gitterperioden, 300 nm in (a) und 500 nm in (b), bei Ladungsträgerdichten, die der Bulk-Bandlücke entsprechen. Die Messung in (a) wurde bei 1.52 K und in (b) bei 295 mK aufgenommen. Aufgrund der vergleichsweise schwachen Temperaturabhängigkeit von Komensurabilitätsoszillationen [20] wirkt sich dieser Unterschied vor allem auf die Auflösung der SdH-Oszillationen aus. Im Vordergrund dieser Gegenüberstellung steht der Einfluss der Gitterperiode. Für die 300 nm-Probe lassen sich in der Doppel-Gate-Struktur keine Weiss-Oszillationen mehr sauber auflösen, während die 500 nm-Probe deutliche Komensurabilitätsminima zeigt. Die Minimapositionen der ersten drei Ordnungen λ wurden für beide Messungen aus der Ladungsträgerdichte der oberen Oberfläche berechnet und durch rote gestrichelte Linien markiert.

Geometrie mit $b_{sg} = 150$ nm und $b_{tg} = 350$ nm erscheinen die Minima im verfügbaren Datensatz dagegen klarer getrennt. Dieser Vergleich ist bewusst als empirische Orientierung zu verstehen, da die Modulationsstärke in diesen frühen Messungen noch nicht explizit untersucht oder kalibriert wurde. Er begründet damit vor allem die Wahl der asymmetrischen Geometrie für die systematischere Untersuchung im weiteren Verlauf, nicht jedoch bereits einen vollständigen quantitativen Vergleich der Fourieranteile beider Strukturen. Die Form des Modulationspotentials ist dabei von wesentlicher Bedeutung und wird in Kapitel 9 diskutiert.

Diese Gegenüberstellung ist in Abbildung 7.10 dargestellt, in der für beide Geometrien und drei unterschiedliche Ladungsträgerdichten die Längswiderstände als Funktion des Magnetfelds gezeigt sind. Dabei kann die Modulationsstärke zwischen den einzelnen Messungen noch variieren, da sie zu diesem Zeitpunkt noch nicht gezielt eingestellt oder kalibriert wurde. Der Vergleich dient daher vor allem als praktische Entscheidungshilfe für die Wahl der weiteren Messgeometrie. Im gezeigten Datensatz zeigt die asymmetrische Struktur die klarer auswertbare WO-Struktur. Aus diesem Grund werden die folgenden Messungen mit der asymmetrischen Geometrie $b_{sg} = 150$ nm und $b_{tg} = 350$ nm durchgeführt. Für die symmetrische 250/250-nm-Struktur liegt dagegen kein in gleicher Weise systematisch entlang konstanter Modulationsstärke aufgenommener Datensatz vor, sodass im Folgenden kein strenger quantitativer Vergleich beider Geometrien beansprucht wird.

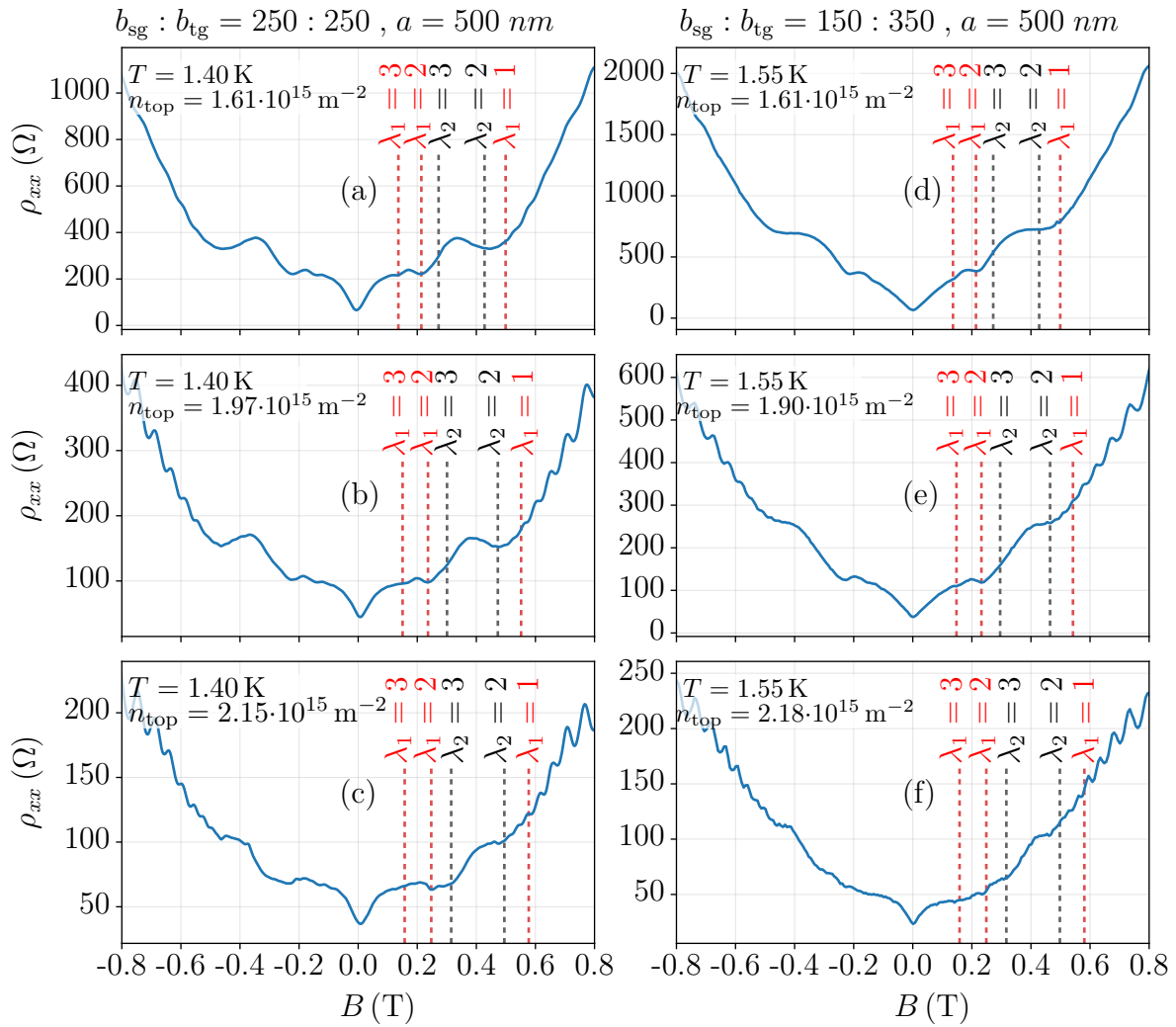


Abbildung 7.10.: Gegenüberstellung der Kommensurabilitätsoszillationen für eine symmetrische und eine asymmetrische Gittergeometrie. Die Teilabbildungen (a) bis (c) zeigen den symmetrischen Fall mit $b_{sg} = 250$ nm und $b_{tg} = 250$ nm für drei unterschiedliche Ladungsträgerdichten. Die Kommensurabilitätsoszillationen sind deutlich ausgeprägt, jedoch stimmen die Positionen der Widerstandsminima nicht vollständig mit den aus der ersten Harmonischen auf Basis der Ladungsträgerdichte der oberen Oberfläche erwarteten Minima überein. Eine bessere Übereinstimmung ergibt sich unter zusätzlicher Berücksichtigung der zweiten Harmonischen, was auf einen kombinierten Beitrag beider Harmonischen zu den beobachteten Minima hinweist. Die Positionen der ersten Harmonischen sind durch rote gestrichelte Linien, diejenigen der zweiten Harmonischen durch schwarze gestrichelte Linien gekennzeichnet. Die Teilabbildungen (d) bis (f) zeigen den asymmetrischen Fall mit $b_{sg} = 150$ nm und $b_{tg} = 350$ nm, ebenfalls für drei unterschiedliche Ladungsträgerdichten. Auch hier sind die erwarteten Positionen der ersten und zweiten Harmonischen eingezeichnet. Im gezeigten Datensatz ist der verhältnismäßige Anteil der zweiten Harmonischen deutlich niedriger, sodass die Zuordnung der WO-Minima robuster möglich ist, auch wenn höhere Harmonische nicht vollständig verschwinden.

7.4. Weiss-Oszillationen in unterschiedlichen Transportregimen

Kommensurabilitätsoszillationen, die auf einer eindimensionalen Modulation in dem HgTe-basierten 3D-TI beruhen, wurden bereits in den Masterarbeiten von Giesl [21] und Vrenegor [23] untersucht und dort der Ladungsträgerdichte der oberen Oberfläche zugeordnet. In der Dissertation von Maier [87] wurde darüber hinaus eine zweidimensionale Modulation am HgTe-basierten 3D-TI realisiert und systematisch untersucht. Auch dort konnten die beobachteten Kommensurabilitätsoszillationen der Ladungsträgerdichte der oberen Oberfläche zugeordnet werden. Parallel zur Entwicklung der hier untersuchten Doppel-Gate-Struktur wurden in der Masterarbeit von Altmann [25] ebenfalls eindimensionale Modulationen am HgTe-basierten 3D-TI untersucht, jedoch auf Basis einer anderen Modulationsmethode, nämlich durch Lackstreifen. Auch in dieser Arbeit wurden die Kommensurabilitätsoszillationen erfolgreich der oberen Oberfläche zugeordnet. Im Unterschied zu den geätzten Strukturen von Giesl und Vrenegor wurden in Altmanns Masterarbeit keine höheren Harmonischen der Kommensurabilitätsoszillationen beobachtet.

Die hier vorgestellte Doppel-Gate-Struktur wurde in dieser Form noch nicht angewendet und erlaubt eine weiterführende Analyse der WOs. Zum einen werden hier Datensätze gezeigt, in denen das Modulationspotential so eingestellt wird, dass die Grundharmonische die WO-Struktur dominiert und damit eine direkte Zuordnung der Minima erlaubt. Zum anderen sind die Kommensurabilitätsoszillationen deutlich stärker ausgeprägt als in den zuvor untersuchten Strukturen. Dies wird auf die Doppel-Gate-Geometrie sowie auf die gezielte Einstellung der Modulationsstärke zurückgeführt. Darüber hinaus können die Kommensurabilitätsoszillationen in der vorliegenden Arbeit nicht nur im Leitungsband und in der Bulk-Bandlücke, sondern auch im Valenzband gemessen werden.

Im Folgenden werden zunächst die Weiss-Oszillationen oberhalb des Ladungsneutralitätspunktes vorgestellt. Anschließend werden die Messungen unterhalb des Ladungsneutralitätspunktes analysiert.

7.4.1. WOs im n-Regime

Die zugehörigen Messdaten sind in Abbildung 7.11 dargestellt. Dabei wurde die Doppel-Gate-Spannung so eingestellt, dass entlang einer Linie konstanten Modulationspotentials in Richtung V_g^* gemessen wurde, wie in der Gate-Map in Abbildung 7.7(a) parametrisiert. Auf diese Weise konnte die Probe vom Leitungsband über die Bulk-Bandlücke bis in das Valenzband eingestellt werden, wobei für jede Einstellung ein Magnetfeldsweep aufgenommen wurde. Der resultierende Datensatz ist im mittleren Panel von Abbildung 7.11 als Farbplot der negativen zweiten Ableitung des Längswiderstands, $-\partial^2 \rho_{xx} / \partial B^2$, für einen Magnetfeldbereich von $B = -1$ T bis 1 T und einen effektiven Gate-Spannungsbereich von $V_g^* = -3$ V bis 3 V dargestellt. Die Widerstandsminima und -maxima treten dabei deutlich hervor. Gut erkennbar sind die Minima der Weiss-Oszillationen, die sich von der Bulk-Bandlücke bis in das Leitungsband hinein verfolgen lassen. Charakteristisch ist dabei ihre wurzelförmige Gate-Abhängigkeit. Diese ergibt

sich aus der Abfolge

$$B_\lambda \propto k_F \propto \sqrt{n} \propto \sqrt{V_g^*}.$$

Sie folgt aus der Flachbandbedingung in Kombination mit der Beziehung zwischen Fermi-Wellenvektor und Ladungsträgerdichte sowie einer näherungsweise linearen Abhängigkeit der Ladungsträgerdichte von der Gate-Spannung. Gerade diese wurzelförmige Abhängigkeit der Weiss-Oszillationen zwischen Magnetfeld und der effektiven Gate-Spannung erlaubt bei der Auswertung der Messung eine klare Unterscheidung von den SdH-Oszillationen, deren Positionen eine lineare Gate-Abhängigkeit aufweisen. In Abbildung 7.11 werden Landau-Level bei Magnetfeldern größer als etwa $B = 0.5$ T aufgelöst und somit die SdH-Oszillationen deutlich sichtbar. Diese SdH-Oszillationen werden der Ladungsträgerdichte der oberen Oberfläche im Niedrigfeldbereich zugeordnet. Die entsprechende Dichte $n_{\text{top}}^{\text{SdH,low}}$ ist in Abbildung 7.14 dargestellt. Aus dieser Ladungsträgerdichte lassen sich nach Gleichung 7.4 die erwarteten Positionen der Minima der Kommensurabilitätsoszillationen berechnen. Diese berechneten Positionen sind in Abbildung 7.11 durch rote Dreiecke markiert und stimmen sowohl im Leitungsband als auch in der Bulk-Bandlücke gut mit den experimentell beobachteten Minima der Kommensurabilitätsoszillationen überein. Die eingezeichneten roten Dreiecke beginnen an einem virtuellen Nullpunkt der Ladungsträgerdichte nahe $V_g^* = 0.05$ V, der sich aus einer linearen Extrapolation der Oberflächenladungsdichte gegen Null ergibt. Im Modell besitzt dieser Punkt jedoch keine unmittelbare physikalische Bedeutung, da der Dirac-Punkt im 3D-HgTe im Valenzband liegt und experimentell nicht erreicht werden kann. Wenn das Fermi-Niveau in das Valenzband eintritt, wird zwar die Füllrate der Dirac-Fermionen klein, die Oberflächenzustände weisen jedoch weiterhin besetzte Elektronenzustände auf. Die verwendete Extrapolation zu einem Punkt verschwindender Ladungsträgerdichte basiert hingegen auf einer konstanten partiellen Füllrate, die aus dem Bereich der Bulk-Bandlücke übernommen wird. Sie dient daher ausschließlich der Veranschaulichung der charakteristischen wurzelförmigen Gate-Abhängigkeit der Minima der Kommensurabilitätsoszillationen.

Darüber hinaus zeigt sich beim Übergang von der Bulk-Bandlücke in das Leitungsband eine Verringerung der partiellen Füllrate der für die Weiss-Oszillationen relevanten Oberflächenzustände. Diese äußert sich in Abbildung 7.11 darin, dass die roten Dreiecke im Leitungsband eine zusätzliche Zunahme der Steigung gegenüber der Bulk-Bandlücke zeigen, wobei die Steigung hier auf das Magnetfeld bezogen ist. Dies lässt sich bei der Gate-Spannung von etwa $V_g^* \approx 1.4$ V erkennen. Dort befindet sich die Leitungsbandkante. Diese Verringerung der Füllrate ist analog bereits im Referenzbereich (Abbildung 7.1(b) und (c)) im Farbplot und an der ausgewerteten Ladungsträgerdichte der oberen Oberfläche zu sehen. Oberhalb der Leitungsbandkante wird ein Teil der zusätzlich eingebrachten Ladung in Bulk-Zustände umverteilt, sodass die für die Weiss-Oszillationen relevante Oberflächendichte langsamer mit V_g^* anwächst. [16, 18, 24, 25]

Zur weiteren Diskussion werden zwei Magnetfeldsweeps besonders hervorgehoben, nämlich ein Sweep im Leitungsband bei $V_g^* = 2.5$ V und ein Sweep in der Bulk-Bandlücke bei $V_g^* = 1.2$ V. Die zugehörigen Positionen sind im Farbplot durch schwarz gestrichelte horizontale Linien markiert. Der Sweep bei $V_g^* = 2.5$ V ist im oberen Panel von Abbildung 7.11 dargestellt und zeigt sowohl die negative zweite Ableitung der Messung als auch den zugehörigen Längswiderstand. Der Sweep bei $V_g^* = 1.2$ V ist entsprechend im unteren Panel dargestellt und repräsentiert den Fall in der Bulk-Bandlücke.

Aus dem Vergleich dieser beiden Bereiche ergeben sich zwei wesentliche Beobachtungen. Erstens lassen sich im Leitungsband Minima der Weiss-Oszillationen bis mindestens $\lambda = 5$ verfolgen, was mit der dort höheren Beweglichkeit konsistent ist (siehe Abschnitt 7.5). Zweitens ist die Amplitude der Kommensurabilitätsoszillationen im Leitungsband deutlich geringer als in der Bulk-Bandlücke. Dies deutet darauf hin, dass zusätzliche Bulk-Zustände im Leitungsband ein stärkeres Screening des periodischen Modulationspotentials verursachen. Die Dämpfung der Oszillationen lässt sich plausibel auf eine teilweise Abschirmung der aufgeprägten Potentialmodulation zurückführen. Mobile Ladungsträger in leitfähigen Bulk-Zuständen können sich infolge der äußeren Potentialmodulation umverteilen und dadurch ein induziertes elektrostatisches Potential erzeugen, das der äußeren Modulation teilweise entgegenwirkt [111]. Dadurch kann das für die Oberflächenzustände wirksame Modulationspotential reduziert werden.

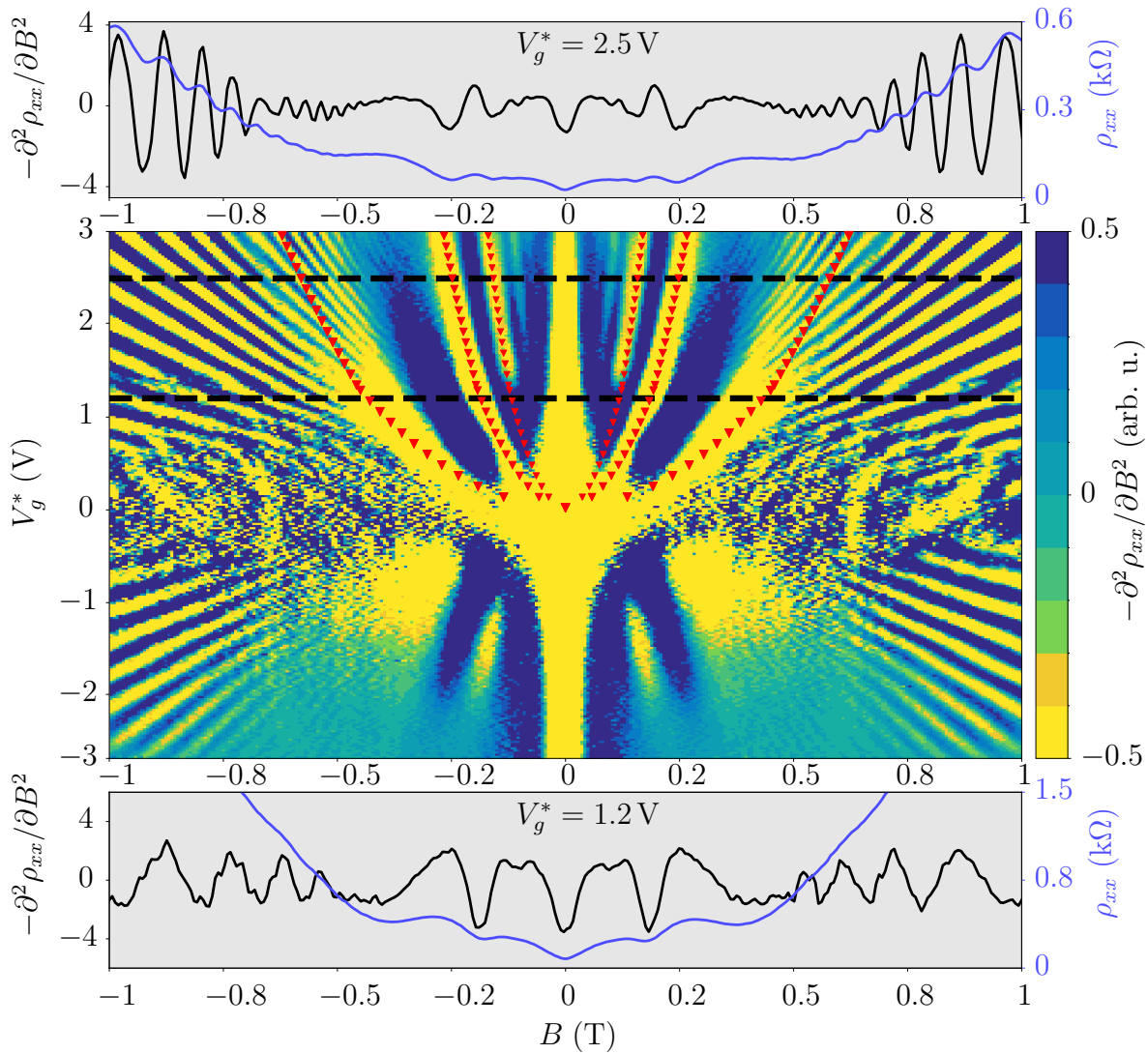


Abbildung 7.11.: Weiss-Oszillationen für eine Streifen-Gate-Periode von $a = 500$ nm im Leitungsband und in der Bulk-Bandlücke. Das mittlere Panel zeigt die negative zweite Ableitung des Längswiderstands, $-\partial^2 \rho_{xx} / \partial B^2$, als Funktion des Magnetfelds B und der effektiven Gate-Spannung V_g^* . In dieser Darstellung erscheinen Minima des Längswiderstands gelb und Maxima blau. Die gestrichelten horizontalen Linien markieren die Gate-Spannungen, bei denen die dargestellten Magnetfeldsweeps aufgenommen wurden. Das obere Panel zeigt einen Magnetfeldsweep im Leitungsband bei $V_g^* = 2.5$ V, das untere Panel einen Magnetfeldsweep in der Bulk-Bandlücke bei $V_g^* = 1.2$ V. In beiden Sweeps ist $-\partial^2 \rho_{xx} / \partial B^2$ als schwarze Kurve und der zugehörige Längswiderstand ρ_{xx} als blaue Kurve dargestellt. Die roten Dreiecke kennzeichnen die aus der Flachbandbedingung berechneten Positionen der Minima der Weiss-Oszillationen basierend auf der Ladungsträgerdichte der oberen Oberfläche und starten bei dem virtuellen Nullpunkt dieser Ladungsträgerdichte. Sowohl im Leitungsband als auch in der Bulk-Bandlücke zeigt sich eine gute Übereinstimmung zwischen den experimentell beobachteten Oszillationen und den erwarteten Magnetfeldpositionen der Minima. Die Amplitude der Weiss-Oszillationen im Leitungsband unterscheidet sich von der in der Bulk-Bandlücke, was auf die stärkere Dämpfung der Oszillationen durch die zusätzlichen Bulk-Zustände im Leitungsband zurückzuführen ist.

Dieser Effekt lässt sich besonders anschaulich darstellen, wenn die Magnetfeldsweeps des Widerstands in veränderter Perspektive betrachtet werden. In Abbildung 7.12 sind

die Messungen für verschiedene effektive Gate-Spannungen V_g^* als Wasserfalldiagramm gezeigt. Die Darstellung verläuft vom Leitungsband bei hohen Gate-Spannungen V_g^* über die Leitungsbandkante bis in die Bulk-Bandlücke. Dabei werden die größeren Amplituden der Weiss-Oszillationen in der Bulk-Bandlücke, der durch den roten Pfeil hervorgehobene Widerstandsanstieg an der Leitungsbandkante sowie die deutlich kleineren Oszillationsamplituden im Leitungsband unmittelbar sichtbar. Der vorderste Sweep des Wasserfalldiagramms bei $V_g^* = 2.5$ V entspricht dabei derselben Messung wie das obere Panel in Abbildung 7.11, während die hinteren Sweeps Gate-Positionen im Bereich der Messung bei $V_g^* = 1.2$ V entsprechen, die im unteren Panel von Abbildung 7.11 gezeigt ist. Die Analyse wird in Abschnitt 9 erneut aufgegriffen.

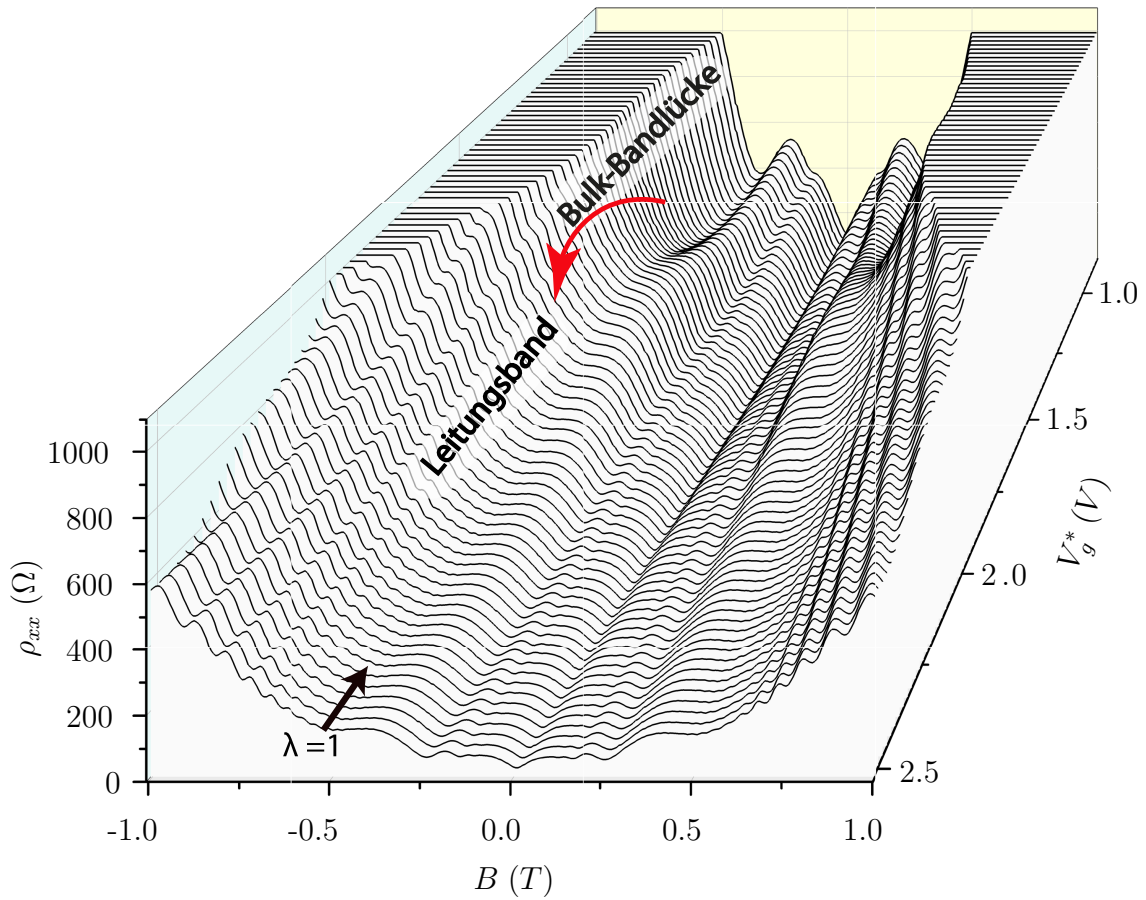


Abbildung 7.12.: Wasserfalldiagramm des longitudinalen Widerstands ρ_{xx} als Funktion des Magnetfelds B für verschiedene effektive Gate-Spannungen V_g^* zwischen 2.5 V und 1.0 V. Die einzelnen Magnetfeldsweeps sind entlang der in die Bildebene verlaufenden Achse nach abnehmendem V_g^* angeordnet. Sichtbar sind ein Anstieg von ρ_{xx} im Bereich der Leitungsbandkante (roter Pfeil), größere Amplituden der Weiss-Oszillationen in der Bulk-Bandlücke sowie deutlich kleinere Oszillationsamplituden im Leitungsband. SdH-Oszillationen werden im Leitungsband ab 0.5 T sichtbar.

Die Auswertung zeigt damit, dass für die Kommensurabilitätsbedingung nicht die gesamte Transportdichte relevant ist. Stattdessen wird sie durch die partielle Dichte derjenigen Zustände bestimmt, die das Transportverhalten dominieren und wirksam an das laterale Modulationspotential koppeln. Im hier analysierten Gate-Spannungsbereich sind dies die oberen Oberflächenzustände.

7.4.2. WOs im p-dominierten Regime

Durch feinere Messschritte und die automatische Anpassung der Lock-in-Verstärkung auf den jeweils höchstmöglichen Verstärkungsfaktor wurde das Rauschen stärker gefiltert. Dadurch wurden die Oszillationen in der zweiten Ableitung besser aufgelöst, sodass auch schwache Kommensurabilitätsoszillationen im Valenzband sichtbar wurden. Dies ist bemerkenswert, da die Löcher im Valenzband bereits in den Referenzmessungen eine deutlich geringere Beweglichkeit als die Elektronen im Leitungsband aufweisen und zugleich eine größere effektive Masse besitzen, was beides zu einer stärkeren Dämpfung der Oszillationen führt. Zudem wurden Kommensurabilitätsoszillationen in bisherigen Untersuchungen am topologischen 3D-HgTe-Isolator nur im Leitungsband und in der Bulk-Bandlücke beobachtet, nicht jedoch im Valenzband. Zusätzliche Messungen an Proben mit periodischen Lackstreifen, bei denen die laterale Modulation durch thermisch induzierte Verspannung und piezoelektrische Beiträge entsteht, stützen diese Zuordnung [24, 25]. Für eine Streifenperiode von $a = 300 \text{ nm}$ zeigen diese Messungen ebenfalls schwache Kommensurabilitätsstrukturen im Valenzband, deren Lage mit der aufgeprägten Periode verknüpft ist [24].

Abbildung 7.13 zeigt denselben Datensatz wie in Abschnitt 7.4.1, nun jedoch in der Darstellung der negativen zweiten Ableitung des Längswiderstands $-\partial^2 \rho_{xx} / \partial B^2$ mit Fit-Punkten im Valenzband. Das untere Panel enthält einen einzelnen Sweep bei $V_g^* = -1.5 \text{ V}$. Dabei ist die negative zweite Ableitung von ρ_{xx} in Schwarz und die oszillierende Komponente $\Delta \rho_{xx}$ in Blau dargestellt, wobei Letztere durch Subtraktion einer linear vom Magnetfeld abhängigen Hintergrundkurve aus ρ_{xx} gewonnen wurde. Im Farbplot sind die Positionen der Minima durch weiße Kreise mit blauer Kontur markiert. Aufgrund ihrer wurzelförmigen Abhängigkeit lassen sich diese Minima mit

$$B_{min,\lambda} = \pm \frac{2\hbar\sqrt{2\pi p_{VB}}}{e a (\lambda - 1/4)}$$

bestimmen. Für das Fitten wird angenommen, dass die relevanten Ladungsträger Bulk-Löcher im Valenzband mit parabolischer Dispersion sind, sodass für den Fermi-Wellenvektor $k_F = \sqrt{2\pi p_{VB}}$ gilt. Weiterhin wird eine lineare Abhängigkeit der für die Weiss-Oszillationen maßgeblichen Lochdichte von der effektiven Gate-Spannung V_g^* angenommen

$$p_{VB}^{WO}(V_g^*) = \frac{V_g^* C_{VB}}{e}. \quad (7.5)$$

Der Kapazitätswert C_{VB} geht als Fitparameter ein. Mit $C_{VB} = 2.4 \cdot 10^{-4} \text{ F/m}^2$ ergibt sich eine sehr gute Übereinstimmung mit den gemessenen Minimapositionen. Der Nullpunkt der zulaufenden Minima wurde zunächst auf den Ladungsneutralitätspunkt gelegt. Diese Wahl dient jedoch lediglich als praktische Referenz und besitzt vorerst keine physikalische Bedeutung, da die Weiss-Oszillationen in diesem Bereich nicht mehr aufgelöst werden können und der tatsächliche Startpunkt aufgrund der dort überlager-

ten Transporteinflüsse nicht eindeutig bestimmbar ist. Entsprechend wäre es prinzipiell auch möglich, den Ursprung näher an die Valenzbandkante zu legen und dafür einen kleineren effektiven Kapazitätswert zu erhalten. Diese Frage wird nach der vollständigen Auswertung im Folgenden detaillierter diskutiert und in unterschiedliche Fälle aufgeteilt.

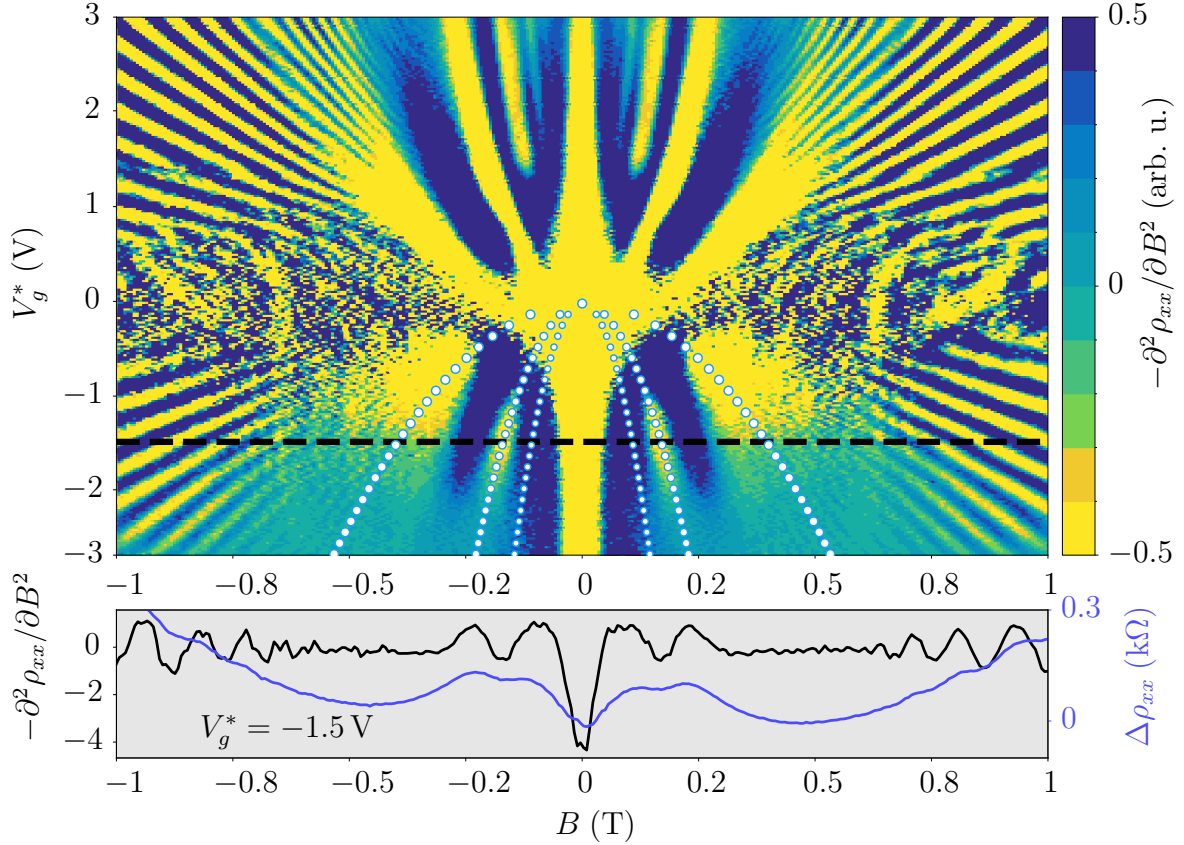


Abbildung 7.13.: Darstellung der Weiss-Oszillationen im Lochbereich. Das obere Panel zeigt einen Farbplot der negativen zweiten Ableitung des Längswiderstands $-\partial^2\rho_{xx}/\partial B^2$ als Funktion des Magnetfelds B und der effektiven Gate-Spannung V_g^* . Die gestrichelte horizontale Linie markiert die Gate-Spannung des im unteren Panel gezeigten Einzelsweeps bei $V_g^* = -1.5$ V. Dort sind $-\partial^2\rho_{xx}/\partial B^2$ als schwarze Kurve und die oszillierende Komponente $\Delta\rho_{xx}$ als blaue Kurve dargestellt. Die weiß gefüllten, blau umrandeten Kreise im Farbplot kennzeichnen die aus dem Flachband bestimmten Positionen der Weiss-Oszillationsminima im Lochbereich. Die effektive Lochladungsträgerdichte wird dabei als Fitparameter behandelt und über die Anpassung der Flachbandbedingung an die beobachteten Minimapositionen bestimmt.

7.5. Eigenschaften der Ladungsträger im modulierten Bereich

Ladungsträgerdichten

Nachdem die Weiss-Oszillationen sowohl oberhalb als auch unterhalb des Ladungsneutralitätspunktes identifiziert wurden, stellt sich im nächsten Schritt die Frage, welche Ladungsträger in den jeweiligen Transportregimen den Magnetotransport bestimmen und wie konsistent die daraus extrahierten Parameter sind. Dazu werden im Folgenden die aus Hall-Messungen, Niedrigfeld-SdH-Oszillationen, Zwei-Ladungsträger-Drude-Fits und den Weiss-Oszillationen gewonnenen Ladungsträgerdichten gemeinsam auf der effektiven Gate-Skala V_g^* gegenübergestellt. Auf diese Weise lässt sich überprüfen, in welchen Bereichen die verschiedenen Methoden übereinstimmen, wo zusätzliche Transportkanäle berücksichtigt werden müssen und wie sich daraus die Beweglichkeiten und mittleren freien Weglängen der relevanten Ladungsträger abschätzen lassen.

In Abbildung 7.14 sind die aus den verschiedenen Messmethoden bestimmten Ladungsträgerdichten auf der gemeinsamen Skala V_g^* zusammengetragen. Die gestrichelte schwarze Gerade beschreibt die lineare Gate-Abhängigkeit der aus den Niedrigfeld-SdH-Oszillationen bestimmten Elektronendichte der oberen Oberfläche in der Bulk-Bandlücke, während die durchgezogene Gerade die entsprechende Entwicklung im Leitungsband wiedergibt. Der Schnittpunkt beider Geraden markiert die Leitungsbandkante und dient damit als wichtiger Referenzpunkt. Die Übereinstimmung stützt damit die Zuordnung der beobachteten Minimapositionen zur Ladungsträgerdichte der oberen Oberfläche.

Die für die WOs im n-Regime bestimmte Ladungsträgerdichte stimmt gut mit der aus den Niedrigfeld-SdH-Oszillationen extrahierten Dichte der oberen Oberfläche überein, insbesondere mit den durch schwarze Linien markierten Werten.

Zur Bestimmung von n^{WO} wurden die Magnetfeldpositionen der WOs mit der Gleichung 7.4 gefittet. Durch Umstellen dieser Gleichung ergibt sich für die aus den Weiss-Oszillationen extrahierte Ladungsträgerdichte mit $k_F = \sqrt{4\pi n^{\text{WO}}}$ der Zusammenhang:

$$n^{\text{WO}} = \frac{1}{4\pi} \left[\frac{eaB_\lambda \left(\lambda - \frac{1}{4} \right)}{2\hbar} \right]^2. \quad (7.6)$$

Für Gate-Spannungen unterhalb der Valenzbandkante sind die mit dem Zwei-Ladungsträger-Drude-Modell bestimmten Loch- und Elektronendichten als blaue beziehungsweise rote Quadrate dargestellt. Ergänzend dazu sind die aus den SdH-Oszillationen im Valenzband bestimmten Lochdichten als schwarze Dreiecke dargestellt. Die aus den Weiss-Oszillationen extrahierten effektiven Lochdichten der Bulk-Zustände sind als blaue Kreise dargestellt. Für das p-Regime erfolgte die Auswertung ebenfalls anhand der Flachbandbedingung, jedoch mit

$$k_F = \sqrt{2\pi p^{\text{WO}}}, \quad (7.7)$$

entsprechend der Annahme spinentarteter, parabolisch dispersiver Bulk-Löcher. Die effektive WO-Lochdichte im Valenzband wurde durch Fitten der Minimapositionen mit Gleichung 7.4 in Kombination mit Gleichung 7.7 bestimmt. Äquivalent lässt sich

die Beziehung umstellen, sodass sich aus den einzelnen Minimapositionen

$$p^{\text{WO}} = \frac{1}{2\pi} \left[\frac{eaB_\lambda \left(\lambda - \frac{1}{4} \right)}{2\hbar} \right]^2 \quad (7.8)$$

ergibt.

Dabei zeigt sich, dass die aus den Weiss-Oszillationen bestimmte Dichte nicht mit der aus dem Zwei-Ladungsträger-Drude-Modell und den SdH-Oszillationen erhaltenen Lochdichte übereinstimmt. Dies deutet darauf hin, dass die Weiss-Oszillationen im Valenzband nicht durch die Gesamtlochdichte allein beschrieben werden können [24]. Hier könnten Ansätze relevant sein, die einen gemeinsamen Beitrag von Elektronen und Löchern zur Entstehung von WOs berücksichtigen. Alternativ lässt sich dies so interpretieren, dass sich die Lochdichte in Bereiche aufteilt, von denen nur ein Teil noch einem Modulationspotential unterliegt. Zusammengefasst zeigt diese Abweichung, dass die Weiss-Oszillationen im Valenzband durch ein einfaches Ein-Kanal-Bild auf Basis der gesamten Bulk-Lochdichte nicht ausreichend beschrieben werden. Sie motiviert daher die im Kapitel 8 vorgestellten Simulationen, in denen weiterführende Modelle unter Berücksichtigung zusätzlicher Beiträge untersucht werden.

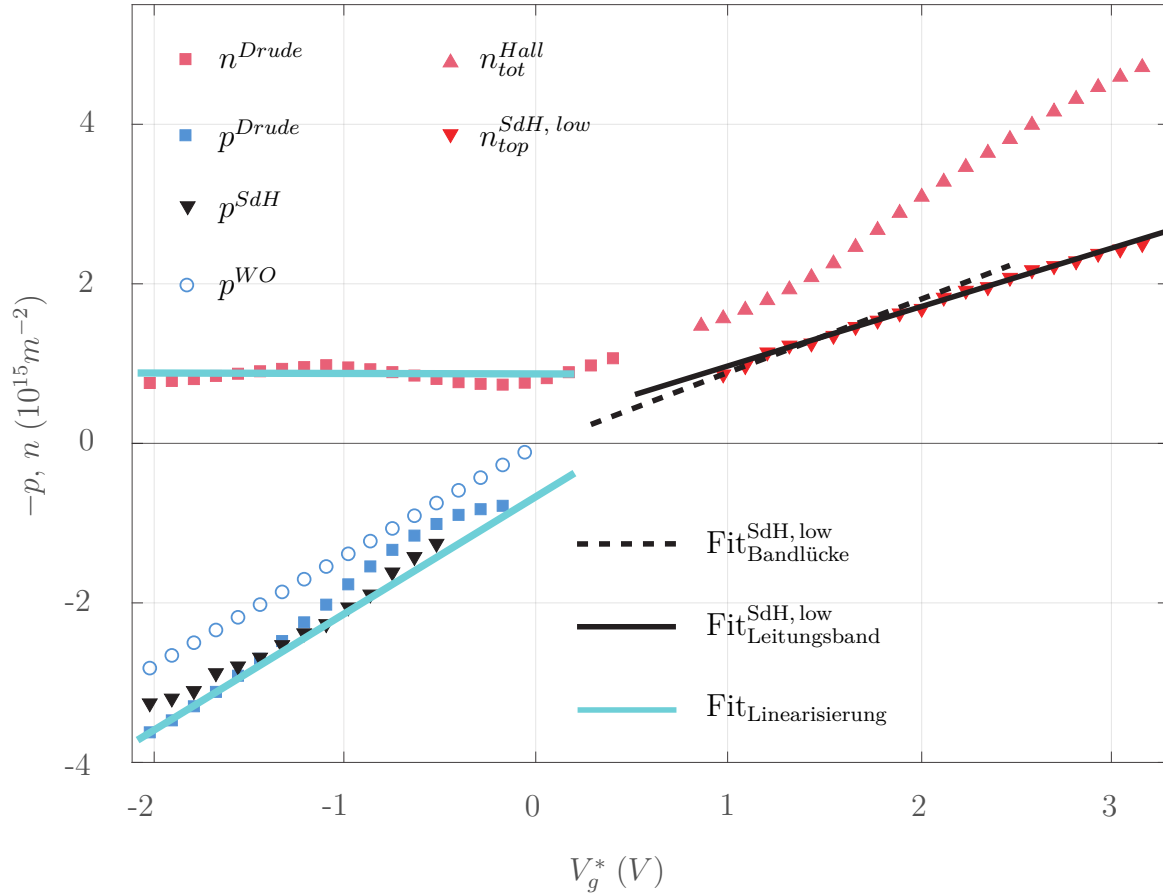


Abbildung 7.14.: Ladungsträgerdichten für Elektronen und Löcher sind gegen die effektive Gate-Spannung V_g^* aufgetragen. Die aus den Zuständen der oberen Oberfläche bestimmte Elektronendichte ist mit roten, nach unten gerichteten Dreiecken dargestellt, während die aus der Hall-Messung bestimmte gesamte Ladungsträgerdichte durch rote, nach oben gerichtete Dreiecke gezeigt ist. Die schwarze gestrichelte Linie entspricht einem linearen Fit der Ladungsträgerdichte der Niedrigfeld-SdH-Oszillationen der oberen Oberfläche in der Bulk-Bandlücke, die schwarze durchgezogene Linie einem linearen Fit im Leitungsband. Der Schnittpunkt beider Geraden markiert die Leitungsbandkante, da sich dort die Füllrate der Zustände der oberen Oberfläche ändert. Auf der Lochseite sind die mit dem Zwei-Ladungsträger-Drude-Modell bestimmten Loch- und Elektronendichten als blaue beziehungsweise rote Quadrate dargestellt. Zusätzlich sind die aus den SdH-Oszillationen im Valenzband bestimmten Lochdichten als schwarze Dreiecke eingezeichnet. Die blauen Kreise zeigen die Lochladungsträgerdichten, die aus Fits der Weiss-Oszillationen im Valenzband bestimmt wurden. Die türkisfarbenen Linien sind lineare Regressionsgeraden, die zur Linearisierung der Daten verwendet wurden und einfachere Annahmen für die folgenden Simulationen ermöglichen. Aus [24].

Beweglichkeiten und mittlere freie Weglängen

Die Beweglichkeiten werden analog zum Referenzbereich bestimmt: Für Elektronen und Löcher im p-dominierten Regime werden Fits mit dem Zwei-Ladungsträger-Drude-Modell verwendet. Im n-Regime wird die Elektronenbeweglichkeit aus der Hall-Steigung bestimmt und beschreibt damit eine effektive Beweglichkeit der beteiligten elektronischen Transportkanäle. Für diese Drude-Auswertung wird die mittlere freie Weglänge aus der Beweglichkeit μ und dem Fermi-Wellenvektor eines spinentarteten parabolischen Zustands berechnet. Mit $k_F = \sqrt{2\pi n_s}$ gilt $l_e = \hbar k_F \mu / e$.

Für die WOs wird der beschriebene Ansatz aus Kapitel 4.2.4 verwendet. Mit Gleichung 4.46 lässt sich die mittlere freie Weglänge abschätzen. Daraus folgt mit Gleichung 4.48 die Beweglichkeit. Basierend auf dem in Abbildung 7.15 gezeigten Farbplot der WOs wurde jeweils die kleinste Gate-Spannung bestimmt, bei der das maximal aufgelöste WO-Minimum noch sicher identifiziert werden konnte, sowie die zugehörige Ladungsträgerdichte. Diese Werte sind zusammen mit den daraus berechneten Werten der mittleren freien Weglänge und Beweglichkeit in Tabelle 7.1 zusammengefasst.

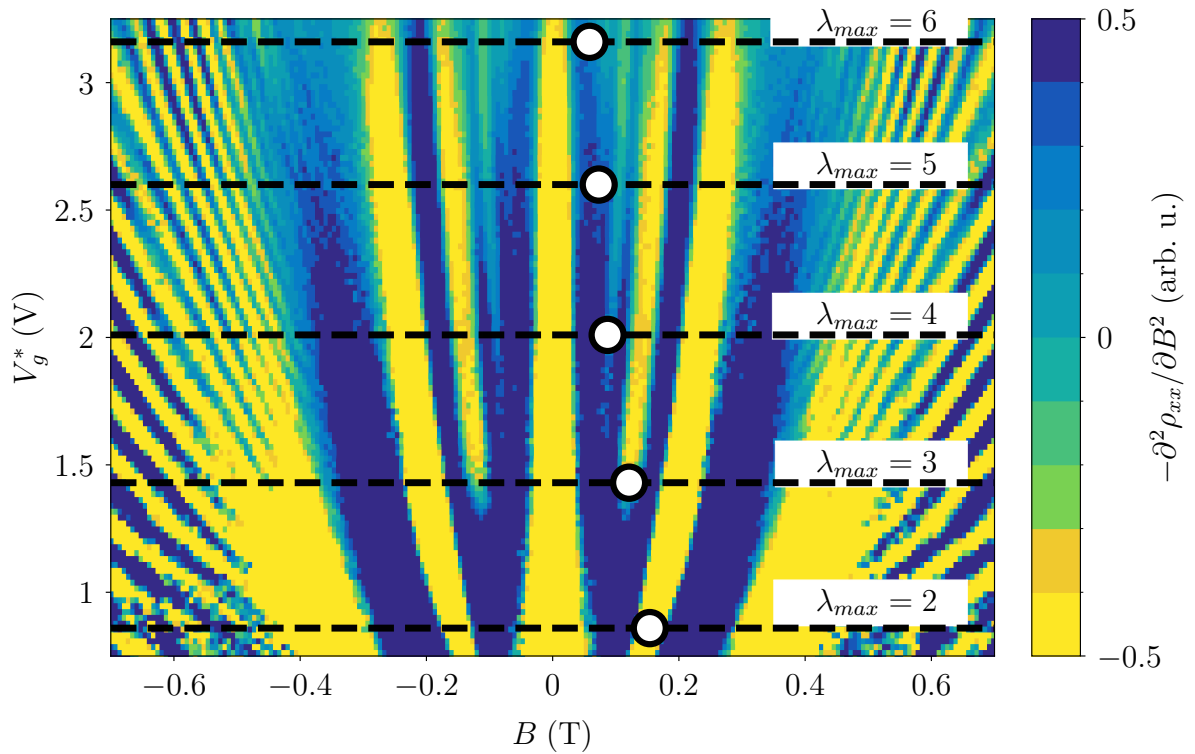


Abbildung 7.15.: Farbplot der Weiss-Oszillationen im n-Regime für Gate-Spannungen V_g^* zwischen 0.8 V und 3.2 V in Abhängigkeit vom Magnetfeld B im Bereich von -0.7 T bis 0.7 T. Die gestrichelten Linien markieren diejenigen Gate-Spannungen, bei denen das jeweils nächstgrößere Minimum anhand des Index λ_i sicher aufgelöst ist. Zur robusteren Abschätzung wurde dabei ein Toleranzabstand berücksichtigt. Weiss-Oszillationen lassen sich für $\lambda_i = 2$ bis 6 eindeutig erkennen.

V_g^* (V)	n_{top}^{WO} (10^{15} m^{-2})	λ_{max}	l^{WO} (μm)	μ^{WO} ($10^5 \text{ cm}^2/(\text{V s})$)
0.90	0.897	2	2.74	3.94
1.43	1.254	3	4.32	5.23
2.01	1.688	4	5.89	6.14
2.60	2.154	5	7.46	6.89
3.16	2.502	6	9.03	7.74

Tabelle 7.1.: Die aus den Weiss-Oszillationen abgeleiteten Kennzahlen sind für verschiedene Gate-Spannungen V_g^* gezeigt. Die mittlere freie Weglänge und Beweglichkeit können somit erstmals über die Weiss-Oszillationen der oberen Oberfläche zugeordnet werden.

Besonders hervorzuheben ist, dass die damit bestimmten Werte für die Beweglichkeit und die mittlere freie Weglänge den oberen Oberflächenzuständen zuzuordnen sind. Aus den Berechnungen mit dem Drude-Modell lässt sich dies nicht direkt extrahieren, da die Beweglichkeit auf dem Schichtwiderstand basiert, der wiederum von der Parallelschaltung aller beteiligten leitfähigen Kanäle abhängt, also von beiden Oberflächen sowie vom Bulk. Die so erhaltenen Werte sind in Abbildung 7.16 dargestellt und zeigen, dass die Beweglichkeit der oberen Oberflächenzustände innerhalb der Bandlücke geringfügig über der Gesamtbeweglichkeit liegt. Dies kann darauf zurückgeführt werden, dass die Zustände der unteren Oberfläche eine geringere Beweglichkeit besitzen, sodass die Gesamtbeweglichkeit μ_{tot} leicht unterhalb derjenigen der oberen Oberflächenzustände liegt. Eine analoge Interpretation ist auch oberhalb der Leitungsbandkante möglich. Durch die zusätzlich besetzten Bulk-Zustände, die eine geringere Beweglichkeit aufweisen, vergrößert sich die Diskrepanz zwischen der Gesamtbeweglichkeit und der Beweglichkeit der oberen Oberflächenzustände.

Auf eine analoge Auswertung im Valenzband wird aufgrund der Interpretationsunsicherheiten verzichtet. Weder lässt sich die Ladungsträgerdichte eindeutig einem Ladungsträger zuordnen, noch können ausreichend viele Minima der WO's aufgelöst werden. Zusätzlich kann nicht eindeutig bestimmt werden, ob Elektronen und Löcher gemeinsam beitragen oder ausschließlich Löcher beteiligt sind, ebenso wenig wie die Gate-Spannung, bei der der Ursprung einer möglichen Lochladungsträgerdichte anzusetzen wäre. Daher wären Folgeberechnungen für die Beweglichkeit und mittlere freie Weglänge mit einem zu großen Fehler behaftet, als dass sie hier sinnvoll ausgewertet werden könnten. Dennoch stellt eine entsprechende Auswertung für zukünftige Analysen eine interessante Perspektive dar. Mit zusätzlichen Messungen und einer eindeutigeren Zuordnung der Ladungsträgerdichten im Valenzband könnte diese Analyse erneut durchgeführt werden, um auch dort Einblicke in die Beweglichkeiten und mittleren freien Weglängen zu gewinnen. Insbesondere Messungen mit kleineren Periodenlängen, wie z. B. $a = 300 \text{ nm}$, wie sie in [24, 25] verwendet wurden, könnten mit einer höheren Zahl aufgelöster Minima λ_i^{max} der WO's eine präzisere Bestimmung mit mehr Messpunkten ermöglichen.

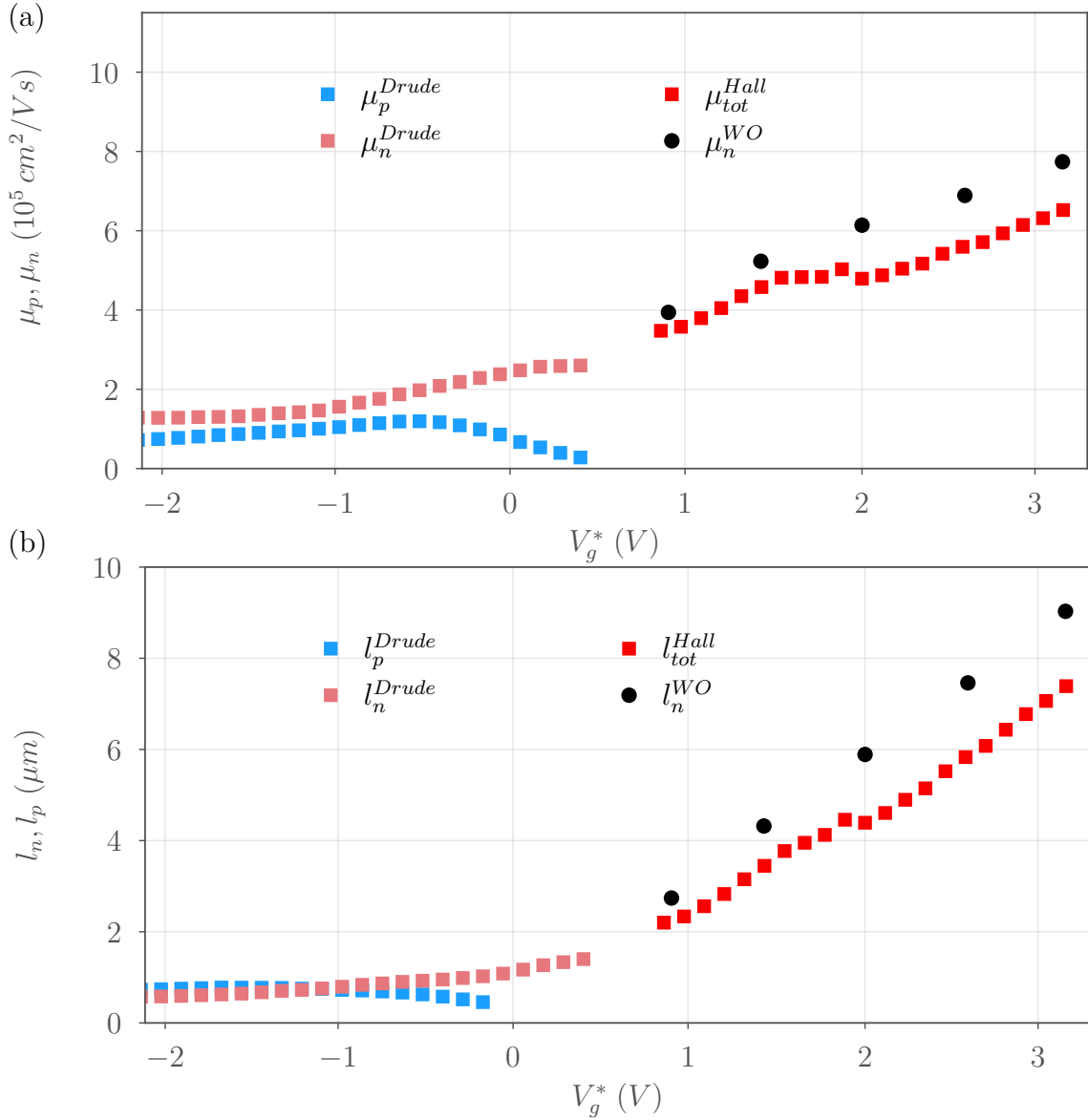


Abbildung 7.16.: Beweglichkeit (a) und mittlere freie Weglänge (b) als Funktion der effektiven Gate-Spannung V_g^* für die Doppel-Gate-Struktur. Neben den aus dem Zwei-Ladungsträger-Drude-Modell im Valenzband und der Hall-Auswertung im Elektronenbereich erhaltenen Werten sind zusätzlich Punkte dargestellt, die aus den Weiss-Oszillationen im Elektronenbereich gewonnen wurden. Für diese Punkte wurde die mittlere freie Weglänge aus der Lage der Weiss-Minima bestimmt. Die Beweglichkeit ergibt sich anschließend aus der Beziehung zwischen mittlerer freier Weglänge, Ladungsträgerdichte und Fermi-Wellenvektor. Die schwarzen Kreise kennzeichnen die aus den Weiss-Oszillationen extrahierten Werte und sind Tabelle 7.1 entnommen.

8. Simulation

Nachdem die Weiss-Oszillationen im Leitungsband, in der Bulk-Bandlücke und im Valenzband experimentell charakterisiert wurden, stellt sich im nächsten Schritt die Frage, inwieweit sich ihre Positionen auch innerhalb eines vereinfachten Transportmodells reproduzieren lassen. Auf der Elektronenseite ist die Situation noch vergleichsweise klar, da dort die obere Oberfläche den dominanten Beitrag liefert. Im Valenzband ist die Interpretation deutlich schwieriger, weil dort OberflächenElektronen und Bulk-Löcher gleichzeitig zum Transport beitragen. Genau in diesem Bereich hatte sich bereits gezeigt, dass die aus den Weiss-Oszillationen bestimmte Ladungsträgerdichte nicht mit den aus dem Zwei-Ladungsträger-Drude-Modell oder den aus den SdH-Oszillationen gewonnenen Ladungsträgerdichten übereinstimmt.

Für die folgende Modellierung wird daher in zwei Schritten vorgegangen. Zunächst wird an repräsentativen Einzelsweeps abgeschätzt, welche Größenordnung das Modulationspotential im Leitungsband, in der Bandlücke und im Valenzband besitzen muss. Anschließend wird mit diesen Größenordnungen geprüft, welches Modell die Lage der WO-Minima im gesamten V_g^* - B -Diagramm am besten beschreibt. Ein zusätzlich berücksichtigter magnetfeldabhängiger Widerstandshintergrund dient nur der qualitativen Darstellung und somit als Hilfe für die Abschätzung des Modulationspotentials. Die eigentliche Bewertung der WO-Modelle erfolgt dagegen über die Positionen der Kommensurabilitätsminima.

Ausgangspunkt der Simulation ist die zusätzliche Leitfähigkeit in y -Richtung, die durch ein schwaches periodisches Modulationspotential hervorgerufen wird. Im semiklassischen Bild wird dieser Beitrag für Elektronen beziehungsweise Löcher durch die im Theorieteil hergeleitete Leitfähigkeitskorrektur aus Gleichung 4.23 beschrieben,

$$\Delta\sigma_{yy}^{e,h} \approx \frac{e^2}{2\pi\hbar\gamma} \frac{V_0^2}{\hbar\omega_c a k_F} \cos^2\left(2\pi\frac{R_c}{a} - \frac{\pi}{4}\right),$$

wobei der Zusammenhang zwischen der effektiven Streurrate γ und der Beweglichkeit über Gleichung 4.26 gegeben ist. Dabei bezeichnen ω_c die Zyklotronfrequenz, $R_c = \hbar k_F/(eB)$ den Zyklotronradius, m^* die effektive Masse und V_0 die Amplitude des Modulationspotentials. Als konstante Simulationsgrößen gehen die aus dem Experiment bestimmten und linearisierten Ladungsträgerdichten $n_{\text{top}}^{\text{SdH,low}}$, p^{Drude} und n^{Drude} ein, wie sie in Abbildung 7.14 dargestellt sind. Die Beweglichkeiten gehen ebenfalls als konstante Simulationsgrößen in die Berechnungen ein. Dazu werden die in Abbildung 7.16(a) gezeigten Werte linearisiert. Für die Simulation der Elektronenseite werden effektive Massen in der Größenordnung von $0.028 m_0$ bis $0.035 m_0$ verwendet, entsprechend bereits bestimmten Werten für die Oberflächenzustände [31, 32]. Für die Lochseite wird hier, wie auch in [24, 32, 46], ein effektiver Wert von $m_h^* = 0.35 m_0$ verwendet. Die Modulationsstärke V_0 bleibt dagegen ein freier Anpassungsparameter, da sie vor allem die Amplitude der simulierten Weiss-Oszillationen bestimmt.

Um über Einzelsweeps ($\rho_{xx}(B)$ -Sweeps) das Modulationspotential abzuschätzen, reicht der reine WO-Beitrag jedoch nicht aus, da der gemessene Widerstand zusätzlich einen nichtoszillierenden magnetfeldabhängigen Hintergrund besitzt. Dieser Hintergrund muss in den Einzelsweep-Simulationen mitgeführt werden, damit die Oszillationsamplitude sinnvoll mit den Messdaten verglichen werden kann.

8.1. Abschätzung der Modulationsstärke an Einzelsweeps

Die Abschätzung der Modulationsstärke erfolgt zunächst an einzelnen Magnetfeldsweeps, da dort sowohl die Oszillationsamplitude als auch der nichtoszillierende Widerstandshintergrund unmittelbar sichtbar sind. Dieser Hintergrund wird in der Simulation phänomenologisch über eine effektive, schwach magnetfeldabhängige Beweglichkeit mitgeführt. Die verwendete effektive Beweglichkeit wird je nach Regime durch

$$\mu(B) = \frac{\mu_0}{1 + \alpha|B| + \beta B^2} \quad (8.1)$$

beschrieben. Dabei bezeichnet μ_0 die Beweglichkeit bei $B = 0$ T des jeweiligen Sweeps. Die Parameter α und β sind eigenständige phänomenologische Fitparameter und werden je nach Regime und Gate-Spannung angepasst. Sie dienen ausschließlich dazu, den nicht oszillierenden magnetfeldabhängigen Hintergrund der Einzelsweeps zu erfassen. Eine quantitative Analyse der zugrunde liegenden Streuprozesse würde über den Rahmen dieser Arbeit hinausgehen und ist für die Abschätzung des Modulationspotentials nicht erforderlich.

Für alle drei Regime (Leitungsband, Bulk-Bandlücke und Valenzband) wird jeweils eine Messung einer Simulation gegenübergestellt. Die Stärke des Modulationspotentials für einen festen Wert der Gate-Spannung wurde abgeschätzt, indem die Simulation an die experimentellen Daten angepasst wurde. Dadurch lässt sich die Größenordnung des Modulationspotentials abschätzen, die notwendig ist, um die Amplitude der Oszillationen in den drei Regimen zu reproduzieren. Für die Simulation wird die jeweils aus den WO-Minima bestimmte Ladungsträgerdichte verwendet. Auf der Elektronenseite entspricht diese Dichte der Ladungsträgerdichte der dominierenden oberen Oberfläche. Im Valenzband wird für diese Abschätzung die aus den WOs extrahierte effektive Lochdichte p^{WO} verwendet. Die Nullfeldbeweglichkeiten μ_0 werden aus einem linearen Fit der in Abbildung 7.16(a) gezeigten Gesamtbeweglichkeiten ermittelt. Mit den Gleichungen 5.1 und 5.2 lassen sich die entsprechenden Leitfähigkeiten magnetfeldabhängig berechnen, wobei für die Elektronenseite die Leitfähigkeitskorrektur aus Gleichung 4.23 für Elektronen und für die Lochseite die entsprechende Korrektur für Löcher verwendet wird. Für die Gesamtleitfähigkeit wird dann die Summe aus der Leitfähigkeit aller Ladungsträger und der entsprechenden WO-Korrektur berechnet, wobei die WO-Korrektur von der dominierenden Ladungsträgerdichte ausgeht. Für die Elektronenseite ergibt sich damit

$$\sigma_{yy}^{\text{tot}} = \sigma_{yy}^e + \Delta\sigma_{yy}^e,$$

und für die Lochseite

$$\sigma_{yy}^{\text{tot}} = \sigma_{yy}^e + \sigma_{yy}^h + \Delta\sigma_{yy}^h.$$

Der Widerstand ρ_{xx} wird aus den berechneten Leitfähigkeitswerten mithilfe der Formel

$$\rho_{xx} = \frac{\sigma_{yy}^{tot}}{\sigma_{xx}\sigma_{yy}^{tot} - \sigma_{xy}\sigma_{yx}} \quad (8.2)$$

bestimmt. In Abbildung 8.1(a) ist eine experimentell aufgenommene Messung bei $V_g^* = 2$ V dargestellt, während Abbildung 8.1(b) die entsprechende Simulation zeigt. Die Form der simulierten Kurve wird durch mehrere Parameter bestimmt. Einige davon sind festgelegt, nämlich die Gitterperiode a und die effektive Masse m^* . Andere sind aus dem Experiment bekannt, wie die gesamte Ladungsträgerdichte n^{Drude} und die Beweglichkeit μ_0 bei $B = 0$ T. Die übrigen, noch nicht bestimmten Parameter werden für den Fit verwendet. Die Fitparameter α und β , welche die phänomenologische Magnetfeldabhängigkeit der Beweglichkeit beschreiben, stehen nicht in direktem Zusammenhang mit den Kommensurabilitätsoszillationen selbst, sondern bestimmen die glatte Hintergrundform der Kurve. Die Form und Position der Kommensurabilitätsoszillationen werden schließlich durch die für die Oszillationen verantwortliche Ladungsträgerdichte n^{WO} sowie durch die Amplitude des elektrostatischen Modulationspotentials V_0 bestimmt. Diese beiden Parameter werden direkt aus dem Fit extrahiert und sind wichtige Parameter für die anschließende Analyse. Die Ladungsträgerdichte bestimmt die Positionen der WO-Minima, während die Modulationsstärke V_0 die Oszillationsamplitude kontrolliert.

Die beste Übereinstimmung zwischen Berechnung und Experiment in Abbildung 8.1(b) wird für eine Amplitude des Modulationspotentials von 2 meV erreicht. Eine Erhöhung dieses Wertes würde das Verhältnis zwischen der Tiefe des Minimums bei $\lambda = 1$, das nahe 0.5 T liegt, und der Tiefe des Minimums bei $\lambda = 2$, das ungefähr bei 0.25 T liegt, verändern und dadurch die Übereinstimmung mit dem Experiment verschlechtern. Der erhaltene Wert von 2 meV ist mit der Vorstellung eines „schwachen Modulationspotentials“ vereinbar, da die entsprechende Fermi-Energie der Elektronen an der oberen Oberfläche nach Gleichung 4.36 bei einer Ladungsträgerdichte von $n_{\text{top}} = 1.83 \cdot 10^{15} \text{ m}^{-2}$ bei ungefähr $E_F \approx 31$ meV liegt. Damit ergibt sich mit Gleichung 4.37 ein Verhältnis von $V_0/E_F \approx 6.4 \%$.

Es ist zu beachten, dass die WO-Amplitude gleichermaßen stark von der Beweglichkeit sowie von den Parametern α und β beeinflusst wird. Darüber hinaus berücksichtigt das Modell weder die mittlere freie Weglänge, welche die Oszillationsamplitude für größere Werte von λ unterdrücken sollte, noch die Ausbildung eines positiven Magnetowiderstands, der mit dem Übergang zu offenen Trajektorien in schwachen Magnetfeldern verbunden ist und in Abschnitt 4.2 diskutiert wird. Daher ist die auf diese Weise extrahierte Amplitude des Modulationspotentials mit einer relativ großen Unsicherheit behaftet. Trotz dieser Einschränkungen ermöglicht die Modellierung eine semiquantitative Analyse der Abhängigkeit der Amplitude des Modulationspotentials von der Lage des Fermi-Niveaus beziehungsweise von der Kombination der angelegten Gate-Spannungen V_{tg} und V_{sg} .

Eine weitere Möglichkeit zur Bestimmung des Modulationspotentials ergibt sich über das Sättigungsfeld B_0 . Im Längswiderstand ist diese Größe näherungsweise an der Position erkennbar, an der der positive Magnetowiderstand in einen gesättigten Verlauf übergeht. In der Messung in Abbildung 8.1(a) liegt diese Position grob im Bereich

zwischen 60 und 100 mT. Aufgrund der breiten Übergangsregion erlaubt diese Methode jedoch nur eine sehr grobe Abschätzung des Modulationspotentials. Setzt man die Werte in die Gleichung 4.29 ein, ergeben sich Werte im Bereich von $V_0 \approx 1.5\text{--}2.5\text{ meV}$. Damit stützt die Abschätzung über das Sättigungsfeld die aus der WO-Amplitude bestimmte Modulationsstärke, auch wenn letztere eine etwas genauere Bestimmung ermöglicht.

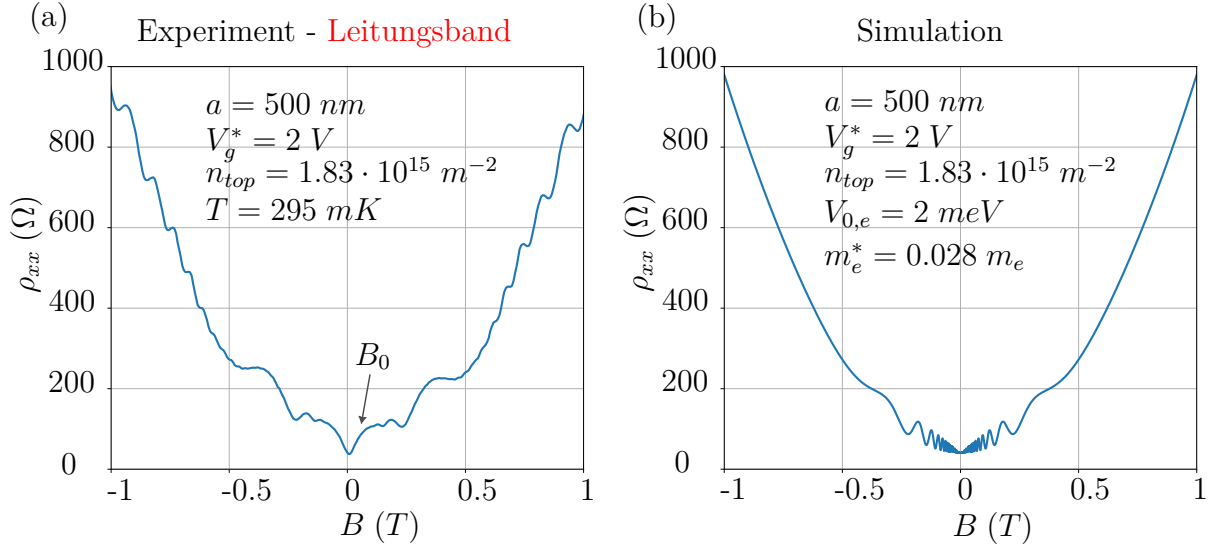


Abbildung 8.1.: Abschätzung des Modulationspotentials an einem einzelnen Magnetfeldsweep im Leitungsband bei $V_g^* = 2\text{ V}$. In (a) ist der experimentell gemessene spezifische Widerstand $\rho_{xx}(B)$ für eine Probe mit der Periode $a = 500\text{ nm}$ und bei einer Temperatur von $T = 295\text{ mK}$ dargestellt. Die zugehörige Ladungsträgerdichte der oberen Oberfläche beträgt $n_{\text{top}} = 1.83 \cdot 10^{15}\text{ m}^{-2}$. Die Position des Sättigungsfeldes B_0 ist grob im Bereich zwischen 60 und 100 mT erkennbar. In (b) ist die entsprechende Simulation für dieselbe Periode und Ladungsträgerdichte gezeigt. Als Modellparameter gehen die effektive Elektronenmasse $m_e^* = 0.028 m_0$ sowie eine angepasste Modulationsstärke $V_{0,e} = 2\text{ meV}$ ein. Zur genaueren Abschätzung der Gesamtkurve wurde der Einfluss einer phänomenologischen, schwachen magnetfeldabhängigen Variation der Beweglichkeit berücksichtigt. Das Sättigungsfeld wurde nicht simuliert.

Analog dazu wurde auch in Abbildung 8.2 das Modulationspotential in der Bulk-Bandlücke abgeschätzt. Dort ist die Situation vergleichbar, da auch hier die oberen Oberflächenzustände den dominanten Beitrag liefern. Es zeigt sich, dass die Amplitude der Oszillationen mit einer Modulationsstärke von etwa 3.5 meV gut reproduziert werden kann. Im Vergleich zum Leitungsband ist die Amplitude des Modulationspotentials in der Bulk-Bandlücke damit etwas größer, was mit dem geringeren Screening und der höheren Beweglichkeit der Zustände in diesem Bereich konsistent ist. Bei diesem Fit wurde gezielt das Minimum mit $\lambda = 1$ berücksichtigt. Ein guter Fit des Minimums mit $\lambda = 2$ würde dagegen eine etwas geringere Modulationsamplitude in der Simulation erfordern. Minima höherer Ordnung sind in der Messung nicht mehr eindeutig identifizierbar, sodass die Abschätzung des Modulationspotentials vor allem auf den Amplituden der Minima bei $\lambda = 1$ und $\lambda = 2$ basiert.

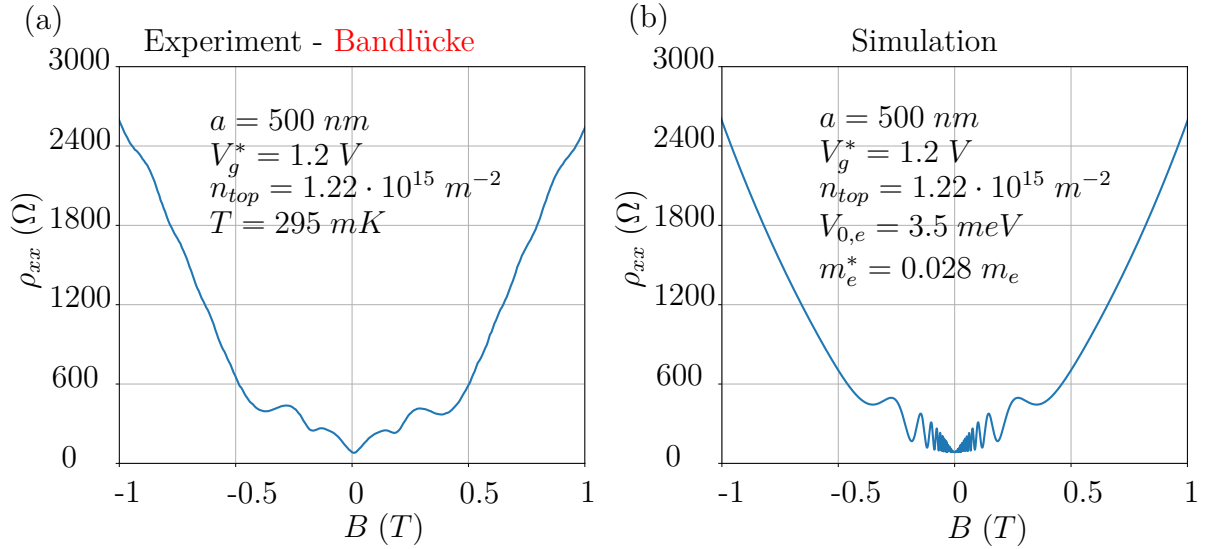


Abbildung 8.2.: Abschätzung des Modulationspotentials an einem einzelnen Magnetfeldsweep in der Bulk-Bandlücke bei $V_g^* = 1.2 \text{ V}$. In (a) ist der experimentell gemessene spezifische Widerstand $\rho_{xx}(B)$ für eine Probe mit der Periode $a = 500 \text{ nm}$ und bei einer Temperatur von $T = 295 \text{ mK}$ dargestellt. Die zugehörige Ladungsträgerdichte der oberen Oberfläche beträgt $n_{top} = 1.22 \cdot 10^{15} \text{ m}^{-2}$. In (b) ist die entsprechende Simulation für dieselbe Periode und Ladungsträgerdichte gezeigt. Als Modellparameter gehen die effektive Elektronenmasse $m_e^* = 0.028 m_0$ sowie eine angepasste Modulationsstärke $V_{0,e} = 3.5 \text{ meV}$ ein.

Abbildung 8.3(a) zeigt einen Magnetfeldsweep bei $V_g^* = -1.5 \text{ V}$, bei dem das Fermi-Niveau im Valenzband liegt. Für die Berechnung des monotonen Anteils der Leitfähigkeit wurden die in Abbildung 7.14 dargestellten Parameter aus dem Zwei-Ladungsträger-Drude-Modell verwendet. Für die Berechnung des oszillatorischen Anteils der Leitfähigkeit wurde die Ladungsträgerdichte $p^{\text{WO}} = 2.09 \cdot 10^{15} \text{ m}^{-2}$ verwendet, die aus der Analyse der experimentell gemessenen Weiss-Oszillationen extrahiert wurde. Wie Abbildung 8.3(b) zeigt, lässt sich die Oszillationsamplitude mit einer Modulationsstärke von etwa 0.2 meV bereits gut reproduzieren. Gegenüber Leitungsband und Bandlücke ist das wirksame Modulationspotential damit deutlich kleiner, was mit dem stärkeren Screening durch die hohe Bulk-Lochdichte sowie mit der größeren effektiven Lochmasse $m_h^* = 0.35 m_0$ und der damit verbundenen geringeren Beweglichkeit konsistent ist. Anhand eines einzelnen Sweeps lässt sich jedoch nicht eindeutig entscheiden, ob dieses Modulationspotential den Löchern direkt zuzuordnen ist oder ein effektives Potential beschreibt, das die gemeinsame Wirkung von Elektronen und Löchern erfasst. Für die folgende Modellierung wird daher angenommen, dass die Löcher im Valenzband stärker gescreent sind als die Elektronen, sodass für die Elektronen weiterhin $V_{0,e} = 2 \text{ meV}$ und für die Löcher $V_{0,h} = 0.2 \text{ meV}$ angesetzt wird.

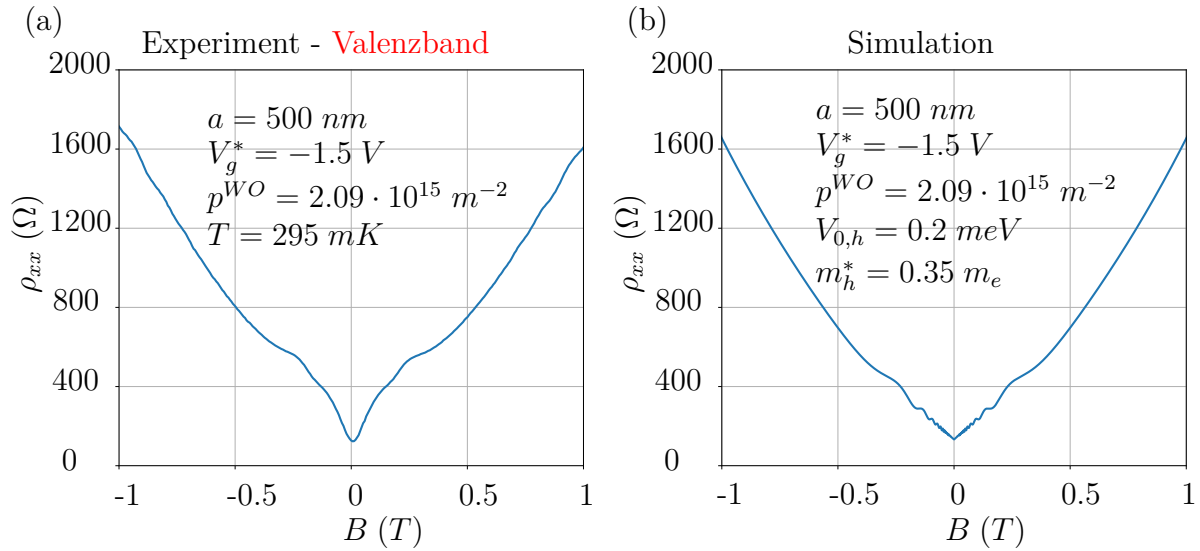


Abbildung 8.3.: Abschätzung des Modulationspotentials an einem einzelnen Magnetfeld-sweep im Valenzband bei $V_g^* = -1.5$ V. In (a) ist der experimentell gemessene spezifische Widerstand $\rho_{xx}(B)$ für eine Probe mit der Periode $a = 500$ nm und bei einer Temperatur von $T = 295$ mK dargestellt. Die zugehörige aus dem experimentellen Fit extrahierte Ladungsträgerdichte beträgt $p^{WO} = 2.09 \cdot 10^{15} \text{ m}^{-2}$. In (b) ist die entsprechende Simulation für dieselbe Periode und aus dem Fit bestimmte Ladungsträgerdichte p^{WO} gezeigt. Als weitere Modellparameter gehen die effektive Lochmasse $m_h^* = 0.35 m_0$ und eine angepasste Modulationsstärke $V_{0,h} = 0.2$ meV ein.

8.2. Weiss-Oszillationen in einem Elektron-Loch-System

Eine ungewöhnliche Situation ergibt sich im Valenzband, da Ladungsträger mit entgegengesetztem Vorzeichen zur Leitfähigkeit beitragen. Dabei unterscheiden sich ihre Beweglichkeiten und effektiven Massen nahezu um eine Größenordnung, während ihre Beiträge zur Gesamtleitfähigkeit vergleichbar bleiben. Derzeit existiert kein umfassendes Modell, das die Entstehung von Weiss-Oszillationen in einem solchen zweikomponentigen Elektron-Loch-System beschreibt. Frühere Untersuchungen haben gezeigt, dass sich die Ladungsträger in schwachen Magnetfeldern wie unabhängige Leitungskanäle verhalten, während sie in starken Magnetfeldern hybridisieren und das Systemverhalten durch die Differenzladungsträgerdichte bestimmt wird (siehe [46, 112]). Da Kommensurabilitätsoszillationen in einem Magnetfeldbereich zwischen diesen beiden Grenzfällen auftreten, ist nicht von vornherein bekannt, welche Art von Ladungsträgern ihr Verhalten bestimmt.

Abbildung 8.3 zeigt die Ergebnisse von Simulationen unter der Annahme, dass die Leitfähigkeitsoszillationen durch einen einzelnen Ladungsträgertyp mit der Dichte p^{WO} gebildet werden. Das Problem besteht darin, dass die auf diese Weise extrahierte Ladungsträgerdichte (siehe Abbildung 7.14, weiße Kreise mit blauen Rändern) systematisch von der Lochdichte abweicht, die entweder im Rahmen des Zwei-Ladungsträger-Drude-Modells oder aus der Analyse der Shubnikov-de-Haas-Oszillationen bestimmt wurde. Beide sind in derselben Abbildung dargestellt. Da derzeit kein vollständiges Modell zur Beschreibung von WOs in einem zweikomponentigen Elektron-Loch-System existiert, wird im Folgenden ein vereinfachter Modellansatz verwendet, um verschiedene Hypothesen zur physikalischen Bedeutung des Parameters p^{WO} zu untersuchen. Dazu werden in drei verschiedenen Modellen Farbplots ($-\partial^2 \rho_{xx} / \partial B^2$ als Funktion von B und V_g^*) in Abhängigkeit der WO-Leitfähigkeit erstellt.

Im Folgenden werden drei Modelle zur Beschreibung des Valenzbands diskutiert. Die ersten beiden werden direkt mit den experimentellen Minimapositionen verglichen. Das dritte Modell dient dazu, die effektive Differenzdichte Δp im Kontext der Bandstruktur einzuordnen, und wird daher anschließend separat diskutiert.

Im ersten Modell, dargestellt in Abbildung 8.4(a), werden die zusätzlichen Modulationsbeiträge zur Leitfähigkeit in y -Richtung für Elektronen und Löcher, $\Delta\sigma_{yy}^e$ und $\Delta\sigma_{yy}^h$, getrennt berechnet und jeweils zu den Drude-Beiträgen addiert. Die gesamte Leitfähigkeit ergibt sich dann zu

$$\sigma_{yy}^{\text{tot}} = \sigma_{yy}^e + \sigma_{yy}^h + \Delta\sigma_{yy}^e + \Delta\sigma_{yy}^h,$$

woraus sich durch Tensorinversion der longitudinale Widerstand ρ_{xx} bestimmen lässt. Dieses Bild entspricht der Annahme, dass Elektronen und Löcher zwei voneinander unabhängige Kanäle bilden, deren modulationsinduzierte Beiträge sich einfach addieren.

Das zweite Modell, gezeigt in Abbildung 8.4(b), geht davon aus, dass für die Ausbildung der Weiss-Oszillationen im Valenzband nicht die gesamte Lochdichte, sondern eine effektive Differenzdichte

$$\Delta p = p^{\text{Drude}} - n^{\text{Drude}}$$

maßgeblich ist. In diesem Fall wird nur ein einzelner Modulationsbeitrag $\Delta\sigma_{yy}^{\Delta p}$ zu den

Leitfähigkeitsbeiträgen im Valenzband addiert, sodass

$$\sigma_{yy}^{tot} = \sigma_{yy}^e + \sigma_{yy}^h + \Delta\sigma_{yy}^{\Delta p}$$

folgt. Dieses Modell entspricht phänomenologisch einer teilweisen Kompensation zwischen Elektron- und Lochbeiträgen, sodass für die Periodizität der Weiss-Oszillationen nur die Differenzdichte wirksam bleibt. Die Vorstellung, dass in einem Elektron-Loch-System eine effektive Kompensation maßgeblich sein kann, wurde bereits für zweidimensionale Elektron-Loch-Gase im Magnetfeld diskutiert [113].

In beiden Teilbildern in Abbildung 8.4 sind zusätzlich die experimentell bestimmten Positionen der WO-Minima eingetragen: rote Dreiecke für die Elektronenseite und weiße Punkte für den Valenzband-Bereich. Dadurch lässt sich direkt beurteilen, welches der beiden dargestellten Modelle die experimentell beobachteten Minimapositionen besser beschreibt. Während die Elektronenseite bereits zuverlässig die Ladungsträgerdichte der oberen Oberfläche widerspiegelt, zeigt sich im Valenzband, dass die additive Beschreibung der Elektronen- und Lochbeiträge die experimentellen Minima nur unzureichend reproduziert. Eine deutlich bessere Übereinstimmung ergibt sich erst dann, wenn im Sinne des zweiten Modells eine effektive Differenzdichte $\Delta p = p^{\text{Drude}} - n^{\text{Drude}}$ angesetzt wird. Die phänomenologisch erfolgreiche Beschreibung über eine effektive Differenzdichte ist daher nicht notwendigerweise als reale physikalische Dichte zu verstehen. Vielmehr könnte sie eine verkürzte Beschreibung einer komplexeren Mehrkomponentensituation im Valenzband sein. Die Simulation stützt damit die bereits aus der Auswertung der Weiss-Oszillationen gewonnene Aussage, dass im Valenzband ein einfaches Ein-Kanal-Bild mit der gesamten Bulk-Lochdichte nicht ausreicht. Welche mikroskopischen Beiträge dieser effektiven Kompensation zugrunde liegen, bleibt dabei zunächst offen. Eine mögliche bandstrukturelle Einordnung wird im Folgenden anhand eines dritten Modells diskutiert.

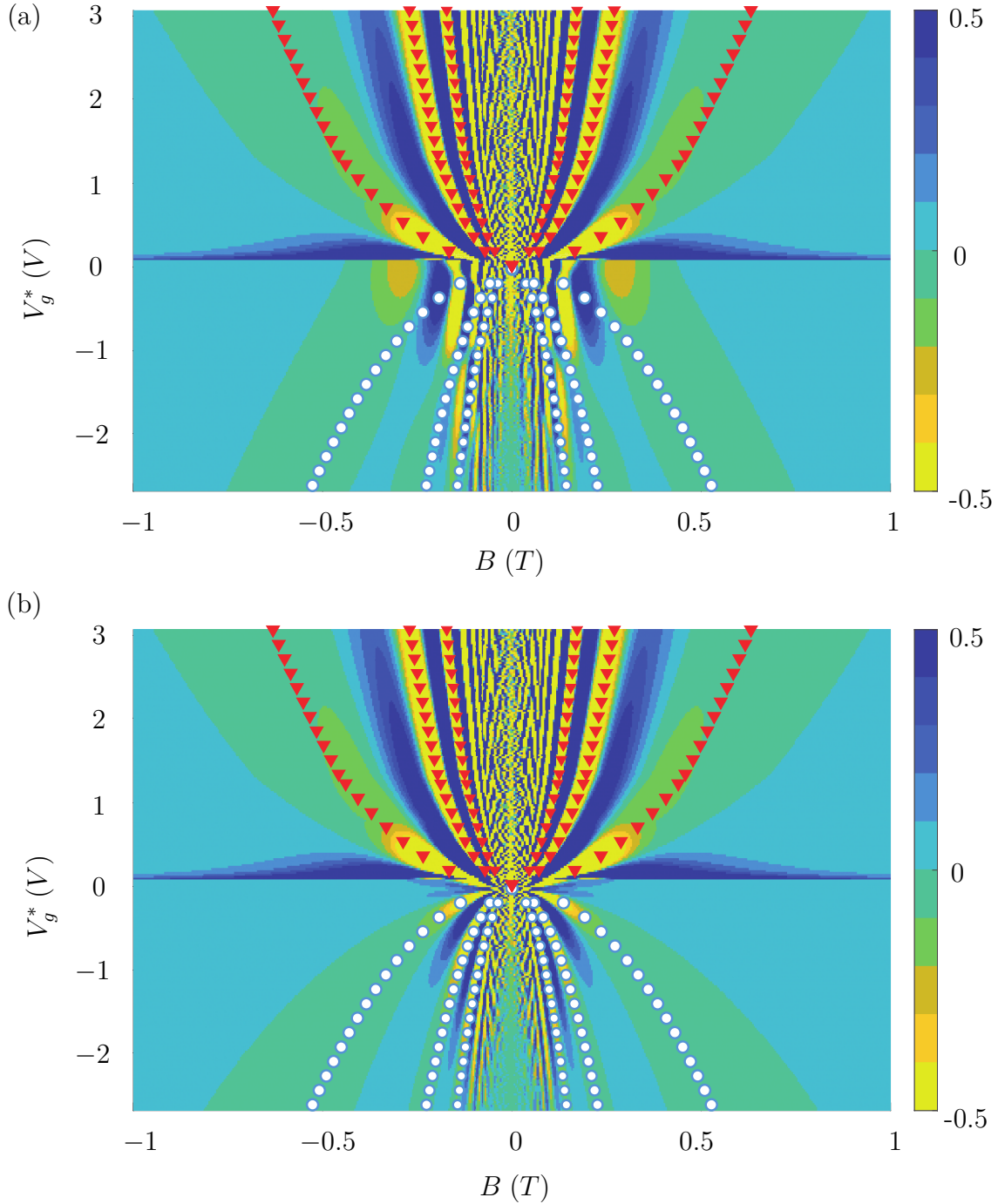


Abbildung 8.4.: Simulationen der Weiss-Oszillationen in der Darstellung der berechneten negativen zweiten Ableitung $-\partial^2 \rho_{xx} / \partial B^2$ des Längswiderstands. Die Farbkodierung entspricht derjenigen der experimentellen Daten: Gelb kennzeichnet Minima, Blau Maxima des spezifischen Widerstands. Als Eingangsgrößen werden die aus dem Experiment bestimmten und linearisierten Ladungsträgerdichten $n_{\text{top}}^{\text{SdH,low}}$, p^{Drude} und n^{Drude} verwendet, vgl. Abbildung 7.14. Die roten Dreiecke und weißen Punkte markieren die experimentell bestimmten WO-Minima und dienen dem direkten Positionsvergleich zwischen Modell und Experiment. Für das Valenzband werden zwei Szenarien betrachtet. In (a) werden die zusätzlichen Modulationsbeiträge zur Leitfähigkeit in y -Richtung für Elektronen und Löcher, $\Delta \sigma_{yy}^e$ und $\Delta \sigma_{yy}^h$, getrennt berechnet und zu den jeweiligen Drude-Beiträgen addiert. In (b) wird stattdessen nur ein einzelner zusätzlicher Leitfähigkeitsbeitrag $\Delta \sigma_{yy}^{\Delta p}$ berücksichtigt, der aus einer effektiven Differenzdichte $\Delta p = p^{\text{Drude}} - n^{\text{Drude}}$ folgt. In dieser Darstellung wird bewusst nur die WO-Struktur betrachtet, um den Vergleich der Minimapositionen nicht durch zusätzliche SdH-Strukturen zu überlagern. Nach [24].

Qualitative Visualisierung mit zusätzlichem SdH-Beitrag

Zur Veranschaulichung der Überlagerung von Weiss- und SdH-Oszillationen sind in Abbildung 8.5 die Messung und dieselbe p–n-Simulation gegenübergestellt, wobei letztere zusätzlich um einen SdH-Beitrag ergänzt wurde. Diese Abbildung dient ausschließlich der qualitativen Visualisierung des Gesamtbildes. Insbesondere wird dadurch anschaulich, wie sich die linearen SdH-Fächer im höheren Magnetfeldbereich mit den parabolischen WO-Strukturen überlagern und wie sich der Bereich der niedrigsten WO-Ordnung $\lambda = 1$ mit beginnenden SdH-Strukturen überschneiden kann.

Für diese qualitative Erweiterung wurde der zusätzliche SdH-Beitrag über den in der Referenz [111] angegebenen Standardausdruck für die longitudinale Leitfähigkeit eines konventionellen 2DEG modelliert. Unter Vernachlässigung der Energieabhängigkeit der Transportstreuzeit τ_0 wird die longitudinale Leitfähigkeit σ_{xx} geschrieben als

$$\sigma_{xx}(B, T) = \frac{n_s e^2 \tau_0}{m^*} \frac{1}{1 + \omega_c^2 \tau_0^2} \left[1 + 2 \frac{1 - \omega_c^2 \tau_0^2}{1 + \omega_c^2 \tau_0^2} \exp\left(-\frac{\pi}{\omega_c \tau_q}\right) \frac{2\pi^2 k_B T / \hbar \omega_c}{\sinh(2\pi^2 k_B T / \hbar \omega_c)} \cos\left(\frac{\pi \hbar n_s}{eB}\right) \right]. \quad (8.3)$$

Der thermische Faktor und die exponentielle Dämpfung entsprechen dabei den aus der Lifshitz-Kosevich-Beschreibung bekannten Temperatur- und Dingle-Terms. Die Gleichung wird hier jedoch nicht zur quantitativen Extraktion von SdH-Parametern verwendet. Stattdessen dient sie lediglich dazu, den in Abbildung 8.5 zusätzlich berücksichtigten SdH-Beitrag qualitativ zu erfassen.

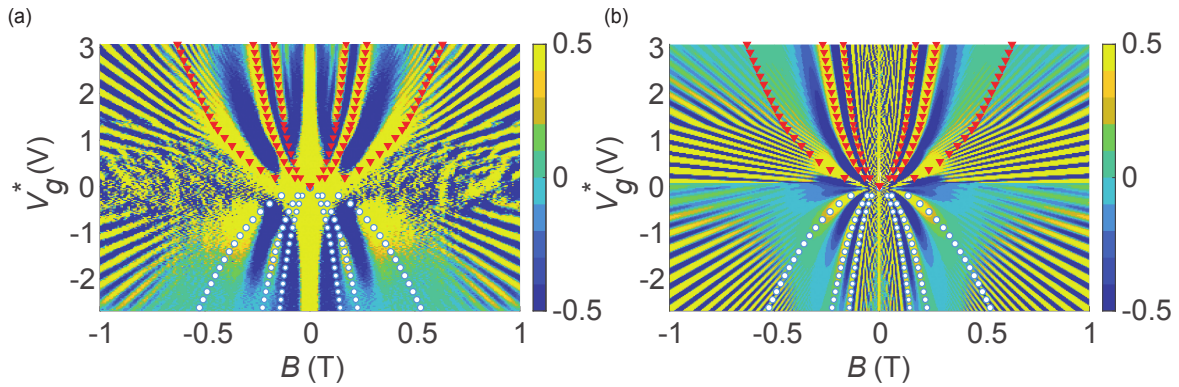


Abbildung 8.5.: Gegenüberstellung von Messung und p–n-Simulation unter zusätzlicher Berücksichtigung eines SdH-Beitrags. Dargestellt ist jeweils die negative zweite Ableitung $-\partial^2 \rho_{xx} / \partial B^2$ in derselben Farbkodierung wie in Abbildung 8.4: Gelb kennzeichnet Minima, Blau Maxima des spezifischen Widerstands. In (a) ist die Messung gezeigt, in (b) eine Simulation, in die im Valenzband ein einzelner Modulationsbeitrag aus der effektiven Differenzdichte $\Delta p = p^{\text{Drude}} - n^{\text{Drude}}$ eingeht und die über den gesamten dargestellten Bereich zusätzlich einen SdH-Beitrag enthält. Dieser beruht auf den jeweils aus den gemessenen SdH-Oszillationen bestimmten Ladungsträgerdichten. Die roten Dreiecke und weißen Punkte markieren die WO-Minima, die an die Messung in (a) angefügt und unverändert auf die Simulation in (b) übertragen wurden, sodass sich beide Teilbilder direkt vergleichen lassen. Die Abbildung dient ausschließlich der Veranschaulichung der Überlagerung von WO- und SdH-Strukturen und geht nicht in die eigentliche WO-Analyse ein.

Parameter	Wert
a	500 nm
$n_{\text{top}}^{\text{SdH,low}}(V_g^*)$ in der Bandlücke	$(-0.023 + 0.913 \cdot V_g^*) \cdot 10^{15} \text{ m}^{-2}$
$n_{\text{top}}^{\text{SdH,low}}(V_g^*)$ im Leitungsband	$(0.233 + 0.738 \cdot V_g^*) \cdot 10^{15} \text{ m}^{-2}$
$p^{\text{Drude}}(V_g^*)$ im Valenzband	$(0.652 - 1.469 \cdot V_g^*) \cdot 10^{15} \text{ m}^{-2}$
$n^{\text{Drude}}(V_g^*)$ im Valenzband	$(0.839 - 0.00534 \cdot V_g^*) \cdot 10^{15} \text{ m}^{-2}$
$k_{F,\text{top}}$	$\sqrt{4\pi n_{\text{top}}^{\text{SdH,low}}}$
$g_{s,\text{top}}$	1
$g_{s,h}$	2
$\alpha_{n,\text{gap}}$	$0.9 \cdot 10^{15} \text{ m}^{-2} \text{V}^{-1}$
$\alpha_{n,\text{CB}}$	$0.6 \cdot 10^{15} \text{ m}^{-2} \text{V}^{-1}$
Leitungsbandkante	1.3 V
$\mu_{e,n}(V_g^*)$	$(34.8 + 30.6 \cdot V_g^*) \text{ m}^2/(\text{V s})$
$\mu_{e,\text{VB}}(V_g^*)$	$(25.15 + 5.08 \cdot V_g^*) \text{ m}^2/(\text{V s})$
$\mu_{h,\text{VB}}(V_g^*)$	$(15.4 + 3.25 \cdot V_g^*) \text{ m}^2/(\text{V s})$
m_e^*	$0.028 m_0$
m_h^*	$0.35 m_0$
$V_{0,e}$	2 meV
$V_{0,h}$	0.2 meV
Δp	$p^{\text{Drude}} - n^{\text{Drude}}$
$k_{F,\Delta p}$	$\sqrt{2\pi \Delta p}$

Tabelle 8.1.: Simulationsparameter nach [24]. Die experimentellen Ladungsträgerdichten $n_{\text{top}}^{\text{SdH,low}}$, p^{Drude} und n^{Drude} werden gateabhängig linearisiert in die Simulation übernommen.

Drittes Modell

Bereits Bovkun *et al.* stützen die Annahme, dass die Valenzbandphysik in HgTe nicht durch ein einfaches isotropes Ein-Kanal-Bild beschrieben werden kann [114]. Eine mögliche bandstrukturelle Deutung dieser Ladungsträgerdichte p^{WO} ergibt sich in der vorliegenden Arbeit aus einem dritten Modell, das im Folgenden diskutiert wird. Eine anschauliche Darstellung dieser Situation ist in Abbildung 8.6 gezeigt. Die k - p -Rechnungen von Gospodarić *et al.* für 80 nm dickes, verspanntes HgTe zeigen, dass der energetisch oberste Valenzbandzweig kein einfaches isotropes Lochsystem bildet. Stattdessen weist er ein Minimum am Γ -Punkt und vier flache Seitenmaxima bei endlichem Wellenvektor auf, die aus der Mischung von Light- und Heavy-Hole-Zuständen hervorgehen [32]. Für Fermi-Niveaus im Valenzband entstehen daraus anisotrope hole-pocket-Zustände, während gleichzeitig topologische Oberflächenzustände im selben Energiebereich erhalten bleiben und mit lochartigen Zuständen des Valenzbands kreuzen oder antikreuzen können [32]. Auch die selbstkonsistenten Hartree- k - p -Rechnungen von Hofer *et al.* zeigen, dass beim Eintritt in das Valenzband mehre-

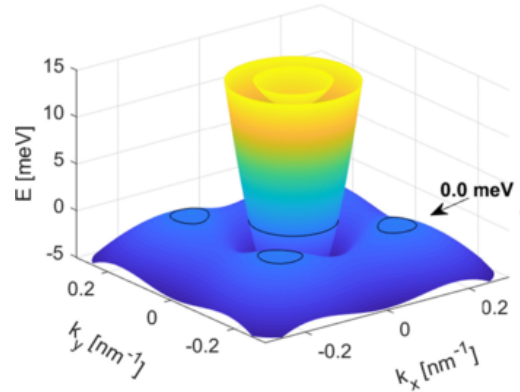


Abbildung 8.6.: Theoretische Bandstruktur einer 80 nm dicken, verspannten HgTe-Schicht. Die vier seitlichen Valenzbandmaxima und das Oberflächenband sind deutlich erkennbar [32].

re Subbänder zum Transport beitragen und dass die große Zustandsdichte der Valenzbandzustände das zusätzliche Gate-Tuning des chemischen Potentials deutlich abschwächt [115]. Dies geht mit einer stärkeren elektrostatischen Abschirmung durch die besetzten Valenzbandzustände einher.

Ausgehend von diesen Ergebnissen erscheint es auch für den hier verwendeten 80 nm-Wafer plausibel, das Valenzband nicht durch eine einzige effektive Lochdichte, sondern durch mindestens zwei lochartige Teilsysteme zu beschreiben. Ein erstes Teilsystem p_1 kann dabei die an den hole pockets bei endlichem Wellenvektor lokalisierten Zustände repräsentieren. Ein zweites Teilsystem p_2 repräsentiert zusätzliche Bulk-Zustände im Valenzband, deren Zustandsdichte vor allem den Transporthintergrund und das Screening mitbestimmt. Elektrostatisch bedeutet dies, dass nicht die gesamte aus dem Drude-Modell bestimmte Lochdichte dasselbe laterale Modulationspotential spürt. Vielmehr ist denkbar, dass die in der Doppel-Gate-Geometrie erzeugte schwache laterale Potentialmodulation mit unterschiedlicher Stärke an die beiden lochartigen Teilsysteme koppelt, sodass p_1 die Weiss-Oszillationen stärker prägt, während p_2 sich überwiegend im diffusen Transporthintergrund und im Screening widerspiegelt. Im Realraum lässt sich diese Situation qualitativ durch Abbildung 8.7 veranschaulichen. Infolge der angelegten Gate-Spannung und der daraus resultierenden Bandverbiegung kann sich ein großer Teil der Löcher in der Nähe der oberen Grenzfläche ansammeln, während ihre Dichte im zentralen Bereich der HgTe-Schicht und an der unteren Grenzfläche deutlich geringer bleibt. Ob die Lochdichte im Schichtzentrum bereits so stark reduziert ist, dass das lokale Fermi-Niveau dort oberhalb der Valenzbandkante liegt, kann im vorliegenden Rahmen jedoch nicht abschließend geklärt werden. Plausibel ist hingegen, dass die weiterhin besetzten elektronischen Zustände an der unteren Oberfläche die Raumladungsverteilung mitbestimmen und so zu einem elektrostatischen Gleichgewicht über die Schichtdicke beitragen.

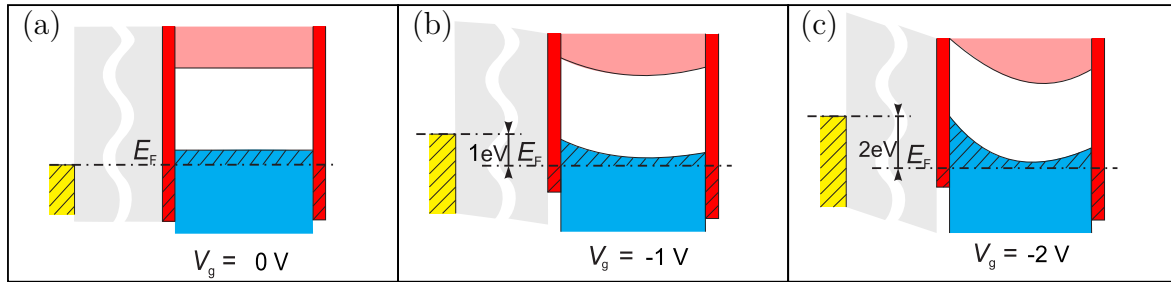


Abbildung 8.7.: Anschaulich angepasste Bandprofile für drei charakteristische Gate-Spannungen im Valenzbandregime. Dargestellt sind Leitungsband (hellrot), Valenzband (blau) und die topologischen Oberflächenzustände (rot). In (a) bei $V_g = 0$ V sind die Bänder näherungsweise flach. Das Fermi-Niveau liegt im Valenzband, sodass sowohl Lochzustände im Valenzband als auch elektronische Oberflächenzustände besetzt sind. In (b) führt eine negative Gate-Spannung von $V_g = -1$ V zu einer verstärkten Bandverbiegung an der oberen Oberfläche. Dadurch nimmt die Besetzung der Valenzbandzustände nahe der oberen Grenzfläche zu, während sie im zentralen Bereich des Films geringer ausfällt und an der unteren Grenzfläche nur schwach verändert wird. In (c) ist dieser Effekt für $V_g = -2$ V nochmals verstärkt. Die Skizze veranschaulicht damit, dass im Valenzband trotz einer insgesamt zusammenhängenden Lochdichte Bereiche mit unterschiedlich starker Gate-Kopplung und potenziell unterschiedlicher Kopplung an das Modulationspotential haben können. Die Darstellung ist schematisch und dient der qualitativen Einordnung der im Valenzband diskutierten Mehrkomponentensituation. Ausgehend von den in Abbildung 5.3 gezeigten Bandprofilen nach [16].

Ein solches Drei-Komponenten-Bild aus Oberflächenelektronen und zwei lochartigen Teilsystemen lässt sich phänomenologisch durch

$$\sigma_{yy}^{tot} = \sigma_{yy}^e + \sigma_{yy}^{p_1} + \sigma_{yy}^{p_2} + \eta_1 \Delta\sigma_{yy}^{p_1} + \eta_2 \Delta\sigma_{yy}^{p_2}, \quad \eta_1, \eta_2 \in [0, 1]$$

charakterisieren. Die Parameter η_1 und η_2 beschreiben dabei, wie stark die beiden Lochsysteme an das laterale Modulationspotential koppeln. Sie lassen sich phänomenologisch als Kopplungsfaktoren verstehen, die die wirksame Modulationsamplitude der jeweiligen Leitfähigkeitskorrektur reduzieren. Für $\eta_1 > 0$ und $\eta_2 = 0$ trägt nur die zusätzliche Leitfähigkeitskorrektur $\eta_1 \Delta\sigma_{yy}^{p_1}$ des ersten Teilsystems p_1 zu den Weiss-Oszillationen bei. Für $\eta_2 > 0$ überlagern sich die Beiträge beider Lochsysteme. In diesem Fall sind verbreiterte bzw. überlagerte Minima, eine verringerte Oszillationsamplitude oder eine Verschiebung der scheinbar wirksamen Dichte zu erwarten. Dieses dritte Modell ist mit den vorliegenden Daten nicht eindeutig überprüfbar. Es bietet jedoch eine physikalisch plausible Erklärung dafür, warum die im Valenzband aus den Weiss-Oszillationen extrahierte Dichte weder mit der gesamten Drude-Lochdichte noch zwingend mit einer einfachen Differenzdichte identisch sein muss. Analog ließe sich auch für die Oberflächenelektronen ein zusätzlicher Leitfähigkeitsbeitrag einführen, wie bereits im ersten Modell beschrieben, und mit einem eigenen Kopplungsfaktor an das Modulationspotential versehen. Streng genommen kann dieser Effekt zusätzlich sowohl für die obere als auch für die untere Oberfläche berücksichtigt werden. Im dritten Modell wird jedoch eine kompakte Beschreibung gewählt, die auf die für die hier diskutierte Fragestellung wesentlichen Beiträge fokussiert.

Zusammenfassung

Die Simulationen zeigen, dass sich die WOs auf der Elektronenseite bereits im einfachen Bild der oberen Oberfläche konsistent beschreiben lassen. Sowohl die Minima-Positionen als auch die Größenordnung des wirksamen Modulationspotentials im Leitungsband und der Bandlücke werden damit plausibel erfasst. Im Valenzband ist die Situation deutlich komplexer. Die additive Beschreibung zusätzlicher Leitfähigkeiten von Elektronen- und Lochbeiträgen reproduziert die experimentellen Minima-Positionen nicht zufriedenstellend, während die Beschreibung über eine effektive Differenzdichte $\Delta p = p^{\text{Drude}} - n^{\text{Drude}}$ phänomenologisch eine deutlich bessere Übereinstimmung liefert. Zugleich legen die bandstrukturellen und selbstkonsistenten Rechnungen der Referenzen [32, 116] nahe, dass das Valenzband nicht durch nur ein einziges Lochsystem beschrieben werden kann, sondern mehrere lochartige Beiträge zu berücksichtigen sind. Vorstellbar wäre daher ein Modell, das mehrere Beiträge mit unterschiedlicher räumlicher Lage, unterschiedlicher Zustandsdichte und unterschiedlich starker Kopplung an die schwache laterale Modulation berücksichtigt.

Damit deutet sich an, dass eine weiterführende Beschreibung wahrscheinlich in einer Kombination mehrerer der vorgestellten Modelle und Ansätze liegt. Naheliegender wäre dementsprechend ein erweitertes Modell, in dem ein lochartiges Teilsystem aus dem dritten, bandstrukturell motivierten Bild die für die WOs relevante Lochdichte liefert, während gleichzeitig die Leitfähigkeitsbeiträge der elektronischen Oberflächenzustände erhalten bleiben. Darüber hinaus erscheint es plausibel, auch den Beitrag der unteren Oberfläche nicht vollständig zu vernachlässigen, sondern mit einer eigenen, gegenüber der oberen Oberfläche reduzierten Gewichtung zu berücksichtigen. Ein solches Mehr-

komponentenmodell könnte eine physikalische Grundlage für die im zweiten Szenario phänomenologisch erfolgreiche effektive Differenzdichte liefern und zugleich die im Valenzband zu erwartende selektive Kopplung verschiedener Zustände an die Modulation auf natürliche Weise abbilden. Die Zahl der freien Parameter und die mögliche Vielfalt der Kombinationen wird dabei jedoch schnell groß, sodass eine eindeutige Bestimmung innerhalb des hier verwendeten Grundgerüsts nicht möglich ist. Die vorliegenden Simulationen sind daher vor allem als strukturierender erster Zugang zu verstehen, der die wesentlichen physikalischen Randbedingungen sichtbar macht und eine Richtung für weiterführende Modelle vorgeben könnte.

9. Variation des Modulationspotentials

Nach der Auswertung und der phänomenologischen Simulation der WOs soll noch der Frage nachgegangen werden, wie sich die wirksame Modulationsstärke V_0 in der Doppel-Gate-Struktur experimentell kontrolliert einstellen lässt. Dabei ist wichtig, dass V_0 nicht direkt aus den angelegten Gate-Spannungen abgelesen werden kann. Im Doppel-Gate-System verändern V_{tg} und V_{sg} sowohl das mittlere Oberflächenpotential als auch die laterale Modulationsamplitude. Zusätzlich wird das an der HgTe-Oberfläche ankommende Potential durch Screening reduziert, wie in Abschnitt 4.2.3 diskutiert wurde.

Experimentelle Kontrolle des Modulationspotentials

Die in Abbildung 7.6 gezeigte Gate-Abhängigkeit des berechneten Modulationspotentials liefert bereits eine erste Orientierung in Bezug auf zwei Gate-Spannungen. Für die eigentliche Magnetotransportanalyse ist jedoch wichtig, ob sich die Modulationsstärke auch experimentell reproduzierbar variieren lässt. Dazu wurde im Leitungsband der Abbildung 9.1(a) eine eigene Modulationsstärkenachse definiert, entlang derer die Probe systematisch durchfahren wurde.

Abbildung 9.1 zeigt, dass sich die Stärke des Modulationspotentials entlang dieser Achse gezielt verändern lässt. Einzelne Sweeps werden in Abbildung 9.1(c) gezeigt und lassen darauf schließen, dass sich die Amplitude der Oszillationen in einem eng begrenzten Bereich des Leitungsbandes reproduzierbar verändern lässt. Dies bestätigt zugleich, dass das Modulationspotential als eigene Kontrollgröße neben der Lage des Fermi-Niveaus behandelt werden kann. Bei praktisch verschwindender Modulation sind im Linienplot keine klaren Kommensurabilitätsstrukturen sichtbar. Mit zunehmender Modulationsstärke treten zunächst einzelne Minima und anschließend eine deutlich ausgeprägte WO-Struktur auf. Eine beliebig große Modulation ist dabei jedoch nicht automatisch vorteilhaft, da mit weiter wachsender Modulationsstärke die Auflösung der Oszillationen auch wieder reduziert wird [20, 73]. Die Richtung der Trajektorie in der Gate-Map wird so gewählt, dass das mittlere elektrostatische Potential und damit die Lage des Fermi-Niveaus näherungsweise konstant bleiben. Dadurch wird entlang der Trajektorie hauptsächlich die laterale Modulationsstärke verändert, während sich die Gesamtladungsträgerdichte und die Ladungsträgerdichte der oberen Oberfläche nicht verändern. Entsprechend ändern sich die erwarteten Magnetfeldpositionen der WO-Minima nicht, und es lässt sich das Modulationspotential genauer definieren. Genau dies spiegelt sich in Teilbild (b) wider. Die durch die Niedrigfeld-SdH-Ladungsträgerdichten bestimmten vertikalen Positionen der WO-Minima bleiben weitgehend konsistent, während die Oszillationen mit zunehmender Modulationsstärke immer deutlicher hervortreten. Der dominierende Effekt der definierten Richtung mit den Pfeilen in Abbildung 9.1(a) ist daher eine gezielte Änderung der wirksamen Potentialmodulation.

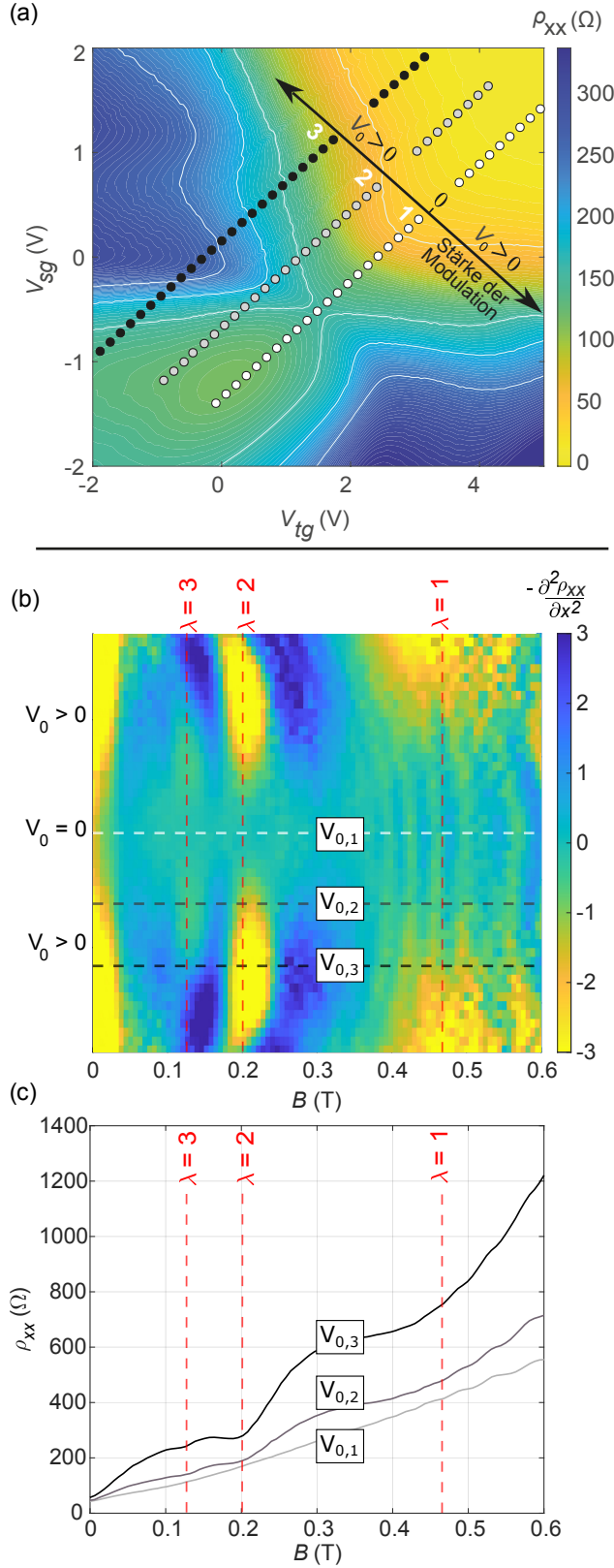


Abbildung 9.1.: Untersuchung der Weiss-Oszillationen für unterschiedliche Modulationsstärken. (a) Gate-Map bei $B = 0$ T mit der definierten Achse der Modulationsstärke. Die drei als Punktlinien markierten Trajektorien entsprechen drei repräsentativen Modulationsniveaus und verlaufen durch denselben Bereich des Leitungsbandes. Dadurch wird gewährleistet, dass sich die gezeigten Unterschiede in der WO-Struktur im Wesentlichen auf die veränderte Modulationsstärke zurückführen lassen und nicht auf einen Wechsel des zugrunde liegenden Transportregimes. (b) Entlang dieser Achse wurde für jeden Punkt ein Magnetfeldsweep zwischen $B = 0$ T und 0.6 T aufgenommen. Dargestellt ist die negative zweite Ableitung des spezifischen Widerstands, in der die WO-Minima besonders deutlich hervortreten. Die vertikalen roten gestrichelten Linien markieren die aus den Niedrigfeld-SdH-Oszillationen bestimmte erwartete Lage der WO-Minima für $\lambda = 1, 2$ und 3. Die horizontalen gestrichelten Linien kennzeichnen die drei ausgewählten Modulationsniveaus $V_{0,1}$ bis $V_{0,3}$, für die in (c) exemplarische Magnetfeldsweeps gezeigt sind. (c) Zugehörige Magnetfeldsweeps des spezifischen Widerstands $\rho_{xx}(B)$ für diese drei Modulationsniveaus. Für $V_{0,1}$ sind noch keine klar aufgelösten Weiss-Oszillationen erkennbar. Für $V_{0,2}$ und $V_{0,3}$ treten die Oszillationen dagegen zunehmend deutlich hervor. Unterhalb von 0.05 T nimmt der positive Magnetowiderstand mit steigender Modulationsamplitude zu.

9.1. Elektrostatische Simulation des Modulationspotentials

Zur Verknüpfung der experimentell eingestellten Modulationsstärke mit der resultierenden Potentiallandschaft an der oberen HgTe-Oberfläche wurde das elektrostatische Potential mit COMSOL MULTIPHYSICS simuliert. Die theoretische Grundlage dafür ist die Lösung der Poisson-Gleichung für gate-definierte Halbleiterstrukturen [117]. Für die vorliegende Probe mit $a = 500 \text{ nm}$ und $b_{\text{sg}} : b_{\text{tg}} = 150 \text{ nm} : 350 \text{ nm}$ wurde die Berechnung auf den vollständigen Schichtstapel angewandt. Dabei gingen die gemessenen Schichtdicken und die Permittivitäten der einzelnen Materialien als Eingangsgrößen ein.

Mithilfe der Poisson-Gleichung

$$\nabla \cdot [\varepsilon_r(\mathbf{r}) \varepsilon_0 \nabla \phi(\mathbf{r})] = -\rho(\mathbf{r}) \quad (9.1)$$

wurde die ungescreente Feldverteilung berechnet. Für die relative Permittivität wurden folgende Werte verwendet:

$$\varepsilon_r = \begin{cases} 1.0 & \text{Vakuum,} \\ 5.7 & \text{Al}_2\text{O}_3, \\ 3.9 & \text{SiO}_2, \\ 10.31 & \text{CdTe,} \\ 12.4 & \text{CdHgTe,} \\ 18.0 & \text{HgTe.} \end{cases} \quad (9.2)$$

Das so erhaltene Potential entspricht einem ungescreenten Modulationspotential, bei dem die geometrische Übertragung durch den Schichtstapel bereits berücksichtigt ist. Die elektronische Abschirmung der oberen Oberfläche wird anschließend separat in der Thomas-Fermi-Näherung behandelt.

Die ungescreente Poisson-Rechnung in Abbildung 9.2 dient daher in erster Linie der qualitativen Analyse des lateralen Modulationspotentials. Sie zeigt für eine repräsentative Gate-Konfiguration die räumliche Form des elektrostatischen Potentials an der oberen HgTe-Oberfläche und macht bereits sichtbar, dass das Profil nicht exakt kosinusförmig ist. Für einen direkten Vergleich mit dem Experiment ist diese rein elektrostatische Betrachtung jedoch nicht ausreichend.

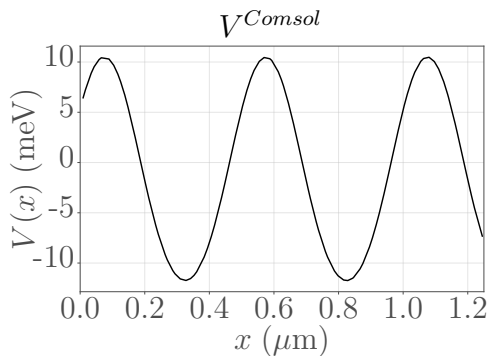


Abbildung 9.2.: Mit COMSOL MULTIPHYSICS mittels der Finite-Elemente-Methode aus der Poisson-Gleichung berechnetes ungescreentes Potentialprofil an der oberen HgTe-Oberfläche für theoretische Werte von $V_{tg} = 1 \text{ V}$ und $V_{sg} = 0.8 \text{ V}$. Das Verhältnis von Streifenbreite zum Zwischenbereich beträgt $b_{\text{sg}} : b_{\text{tg}} = 150 \text{ nm} : 350 \text{ nm}$. In dieser Form überschätzt das Profil die tatsächliche Modulationsstärke und dient daher ausschließlich der qualitativen Einordnung des elektrostatischen Potentials.

Mit der Variation von V_{sg} alleine wird nicht nur das laterale Potentialprofil verändert, sondern zugleich auch das mittlere Oberflächenpotential verschoben. Damit ändert sich im Allgemeinen auch die Lage des Fermi-Niveaus. Das wirksame Modulationspotential kann deshalb nicht einfach mit der Differenz der angelegten Gate-Spannungen identifiziert werden. Dieselbe mittlere Ladungsträgerdichte kann je nach Kombination von V_{tg} und V_{sg} mit sehr unterschiedlichen lateralen Potentialprofilen verknüpft sein und umgekehrt. Um die experimentell eingestellte Modulationsstärke mit der berechneten Potentiallandschaft zu verknüpfen, muss die Modulation daher in der Simulation entlang der in Abbildung 9.1(a) definierten Trajektorie verfolgt werden.

Für eine möglichst realistische Zuordnung muss zusätzlich die Hysterese beider Gates berücksichtigt werden. Aufgrund der experimentellen Bedingungen führt sie in der Gate-Map, siehe Abbildung 9.1(a), zu einer Verschiebung des Nullpunkts des Modulationspotentials relativ zu den angelegten Gate-Spannungen. Für einen besseren Vergleich mit den berechneten Werten werden die Gate-Spannungen mit $V_{tg} = 0\text{V}$ und $V_{sg} = 0\text{V}$ auf den Ladungsneutralitätspunkt verschoben. Es wurden Verschiebungen von etwa $V_{tg,hys} \approx 1.75\text{V}$ und $V_{sg,hys} \approx -0.5\text{V}$ angesetzt. Damit entspricht die in Abbildung 9.2 gezeigte Simulation bei $V_{tg} = 1\text{V}$ und $V_{sg} = 0.8\text{V}$ näherungsweise einer angepassten Vergleichs-Gate-Konfiguration bei $V_{tg,vgl} = 2.75\text{V}$ und $V_{sg,vgl} = 0.3\text{V}$. Ein Vergleich mit der experimentellen Zuordnung des Modulationspotentials entlang der V_g^* -Richtung für $V_{0,1}$ in der Abbildung 9.1(a), in der kein Modulationspotential anliegt, zeigt noch leichte Abweichungen und macht die Grenzen dieser Näherung deutlich. Die qualitative Entwicklung der Modulationsstärke entlang der gewählten Trajektorie bleibt jedoch erhalten.

9.2. Thomas-Fermi-Screening des Modulationspotentials

In der Thomas-Fermi-Näherung wird die Abschirmung einer zweidimensionalen Elektronenschicht durch die dielektrische Funktion $\epsilon(q) = 1 + q_{TF}/q$ beschrieben. Dabei ist die Thomas-Fermi-Wellenzahl durch $q_{TF} = g_s m^* e^2 / (4\pi\epsilon_0\epsilon_{eff}\hbar^2)$ festgelegt. Mit dem effektiven Bohr-Radius $a_B^* = 4\pi\epsilon_0\epsilon_{eff}\hbar^2 / (m^* e^2)$ ergibt sich $\epsilon(q) = 1 + g_s / (qa_B^*)$. [20, 118, 119]

Für die Coulomb-Wechselwirkung wurde die effektive Umgebungsdielektrizität an der Grenzfläche zwischen HgTe und CdHgTe verwendet. Mit $\epsilon_{HgTe} = 18.0$ und $\epsilon_{CdHgTe} = 12.4$ ergibt sich dafür $\epsilon_{eff} = (\epsilon_{HgTe} + \epsilon_{CdHgTe})/2 = 15.2$. Das entlang der x -Richtung extrahierte Modulationspotential $V(x)$ wurde anschließend für die Gitterperiode $a = 500\text{nm}$ in Fourierkomponenten zerlegt. Für eine Komponente mit dem Wellenvektor $q_n = 2\pi n/a$ folgt dann in der Thomas-Fermi-Näherung $\epsilon(q_n) = 1 + q_{TF}/q_n$, sodass die gescreente Komponente durch $V_n^{TF} = V_n/\epsilon(q_n)$ gegeben ist. So erhält man aus dem mit COMSOL MULTIPHYSICS berechneten elektrostatischen Potential das wirksame, elektronisch abgeschirmte Modulationspotential.

Das resultierende Thomas-Fermi-gescreente Modulationspotential für eine repräsentative Gate-Konfiguration ist in Abbildung 9.3 dargestellt. Mit der effektiven Masse $m^* = 0.028 m_0$, der effektiven Umgebungsdielektrizität $\epsilon_{eff} = 15.2$ und $g_s = 1$ ergibt sich für die Grundharmonische $n = 1$ eine gescreente Modulationsamplitude von $V_1^{TF} = 2.965\text{meV}$; das zugehörige Fourierspektrum für $n = 1$ bis $n = 8$ ist in Ab-

Abbildung 9.4 gezeigt. Experimentell wurde die Modulationsamplitude in der Bandlücke auf etwa 3.5 meV und im Leitungsband für die oberen Oberflächenzustände auf etwa 2 meV abgeschätzt. Damit liegt der Thomas-Fermi-gescreente Wert in derselben Größenordnung wie die experimentell bestimmten Modulationsamplituden. Eine wesentliche Unsicherheit bleibt jedoch die Zuordnung der angelegten Gate-Spannungen, da die in der Simulation verwendete Gate-Konfiguration nicht exakt der experimentellen Gate-Konfiguration entspricht, sondern nur näherungsweise angepasst werden kann.

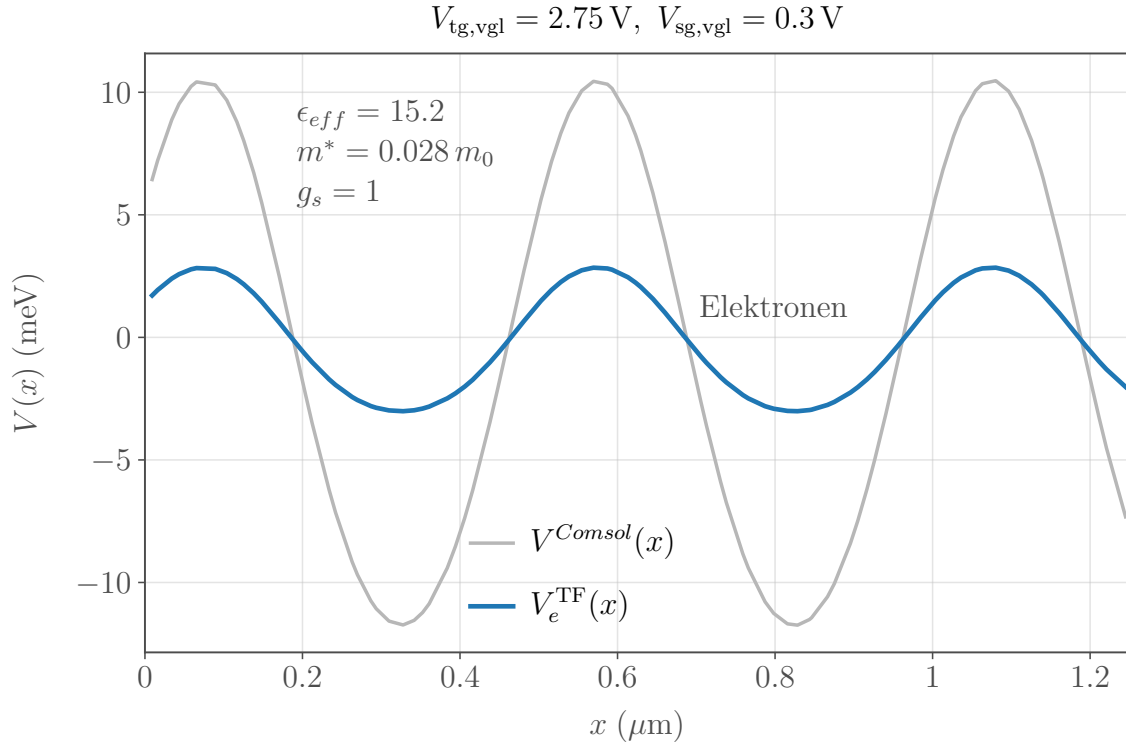


Abbildung 9.3.: Thomas-Fermi-gescreentes Modulationspotential (Blau) für dieselbe Gate-Konfiguration wie in Abbildung 9.2 mit $V_{tg,vgl} = 2.75$ V und $V_{sg,vgl} = 0.3$ V. Die ungescreente COMSOL-Modulation ist in Grau dargestellt. Das Screening reduziert die Modulationsstärke deutlich und führt zu einer Amplitude $V_1^{TF} = 2.965$ meV, die dem Experiment näherungsweise entsprechen könnte.

Die Entwicklung des Thomas-Fermi-gescreenten Modulationspotentials entlang der in Abbildung 9.1(a) gezeigten Richtung, welche die Änderung der Modulationsstärke beschreibt, ist in Abbildung 9.5 für mehrere Gate-Spannungen dargestellt. Die in der Abbildung gezeigten Gate-Kombinationen liegen dabei nicht exakt auf dieser Trajektorie, sondern wurden bei konstantem $V_{tg,vgl} = 2.75$ V und variiertem $V_{sg,vgl}$ zwischen -0.3 V und 0.5 V gewählt. Da die Darstellung jedoch nur die Veränderung des Potentials entlang der Richtung zunehmender Modulationsstärke illustrieren soll, ist diese Wahl als Näherung ausreichend. Für einen etwas genaueren Vergleich der Gate-Spannungen mit realen Messungen müsste die Trajektorie genauer definiert werden, insbesondere da die Lage des Fermi-Niveaus ebenfalls von der Gate-Kombination abhängt. Ziel ist es nicht, quantitative Werte zu bestimmen, sondern ein besseres Verständnis für die Entwicklung des Modulationspotentials entlang der definierten Richtung zu vermitteln und dabei die größten Stellschrauben klarer einzugrenzen.

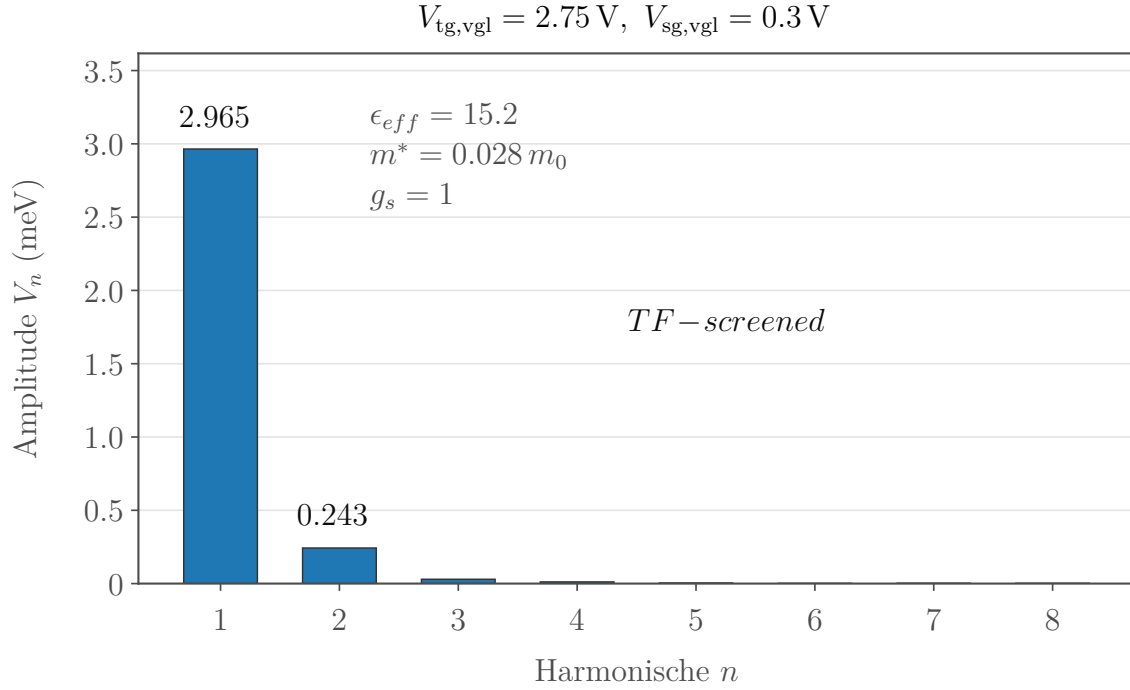


Abbildung 9.4.: Fourieramplituden des Thomas-Fermi-gescreenen Modulationspotentials für dieselbe Gate-Konfiguration wie in Abbildung 9.3 mit $V_{\text{tg,vgl}} = 2.75 \text{ V}$ und $V_{\text{sg,vgl}} = 0.3 \text{ V}$. Die Grundharmonische $n = 1$ dominiert auch nach dem Screening. Die höheren Harmonischen $n = 2$ bis 8 sind deutlich schwächer ausgeprägt. Für die Grundharmonische ergibt sich eine gescreente Amplitude von $V_1^{\text{TF}} = 2.965 \text{ meV}$.

Abbildung 9.5 zeigt, dass sich die Grundharmonische entlang der gewählten Trajektorie kontinuierlich bis nahe an einen kompensierten Zustand unterdrücken lässt. Beim Durchlaufen dieses kompensierten Zustands ändert die Grundharmonische ihr Vorzeichen, was einer Phasenverschiebung um π entspricht. Diese Phasenverschiebung beeinflusst die Leitfähigkeitskorrektur nicht, da der Kosinus dort quadratisch eingeht. Für die in Kapitel 8 beschriebene WO-Simulation ist die Beschreibung über eine effektive Modulationsamplitude ausreichend, solange die Grundharmonische den dominierenden Beitrag liefert. In der Nähe des Kompensationspunkts, an dem die Modulation nahezu null werden soll, ist diese Näherung jedoch nicht mehr hinreichend, da dort die relativen Beiträge höherer Fourierkomponenten leicht zunehmen. Dieses Verhalten ist bereits bekannt [83] und wird für das hier betrachtete Doppel-Gate-System in Anhang A kurz diskutiert. Dies zeigt, dass die Doppel-Gate-Struktur eine kontrollierte Einstellung der lateralen Modulationsstärke ermöglicht.

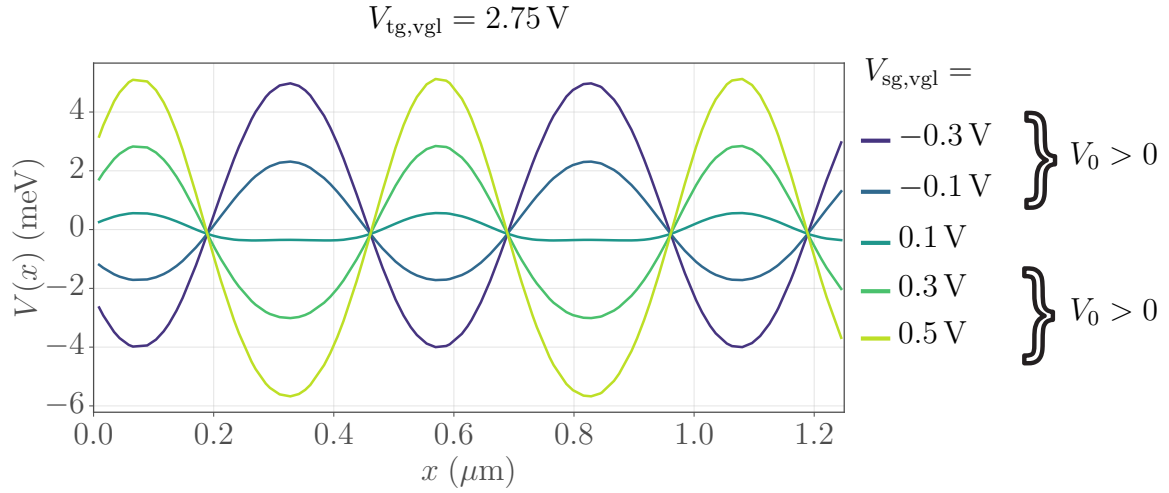


Abbildung 9.5.: Vergleich des Thomas-Fermi-gescreenten Potentials für mehrere Gate-Kombinationen. Die gezeigten Punkte liegen nicht exakt auf der in Abbildung 9.1(a) definierten Trajektorie der Modulationsstärke. Sie bilden jedoch dieselbe effektive Änderung der lateralen Modulationsstärke nach. Für die Berechnung wurde $V_{\text{tg,vgl}} = 2.75 \text{ V}$ konstant gehalten und $V_{\text{sg,vgl}}$ zwischen -0.3 V , -0.1 V , 0.1 V , 0.3 V und 0.5 V variiert. Die Kurven sind von Blau nach Gelb dargestellt. Für die Simulation bei $V_{\text{sg,vgl}} = 0.1 \text{ V}$ ist die Grundharmonische stark unterdrückt, und die verbleibende Restmodulation deutet auf höhere Harmonische hin. Der Vergleich zeigt, dass sich die Modulationsstärke entlang der Trajektorie kontinuierlich bis nahe an einen kompensierten Zustand unterdrücken lässt, bevor sie mit weiterem Anstieg von $V_{\text{sg,vgl}}$ wieder zunimmt.

Die hier verwendete Thomas-Fermi-Abschätzung beschreibt das Screening nur in einer vereinfachten effektiven Form. Sie berücksichtigt im Wesentlichen die obere Oberfläche und liefert damit vor allem dann eine plausible Größenordnung des wirksamen Modulationspotentials, wenn die Grundharmonische den dominierenden Beitrag liefert. Im Leitungsband ist jedoch zu erwarten, dass zusätzlich besetzte Bulk-Zustände das Screening weiter verstärken.

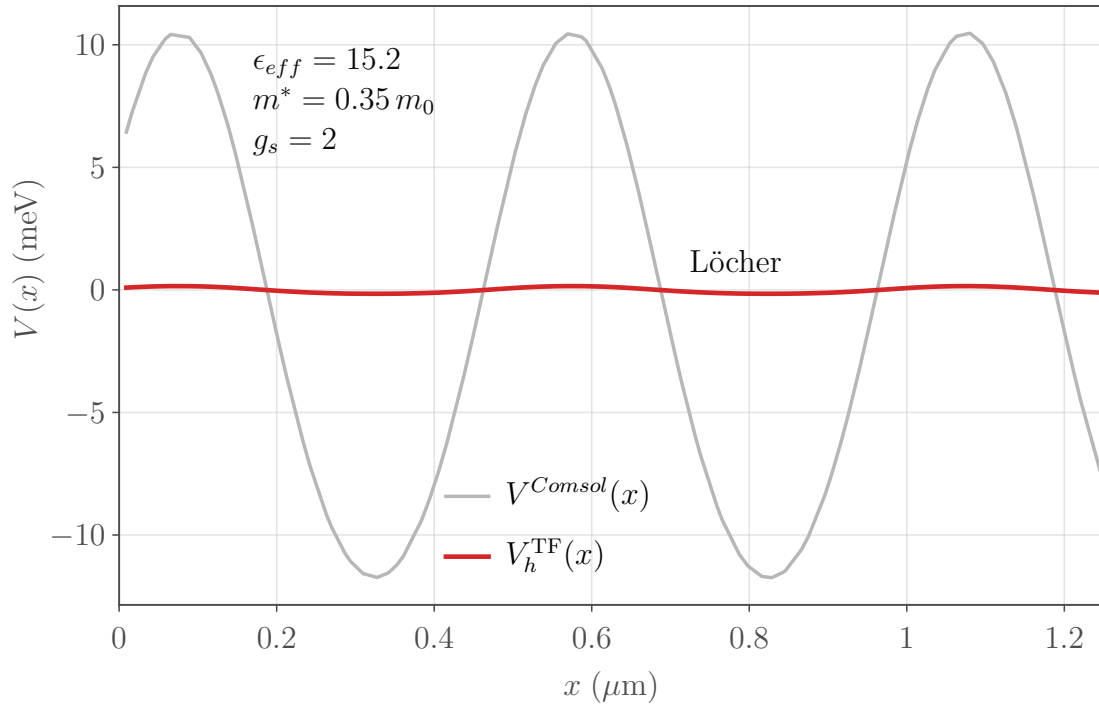


Abbildung 9.6.: Thomas-Fermi-gescreentes Modulationspotential für lochartige Zustände mit derselben Vergleichs-Gate-Konfiguration wie in Abbildung 9.3. Für die Abschätzung wurden $m^* = 0.35 m_0$, $g_s = 2$ und $\epsilon_{\text{eff}} = 15.2$ verwendet. Die Amplitude der Grundharmonischen beträgt $V_1^{\text{TF}} = 0.159 \text{ meV}$. Die effektive Masse m^* sowie der g_s -Faktor haben einen großen Einfluss auf das Screening.

Im Valenzband ist die Situation komplexer als in der Bandlücke oder im Leitungsband. Zum einen ist der Beitrag besetzter Oberflächenzustände zum Screening geringer, zum anderen können lochartige Zustände aufgrund ihrer deutlich größeren effektiven Masse einen starken Einfluss auf die Thomas-Fermi-Wellenzahl haben. Für den folgenden Vergleich wird daher ein einfaches Modell betrachtet, in dem lochartige Zustände mit $m^* = 0.35 m_0$ und $g_s = 2$ an derselben Position lokalisiert sind wie die Elektronen der oberen Oberfläche.

Als Ausgangspunkt dient das ungescreente Modulationspotential aus Abbildung 9.2. Darauf wird das Thomas-Fermi-Screening für die beschriebenen lochartigen Zustände angewendet. Das resultierende Potential ist in Abbildung 9.6 dargestellt, die zugehörigen Fourieramplituden in Abbildung 9.7. In diesem einfachen Bild wird die Grundharmonische auf etwa $V_1^{\text{TF}} = 0.159 \text{ meV}$ reduziert. Dieser Wert liegt bereits in der Größenordnung der experimentell bestimmten Modulationsstärke von etwa $V_0 \approx 0.2 \text{ meV}$.

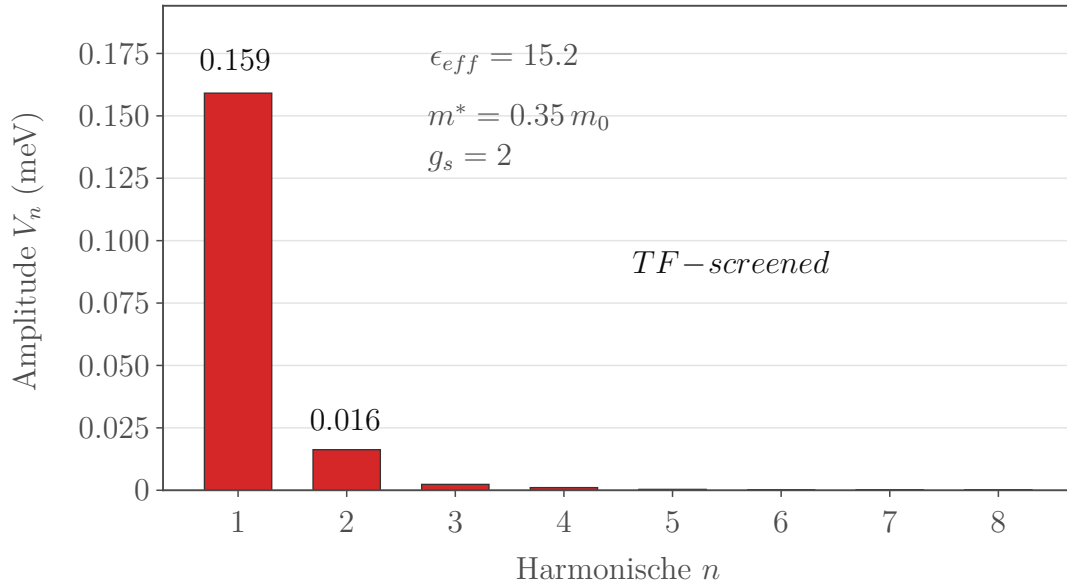


Abbildung 9.7.: Fourieramplituden des Thomas-Fermi-gescreenten Modulationspotentials für lochartige Zustände aus Abbildung 9.6. Bei einer effektiven Masse von $m^* = 0.35 m_0$ und einem g_s -Faktor von 2 wird die Modulationsstärke für Löcher im Valenzband deutlich stärker reduziert als für die Elektronen der oberen Oberfläche. Die Grundharmonische beträgt hier nur noch $V_1^{\text{TF}} = 0.159 \text{ meV}$.

Diese Abschätzung ist jedoch nur qualitativ zu verstehen. Insbesondere werden die Screening-Beiträge der Elektronen der oberen Oberfläche nicht zusätzlich berücksichtigt. Wie sich die verschiedenen Beiträge gemeinsam auf das effektive Modulationspotential auswirken, lässt sich im Rahmen dieses einfachen Modells nicht zuverlässig bestimmen und würde eine selbstkonsistente Berechnung erfordern. Eine solche Berechnung wäre allerdings nur dann aussagekräftig, wenn die räumliche Verteilung der Lochzustände in der 80 nm dicken HgTe-Schicht hinreichend gut bekannt wäre. Da diese Randbedingungen derzeit nicht eindeutig festgelegt sind, bleibt die effektive Modulationsstärke in diesem Bereich hauptsächlich experimentell zugänglich.

10. Zusammenfassung und Ausblick

In dieser Arbeit wurde eine neuartige Gate-Geometrie für einen dreidimensionalen topologischen Isolator auf Basis von verspanntem HgTe entwickelt, hergestellt und für Magnetotransportuntersuchungen eingesetzt. Auf einen 80 nm dicken HgTe-basierten 3D-TI wurde erstmals eine Doppel-Gate-Struktur vollständig auf die Oberseite aufgebracht. Die hergestellte Probe besitzt ein planares Top-Gate und ein darunter liegendes Streifen-Gate, mit dem eine eindimensionale laterale Modulation mithilfe des elektrostatischen Potentials erzeugt werden kann. Im Unterschied zu früheren Doppel-Gate-Konzepten auf Basis von Backgate-Geometrien und Gitterstrukturen aus Graphen [76–78] setzt dieser Ansatz nicht voraus, dass das zu untersuchende Material in einer stapelbaren Heterostruktur vorliegt. Stattdessen wird gezeigt, dass sich eine vergleichbare Funktionalität auch in einer vollständig auf der Oberseite aufgebauten Geometrie realisieren lässt. Damit steht für HgTe-basierte 3D-TIs ein neuer experimenteller Zugang zur Verfügung, um Ladungsträgerdichte und Modulationsstärke getrennt zu steuern.

Ein eigenständiger Teil der Arbeit bestand allein in der Entwicklung und Charakterisierung dieser Gate-Struktur. Dazu gehörten die Herstellung der Doppel-Gate-Probe, die Kalibrierung der Gate-Spannungen unter Berücksichtigung von Hystereseeffekten und die experimentelle Zuordnung des effektiven Modulationspotentials. Die Gate-Map des longitudinalen Widerstands zeigt, dass sich durch die Kombination von Top-Gate-Spannung und Streifen-Gate-Spannung sowohl Bereiche mit nahezu verschwindender Modulation als auch Bereiche mit schwacher und kontrollierter lateraler Modulation einstellen lassen.

Diese neue Probengeometrie ermöglicht es, Kommensurabilitätsoszillationen in allen zugänglichen Transportregimen des HgTe-basierten 3D-TI zu untersuchen. Für positive effektive Gate-Spannungen oberhalb des Ladungsneutralitätspunkts zeigen sich im Elektronenbereich deutlich ausgeprägte Weiss-Oszillationen. Ihre Minimapositionen stimmen sowohl in der Bulk-Bandlücke als auch im Leitungsband sehr gut mit der Ladungsträgerdichte der oberen Oberfläche überein, wie sie aus den Niedrigfeld-SdH-Oszillationen bestimmt wird. Diese Übereinstimmung bestätigt, dass die Weiss-Oszillationen in diesem Bereich durch die Oberflächenzustände der oberen Oberfläche bestimmt werden. Gleichzeitig zeigt die Auswertung eine Änderung der Füllrate an der Leitungsbandkante. Damit spiegelt sich der Übergang vom reinen Oberflächentransport in der Bandlücke zu einem Regime mit zusätzlichen Bulk-Elektronen auch in den Weiss-Oszillationen wider.

Darüber hinaus wird sichtbar, wie stark die Oszillationsamplitude vom Modulationspotential abhängt. Insbesondere beim Übergang von der Bandlücke in das Leitungsband nimmt die Amplitude ab. Dies ist konsistent mit zusätzlichem Screening durch Zustände des Leitungsbands, die das wirksame Modulationspotential an der oberen Oberfläche reduzieren. Abbildung 10.1 veranschaulicht diesen Zusammenhang anhand einer perspektivischen Darstellung der Minima der Weiss-Oszillationen in Abhängigkeit von

den Gate-Spannungen und macht die Regimeabhängigkeit des Modulationspotentials sichtbar.

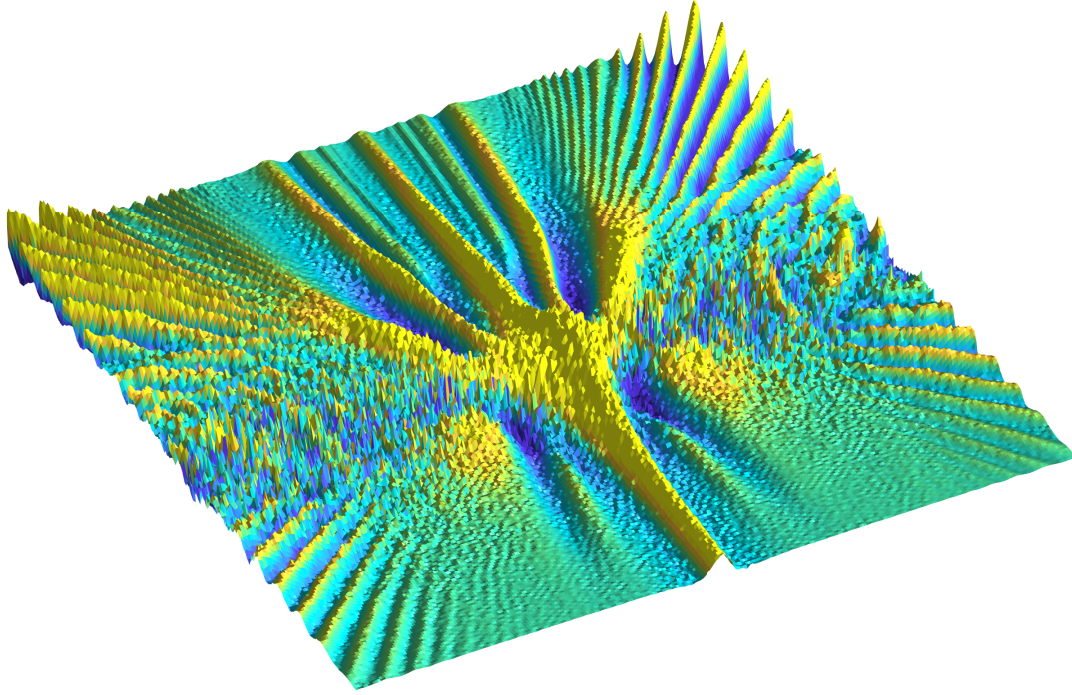


Abbildung 10.1.: Perspektivische Darstellung des gemessenen Farbplots der positiven zweiten Ableitung des longitudinalen Widerstands ohne Achsenbeschriftung. In dieser Ansicht treten die Minima plastisch hervor. Gelb kennzeichnet die Minima und macht ihre Entwicklung in den verschiedenen Transportregimen sichtbar.

Ein prägendes Ergebnis der Arbeit ist der erstmalige Nachweis von Weiss-Oszillationen im Valenzband eines HgTe-basierten 3D-TI. Diese Beobachtung ist besonders bemerkenswert, weil die aus den Weiss-Oszillationen extrahierten effektiven Ladungsträgerdichten dort nicht mit den aus Hall-Messungen, dem Zwei-Ladungsträger-Drude-Modell oder aus SdH-Oszillationen erhaltenen Dichten übereinstimmen. Der Ursprung der Weiss-Oszillationen im Valenzband lässt sich daher nicht mit denselben Methoden beschreiben, die für den Elektronenbereich erfolgreich sind. Die Beobachtung wurde zusätzlich durch Messungen an Proben mit anderen Gitterperioden und durch eine alternative Realisierung des Modulationspotentials mittels Lackstreifen gestützt [24, 25].

Zur Einordnung dieser Beobachtung wurden drei Modellansätze betrachtet. Im ersten Modell werden Elektronen- und Lochbeiträge im Valenzband als voneinander unabhängige Kanäle behandelt, deren modulationsinduzierte Leitfähigkeitskorrekturen sich addieren. Dieses Bild ist naheliegend, beschreibt die experimentellen Minimapositionen im Valenzband jedoch nur unzureichend. Im zweiten Modell wird angenommen, dass für die Weiss-Oszillationen im Valenzband eine effektive Differenzdichte $\Delta p = p^{\text{Drude}} - n^{\text{Drude}}$ verantwortlich ist. Mit diesem phänomenologischen Ansatz ergibt sich eine deutlich bessere Übereinstimmung mit den beobachteten Minimapositionen. Im dritten Modell wird die Valenzbandphysik bandstrukturell interpretiert. Dabei wird angenommen, dass die lochartigen Zustände im Valenzband nicht als einzelnes homogenes Lochsystem beschrieben werden können, sondern in mehrere Teilsysteme mit unterschiedlicher räumlicher Lage, unterschiedlicher Zustandsdichte und unterschiedli-

cher Kopplung an die laterale Modulation aufgeteilt sind. Diese dritte Sichtweise wird durch neuere bandstrukturelle und selbstkonsistente Rechnungen gestützt. Die Arbeiten von Gospodarič *et al.* und Hofer *et al.* zeigen, dass das Valenzband der verspannten HgTe-Schicht komplex aufgebaut ist und mehrere lochartige Beiträge enthalten kann [32, 115]. Berücksichtigt man diese Arbeiten als zusätzliche Randbedingung für die Interpretation der Weiss-Oszillationen, dann erscheint eine Beschreibung durch eine Kombination aller drei Modelle plausibel.

Ergänzend wurde das durch die Doppel-Gate-Struktur erzeugte elektrostatische Potential numerisch modelliert. Diese Rechnungen liefern eine plausible Größenordnung des wirksamen Modulationspotentials und bilden seine qualitative Entwicklung mit den Gate-Spannungen nach. Für eine vollständig quantitative Beschreibung reichen sie jedoch noch nicht aus. Die Kombination aus elektrostatischer COMSOL-Simulation und Thomas-Fermi-Screening erlaubt bereits eine Vorabschätzung des wirksamen Modulationspotentials und erklärt insbesondere die Abnahme des Modulationspotentials im Leitungsband durch zusätzliches Screening. Für das Valenzband ist dieser Zugang jedoch noch unzureichend, da die dort beobachteten Weiss-Oszillationen darauf hinweisen, dass sowohl die komplexe Bandstruktur als auch die räumliche Verteilung der Ladungsträger über die Schichtdicke hinweg eine wichtige Rolle spielen. Eine genauere Beschreibung würde eine selbstkonsistente Hartree- $k \cdot p$ -Rechnung erfordern, in der die Bandstruktur von HgTe, die Besetzung mehrerer Kanäle sowie ihre unterschiedliche Kopplung an Top-Gate und Streifen-Gate gleichzeitig berücksichtigt werden. Dadurch ließe sich im Valenzband untersuchen, wie sich Screening, Bandverbiegung und eine Aufspaltung in mehrere lochartige Beiträge gegenseitig beeinflussen.

Über die konkrete HgTe-Struktur hinaus zeigt diese Arbeit, dass eine Doppel-Gate-Struktur ein wirkungsvolles Werkzeug sein kann, um das Zusammenspiel verschiedener Transportkanäle in komplexen Mehrkanalsystemen zu untersuchen. Die semiklassische Kommensurabilitätsbedingung verknüpft die Ladungsträgerdichte mit den erwarteten Positionen der Weiss-Oszillationen und erlaubt dadurch zu prüfen, welche Transportkanäle wirksam an das laterale Modulationspotential koppeln. Gleichzeitig reagiert die Messung empfindlich auf Größen wie das wirksame Modulationspotential, die effektive Masse, die Beweglichkeit, die mittlere freie Weglänge und das Screening durch weitere Ladungsträger, die sich in einer globalen Transportmessung nur schwer kanalaufgelöst bestimmen lassen. Gerade in Materialien mit mehreren parallel leitenden Beiträgen kann die laterale Modulation damit zeigen, welcher Anteil des Systems tatsächlich über eine definierte Längenskala quasiballistisch transportiert wird. In diesem Sinne macht die laterale Modulation kanalabhängige Transportbeiträge in modernen Halbleiter- und topologischen Materialsystemen sichtbar, die in klassischen Hall- und Longitudinalmessungen nur indirekt erfasst werden.

Literaturverzeichnis

- [1] G. Brumfiel, *Topological insulators: Star material*, *Nature* **466**, 310–311 (2010).
- [2] Y. B. Fan, P. Upadhyaya, X. F. Kou, M. R. Lang, S. Takei, Z. X. Wang, J. S. Tang, L. He, L. T. Chang, M. Montazeri, G. Q. Yu, W. J. Jiang, T. X. Nie, R. N. Schwartz, Y. Tserkovnyak und K. L. Wang, *Magnetization switching through giant spin-orbit torque in a magnetically doped topological insulator heterostructure*, *Nature Materials* **13**, 699–704 (2014).
- [3] O. Breunig und Y. Ando, *Opportunities in topological insulator devices*, *Nature Reviews Physics* **4**, 184–193 (2022).
- [4] H. Ren, F. Pientka, S. Hart, A. T. Pierce, M. Kosowsky, L. Lunczer, R. Schlereth, B. Scharf, E. M. Hankiewicz, L. W. Molenkamp, B. I. Halperin und A. Yacoby, *Topological superconductivity in a phase-controlled Josephson junction*, *Nature* **569**, 93–98 (2019).
- [5] R. Fischer, J. Picó-Cortés, W. Himmeler, G. Platero, M. Grifoni, D. A. Kozlov, N. N. Mikhailov, S. A. Dvoretzky, C. Strunk und D. Weiss, *4π -periodic supercurrent tuned by an axial magnetic flux in topological insulator nanowires*, *Physical Review Research* **4**, 013087 (2022).
- [6] R. Fischer, *Induced superconductivity in HgTe based topological insulator nanowires*, Diss. (Universität Regensburg, 2023).
- [7] Luis Maier, *Induced superconductivity in the topological insulator mercury telluride*, Dissertation (Julius-Maximilians-Universität Würzburg, Würzburg, 2015).
- [8] M. G. Vergniory, L. Elcoro, C. Felser, N. Regnault, B. A. Bernevig und Z. Wang, *A complete catalogue of high-quality topological materials*, *Nature* **566**, 480–485 (2019).
- [9] M. G. Vergniory, B. J. Wieder, L. Elcoro, S. S. P. Parkin, C. Felser, B. A. Bernevig und N. Regnault, *All topological bands of all nonmagnetic stoichiometric materials*, *Science* **376**, eabg9094 (2022).
- [10] T. Zhang, Y. Jiang, Z. Song, H. Huang, Y. He, Z. Fang, H. Weng und C. Fang, *Catalogue of topological electronic materials*, *Nature* **566**, 475–479 (2019).
- [11] M. Z. Hasan und C. L. Kane, *Colloquium : Topological insulators*, *Reviews of Modern Physics* **82**, 3045–3067 (2010).
- [12] Y. Ando, *Topological Insulator Materials*, *Journal of the Physical Society of Japan* **82**, 102001 (2013).
- [13] M. Z. Hasan und J. E. Moore, *Three-Dimensional Topological Insulators*, *Annual Review of Condensed Matter Physics* **2**, 55–78 (2011).
- [14] N. F. Mott, *The transition to the metallic state*, *The Philosophical Magazine: A Journal of Theoretical Experimental and Applied Physics* **6**, 287–309 (1961).
- [15] C. Brüne, C. X. Liu, E. G. Novik, E. M. Hankiewicz, H. Buhmann, Y. L. Chen, X. L. Qi, Z. X. Shen, S. C. Zhang und L. W. Molenkamp, *Quantum Hall effect from the topological surface states of strained bulk HgTe*, *Physical Review Letters* **106**, 126803 (2011).

- [16] D. A. Kozlov, Z. D. Kvon, E. B. Olshanetsky, N. N. Mikhailov, S. A. Dvoretzky und D. Weiss, *Transport properties of a 3D topological insulator based on a strained high-mobility HgTe film*, [Physical Review Letters](#) **112**, 196801 (2014).
- [17] Z. D. Kvon, D. A. Kozlov, E. B. Olshanetsky, G. M. Gusev, N. N. Mikhailov und S. A. Dvoretzky, *Topological insulators based on HgTe*, [Physics-Uspekhi](#) **63**, 629–647 (2020).
- [18] J. Ziegler, *Quantum transport in HgTe topological insulator nanostructures*, Diss. (Universität Regensburg, 2019).
- [19] C. Beenakker und H. van Houten, *Quantum Transport in Semiconductor Nanostructures*, in [Semiconductor Heterostructures and Nanostructures](#), Bd. 44, Solid State Physics (Elsevier, 1991), S. 1–228.
- [20] Dr. Karl Dieter Weiss, *Kommensurabilitätseffekte in lateralen Übergittern*, Habilitationsschrift (Universität Stuttgart, Stuttgart, 1992).
- [21] Florian Giesl, *Weiss-Oszillationen in einer einzelnen Oberfläche eines HgTe-basierten dreidimensionalen topologischen Isolators*, Masterarbeit (Universität Regensburg, Regensburg, 2017).
- [22] H. Maier, J. Ziegler, R. Fischer, D. Kozlov, Z. D. Kvon, N. Mikhailov, S. A. Dvoretzky und D. Weiss, *Ballistic geometric resistance resonances in a single surface of a topological insulator*, [Nature Communications](#) **8**, 2023 (2017).
- [23] Mirko Vrenegor, *Weiss-Oszillationen in einer einzelnen Oberfläche eines HgTe-basierten dreidimensionalen topologischen Isolators*, Masterarbeit (Universität Regensburg, Regensburg, 2018).
- [24] A. Koop, A. Altmann, D. A. Kozlov, N. N. Mikhailov, S. A. Dvoretzky und D. Weiss, *Exploring the effects of a one-dimensional periodic potential on a three-dimensional topological insulator*, [Physical Review Research](#) **6**, 023153 (2024).
- [25] Alexander Altmann, *Weiss-Oszillationen in dem dreidimensionalen topologischen Isolator HgTe*, Masterarbeit (Universität Regensburg, Regensburg, 2021).
- [26] X.-L. Qi und S.-C. Zhang, *Topological insulators and superconductors*, [Reviews of Modern Physics](#) **83**, 1057–1110 (2011).
- [27] L. Fu und C. L. Kane, *Topological insulators with inversion symmetry*, [Physical Review B](#) **76**, 10.1103/PhysRevB.76.045302 (2007).
- [28] L. Fu, C. L. Kane und E. J. Mele, *Topological insulators in three dimensions*, [Physical Review Letters](#) **98**, 106803 (2007).
- [29] M. V. Berry, *Quantal phase factors accompanying adiabatic changes*, [Proceedings of the Royal Society of London. A. Mathematical and Physical Sciences](#) **392**, 45–57 (1984).
- [30] Di Xiao, M.-C. Chang und Q. Niu, *Berry phase effects on electronic properties*, [Reviews of Modern Physics](#) **82**, 1959–2007 (2010).
- [31] 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. Dvoretzky, D. Weiss, B. Jenichen und S. D. Ganichev, *Cyclotron-resonance-assisted photocurrents in surface states of a three-dimensional topological insulator based on a strained high-mobility HgTe film*, [Physical Review B](#) **92**, 10.1103/PhysRevB.92.165314 (2015).
- [32] J. Gospodarič, V. Dziom, A. Shuvaev, A. A. Dobretsova, N. N. Mikhailov, Z. D. Kvon, E. G. Novik und A. Pimenov, *Band structure of a HgTe-based three-dimensional topological insulator*, [Physical Review B](#) **102**, 10.1103/PhysRevB.102.115113 (2020).

- [33] D. A. Kozlov, D. Bauer, J. Ziegler, R. Fischer, M. L. Savchenko, Z. D. Kvon, N. N. Mikhailov, S. A. Dvoretzky und D. Weiss, *Probing Quantum Capacitance in a 3D Topological Insulator*, *Physical Review Letters* **116**, 166802 (2016).
- [34] K. v. Klitzing, G. Dorda und M. Pepper, *New Method for High-Accuracy Determination of the Fine-Structure Constant Based on Quantized Hall Resistance*, *Physical Review Letters* **45**, 494–497 (1980).
- [35] D. J. Thouless, M. Kohmoto, M. P. Nightingale und M. den Nijs, *Quantized Hall Conductance in a Two-Dimensional Periodic Potential*, *Physical Review Letters* **49**, 405–408 (1982).
- [36] Y. Hatsugai, *Chern number and edge states in the integer quantum Hall effect*, *Physical Review Letters* **71**, 3697–3700 (1993).
- [37] C. L. Kane und E. J. Mele, *Z₂ topological order and the quantum spin Hall effect*, *Physical Review Letters* **95**, 146802 (2005).
- [38] C. L. Kane und E. J. Mele, *Physics. A new spin on the insulating state*, *Science (New York, N.Y.)* **314**, 1692–1693 (2006).
- [39] M. König, S. Wiedmann, C. Brüne, A. Roth, H. Buhmann, L. W. Molenkamp, X.-L. Qi und S.-C. Zhang, *Quantum spin hall insulator state in HgTe quantum wells*, *Science (New York, N.Y.)* **318**, 766–770 (2007).
- [40] J. E. Moore und L. Balents, *Topological invariants of time-reversal-invariant band structures*, *Physical Review B* **75**, 121306 (2007).
- [41] S.-B. Zhang, C.-A. Li, F. Peña-Benitez, P. Surówka, R. Moessner, L. W. Molenkamp und B. Trauzettel, *Super-Resonant Transport of Topological Surface States Subjected to In-Plane Magnetic Fields*, *Physical Review Letters* **127**, 076601 (2021).
- [42] H. Zhang, C.-X. Liu, X.-L. Qi, X. Dai, Z. Fang und S.-C. Zhang, *Topological insulators in Bi₂Se₃, Bi₂Te₃ and Sb₂Te₃ with a single Dirac cone on the surface*, *Nature Physics* **5**, 438–442 (2009).
- [43] N. N. Berchenko und M. V. Pashkovskii, *Mercury telluride—a zero-gap semiconductor*, *Soviet Physics Uspekhi* **19**, 462 (1976).
- [44] B. A. Bernevig, T. L. Hughes und S.-C. Zhang, *Quantum spin Hall effect and topological phase transition in HgTe quantum wells*, *Science (New York, N.Y.)* **314**, 1757–1761 (2006).
- [45] S.-C. Wu, B. Yan und C. Felser, *Ab initio study of topological surface states of strained HgTe*, *Europhysics Letters* **107**, 57006 (2014).
- [46] J. Ziegler, D. A. Kozlov, N. N. Mikhailov, S. Dvoretzky und D. Weiss, *Quantum Hall effect and Landau levels in the three-dimensional topological insulator HgTe*, *Physical Review Research* **2**, 10.1103/PhysRevResearch.2.033003 (2020).
- [47] R. P. Feynman, R. B. Leighton und M. Sands, *Feynman-Vorlesungen über Physik, Band 3: Elektromagnetismus*, 6. Aufl., De Gruyter Studium (De Gruyter, Berlin, Boston, 2015).
- [48] W. Demtröder, *Experimentalphysik 3, Atome, Moleküle und Festkörper*, 5. Aufl. (Springer Spektrum, Berlin, Heidelberg, 2016).
- [49] D. J. Griffiths, *Introduction to Electrodynamics*, 5. Aufl. (Cambridge University Press, 2023).
- [50] P. Drude, *Zur Elektronentheorie der Metalle*, *Annalen der Physik* **306**, 566–613 (1900).
- [51] S. Hunklinger, *Festkörperphysik* (De Gruyter, 2017).

- [52] L. D. Landau und E. M. Lifshitz, *Quantum Mechanics : Non-Relativistic Theory*, 3rd ed., Bd. v. 3, Their Course of theoretical physics (Elsevier Science, Burlington, 1977).
- [53] L. Schubnikov und W. J. de Haas, *A New Phenomenon in the Change of Resistance in a Magnetic Field of Single Crystals of Bismuth*, *Nature* **126**, 500 (1930).
- [54] D. Weiss, *Halbleiterphysik*, Vorlesungsskript, Universität Regensburg, Regensburg, 2014.
- [55] T. Ando, A. B. Fowler und F. Stern, *Electronic properties of two-dimensional systems*, *Reviews of Modern Physics* **54**, 437–672 (1982).
- [56] D. Shoenberg, *Magnetic oscillations in metals* (Cambridge university press, 1984).
- [57] A. A. Taskin und Y. Ando, *Berry phase of nonideal Dirac fermions in topological insulators*, *Physical Review B* **84**, 035301 (2011).
- [58] R. B. Laughlin, *Quantized Hall conductivity in two dimensions*, *Physical Review B* **23**, 5632–5633 (1981).
- [59] M. Tahir und U. Schwingenschlögl, *Quantum magnetotransport properties of topological insulators under strain*, *Physical Review B* **86**, 10.1103/PhysRevB.86.075310 (2012).
- [60] D. Weiss, K. v. Klitzing, K. Ploog und G. Weimann, *Magnetoresistance Oscillations in a Two-Dimensional Electron Gas Induced by a Submicrometer Periodic Potential*, *Europhysics Letters (EPL)* **8**, 179–184 (1989).
- [61] R. W. Winkler, J. P. Kotthaus und K. Ploog, *Landau band conductivity in a two-dimensional electron system modulated by an artificial one-dimensional superlattice potential*, *Physical Review Letters* **62**, 1177–1180 (1989).
- [62] C. Nguyen, B. Brar, V. Jayaraman, A. Lorke und H. Kroemer, *Magnetotransport in lateral periodic potentials formed by surface-layer-induced modulation in InAs-ALsB quantum wells*, *Applied Physics Letters* **63**, 2251–2253 (1993).
- [63] Markus Lerner, *Transportuntersuchungen an strukturierten Halbleiterheterostrukturenpaltkanten*, Dissertation (Universität Regensburg, Regensburg, 2006).
- [64] R. Yagi und Y. Iye, *Oscillatory Magnetoresistance in Two-Dimensional Electron Systems in a Periodically Modulated Magnetic Field*, *Journal of the Physical Society of Japan* **62**, 1279–1285 (1993).
- [65] R. R. Gerhardts, D. Weiss und K. Klitzing, *Novel magnetoresistance oscillations in a periodically modulated two-dimensional electron gas*, *Physical Review Letters* **62**, 1173–1176 (1989).
- [66] C. W. Beenakker, *Guiding-center-drift resonance in a periodically modulated two-dimensional electron gas*, *Physical Review Letters* **62**, 2020–2023 (1989).
- [67] Zhang und Gerhardts, *Theory of magnetotransport in two-dimensional electron systems with unidirectional periodic modulation*, *Physical Review B* **41**, 12850–12861 (1990).
- [68] N. Paul, P. J. Crowley, T. Devakul und L. Fu, *Moiré Landau Fans and Magic Zeros*, *Physical Review Letters* **129**, 116804 (2022).
- [69] P. T. Coleridge, *Small-angle scattering in two-dimensional electron gases*, *Physical Review B* **44**, 3793–3801 (1991).
- [70] Pfannkuche und Gerhardts, *Theory of magnetotransport in two-dimensional electron systems subjected to weak two-dimensional superlattice potentials*, *Physical Review B* **46**, 12606–12626 (1992).

- [71] W. Breuer, *Magnetotransport-Messungen an lateral modulierten zweidimensionalen Elektronengasen* (Logos-Verl., Berlin, 2003).
- [72] P. C. Main, P. H. Beton, E. S. Alves, M. W. Dellow und M. Davison, *Classical and Quantum Motion in Lateral Superlattices*, *Physica Scripta* **T39**, 169–176 (1991).
- [73] P. H. Beton, E. S. Alves, P. C. Main, L. Eaves, M. W. Dellow, M. Henini, O. H. Hughes, S. P. Beaumont und C. D. W. Wilkinson, *Magnetoresistance of a two-dimensional electron gas in a strong periodic potential*, *Physical Review B* **42**, 9229–9232 (1990).
- [74] F. M. Peeters und P. Vasilopoulos, *Electrical and thermal properties of a two-dimensional electron gas in a one-dimensional periodic potential*, *Physical Review B* **46**, 4667–4680 (1992).
- [75] M. Drienovsky, J. Joachimsmeier, A. Sandner, M.-H. Liu, T. Taniguchi, K. Watanabe, K. Richter, D. Weiss und J. Eroms, *Commensurability Oscillations in One-Dimensional Graphene Superlattices*, *Physical Review Letters* **121**, 026806 (2018).
- [76] Martin Drienovsky, *Übergittereffekte in eindimensional moduliertem Graphen*, Dissertation (Universität Regensburg, Regensburg, 2018).
- [77] Robin Tobias Huber, *Electronic Band Structure Engineering of Graphene*, Dissertation (Universität Regensburg, Regensburg, 2020).
- [78] J. M. Amann, *One-Dimensional Graphene Superlattices*, Doktorarbeit (Universität Regensburg, Regensburg, 2026).
- [79] A. Matulis und F. M. Peeters, *Appearance of enhanced Weiss oscillations in graphene: Theory*, *Physical Review B* **75**, 10.1103/PhysRevB.75.125429 (2007).
- [80] A. H. Castro Neto, F. Guinea, N. M. R. Peres, K. S. Novoselov und A. K. Geim, *The electronic properties of graphene*, *Reviews of Modern Physics* **81**, 109–162 (2009).
- [81] P. Steda und A. H. MacDonald, *Magnetic breakdown and magnetoresistance oscillations in a periodically modulated two-dimensional electron gas*, *Physical Review B* **41**, 11892–11898 (1990).
- [82] D. Weiss, *Magneto-quantum transport in 2D-electron systems with periodic modulation*, *Physica Scripta* **1991**, 226 (1991).
- [83] R. R. Gerhardts, *Quasiclassical calculation of magnetoresistance oscillations of a two-dimensional electron gas in an anharmonic lateral superlattice potential*, *Physical Review B* **45**, 3449–3454 (1992).
- [84] R. Cuscó, E. Skuras, S. Vallis, M. C. Holland, A. R. Long, S. P. Beaumont, I. A. Larkin und J. H. Davies, *Potential modulation under lateral surface superlattices*, *Superlattices and Microstructures* **16**, 283–286 (1994).
- [85] A. Siddiki und R. R. Gerhardts, *Thomas-Fermi-Poisson theory of screening for laterally confined and unconfined two-dimensional electron systems in strong magnetic fields*, *Physical Review B* **68**, 10.1103/PhysRevB.68.125315 (2003).
- [86] E. H. Hwang und S. Das Sarma, *Dielectric function, screening, and plasmons in two-dimensional graphene*, *Physical Review B* **75**, 10.1103/PhysRevB.75.205418 (2007).
- [87] Hubert Georg Maier, *Geometrische Resonanzen in einem HgTe-basierten dreidimensionalen topologischen Isolator*, Dissertation (Universität Regensburg, Regensburg, 2022).

- [88] D. A. Kozlov, J. Ziegler, N. N. Mikhailov, S. A. Dvoretzskii und D. Weiss, *Shubnikov—de Haas Oscillations in a Three-Dimensional Topological Insulator Based on a Strained HgTe Film in an Inclined Magnetic Field*, *JETP Letters* **109**, 799–805 (2019).
- [89] S. Luryi, *Quantum capacitance devices*, *Applied Physics Letters* **52**, 501–503 (1988).
- [90] Ralf Fischer, *Magnetocapacitance and transport measurements on HgTe-based 2D and 3D topological insulators*, Masterarbeit (Universität Regensburg, Regensburg, 2016).
- [91] C. Brüne, C. Thienel, M. Stuiber, J. Böttcher, H. Buhmann, E. G. Novik, C.-X. Liu, E. M. Hankiewicz und L. W. Molenkamp, *Dirac-Screening Stabilized Surface-State Transport in a Topological Insulator*, *Physical Review X* **4**, 10.1103/PhysRevX.4.041045 (2014).
- [92] O. Crauste, Y. Ohtsubo, P. Ballet, P. Delplace, D. Carpentier, C. Bouvier, C. Bäuerle, A. Taleb-Ibrahimi und L. Lévy, *Topological surface states of strained Mercury-Telluride probed by ARPES*, (2013).
- [93] M. L. Savchenko, D. A. Kozlov, N. N. Vasilev, N. N. Mikhailov, S. A. Dvoretzky und Z. D. Kvon, *Transport properties of a 1000 nm HgTe film: the interplay of surface and bulk carriers*, *Journal of Physics: Condensed Matter* **35**, 345302 (2023).
- [94] A. Endo und Y. Iye, *Magnetoresistance of Lateral Hyperlattice: Independent Control of Spacing and Phase of Commensurability Oscillation*, *Journal of the Physical Society of Japan* **69**, 3656–3659 (2000).
- [95] K. Tanaka, J. Falson, Y. Kozuka, M. Uchida, D. Maryenko, J. T. Ye, Y. Iwasa, A. Tsukazaki, J. H. Smet und M. Kawasaki, *Ballistic transport in periodically modulated MgZnO/ZnO two-dimensional electron systems*, *Applied Physics Letters* **115**, 153101 (2019).
- [96] M. Staab, M. Matuschek, P. Pereyra, M. Utz, D. Schuh, D. Bougeard, D. Weiss und R. R. Gerhardt, *Commensurability oscillations in a lateral superlattice with broken inversion symmetry*, *New Journal of Physics* **17**, 043035 (2015).
- [97] M. Luka, *Herstellung von periodischen Strukturen mit Negativlacken*, Bachelorarbeit (Universität Regensburg, Regensburg, 2020).
- [98] Masahiko Ishida, Jun-ichi Fujita, Takashi Ogura, Yukinori Ochiai, Eiji Ohsima und Junji Momoda, *Sub-10-nm-Scale Lithography Using p-chloromethyl-methoxy-calix[4]arene Resist*, *10.1143/JJAP.42.3913*.
- [99] V. Srivastav, R. Pal, B. Sharma, A. Naik, D. Rawal, V. Gopal und H. Vyas, *Etching of mesa structures in HgCdTe*, *Journal of Electronic Materials* **34**, 1440–1445 (2005).
- [100] V. Srivastav, R. Pal, H. Vyas u. a., *Overview of etching technologies used for HgCdTe*, *Optoelectronics Review* **13**, 197 (2005).
- [101] S. M. George, *Atomic Layer Deposition: An Overview*, *Chemical Reviews* **110**, PMID: 19947596, 111–131 (2010).
- [102] C. L. Perkins, T. Ablekim, T. M. Barnes, D. Kuciauskas, K. G. Lynn, W. Nemeth, M. O. Reese, S. K. Swain und W. K. Metzger, *Interfaces Between CdTe and ALD Al₂O₃*, *IEEE Journal of Photovoltaics* **8**, 1858–1861 (2018).
- [103] SynkTek AB, *SynkTek MCL1-540*, SynkTek AB, (n.d.) <https://www.synktek.com/synktek-mcl1-540/> (besucht am 21.04.2026).
- [104] SynkTek AB, *Manual SynkTek MCL1-540*, SynkTek AB (2023).

- [105] Oxford Instruments NanoScience, *Integra / Helium Magnet System*, Wet cryostat system with VTI, temperature range 1.5 K to 300 K; accessed 2026-04-21.
- [106] National Institute of Standards and Technology, *Reference Tables*, Normal boiling point of helium-3: 3.19 K; accessed 2026-04-21.
- [107] Oxford Instruments NanoScience, *HelioxVL*, ^3He insert for wet cryostats with temperatures below 300 mK; accessed 2026-04-21.
- [108] F. Eberle, *Control of spin relaxation and spin precession in diffusive 2DEG channels*, Diss. (Universität Regensburg, 2023).
- [109] M. Trottmann, *Characterisation of III-V semiconductor hybrid systems for spin-orbitronic functionality*, Diss. (Universität Regensburg, 2020).
- [110] M. Choi, A. Janotti und C. G. van de Walle, *Native point defects and dangling bonds in $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$* , *Journal of Applied Physics* **113**, 10.1063/1.4784114 (2013).
- [111] T. Ihn, *Semiconductor Nanostructures: Quantum states and electronic transport* (OUP Oxford, 2009).
- [112] S. Hartl, L. Freund, M. Kühn, J. Ziegler, E. Richter, W. Himmeler, J. Bärenfänger, D. A. Kozlov, N. N. Mikhailov, J. Weis und D. Weiss, *Quantum Hall effect and current distribution in the three-dimensional topological insulator Hg-Te*, *Phys. Rev. Res.* **7**, 013273 (2025).
- [113] E. E. Mendez, L. Esaki und L. L. Chang, *Quantum Hall effect in a two-dimensional electron-hole gas*, *Physical Review Letters* **55**, 2216–2219 (1985).
- [114] L. S. Bovkun, A. V. Ikonnikov, V. Y. Aleshkin, K. E. Spirin, V. I. Gavrilenko, N. N. Mikhailov, S. A. Dvoretiskii, F. Teppe, B. A. Piot, M. Potemski und M. Orlita, *Landau level spectroscopy of valence bands in HgTe quantum wells: effects of symmetry lowering*, *Journal of Physics: Condensed Matter* **31**, 145501 (2019).
- [115] M. Hofer, C. Fuchs, M. Siebert, C. Berger, L. Fürst, M. P. Stehno, S. Schreyeck, H. Buhmann, T. Kießling, W. Beugeling und L. W. Molenkamp, *Self-Consistent Electrostatic Modeling of Gated Narrow-Gap Topological Insulators*, *Nano Letters* **26**, PMID: 41712955, 3042–3048 (2026).
- [116] M. Hofer, C. Fuchs, L. Fürst, T. Kießling, W. Beugeling, S. Schreyeck, H. Buhmann und L. W. Molenkamp, *Surface state dominated transport in HgTe topological insulator devices*, *Physical Review B* **113**, 045303 (2026).
- [117] J. H. Davies, *The Physics of Low-Dimensional Semiconductors: An Introduction* (Cambridge University Press, Cambridge, 1997).
- [118] U. Wulf, V. Gudmundsson und R. R. Gerhardts, *Screening properties of the two-dimensional electron gas in the quantum Hall regime*, *Physical Review B* **38**, 4218–4230 (1988).
- [119] J. Labbé, *Dielectric constant of a two-dimensional electron gas with a partially occupied Landau level*, *Physical Review B* **35**, 1373–1379 (1987).
- [120] P. D. Ye, D. Weiss, R. R. Gerhardts, K. von Klitzing, K. Eberl, H. Nickel und C. T. Foxon, *Strain-induced magnetoresistance oscillations in GaAs-AlGaAs heterojunctions with ferromagnetic and superconducting submicrometre gratings*, *New Journal of Physics* **10**, 715–719 (1995).

A. Höhere Harmonische des Modulationspotentials

Wie bereits in Abbildung 9.5 gezeigt, werden die Fourierkomponenten des angelegten Potentials in der Thomas-Fermi-Näherung unterschiedlich stark abgeschirmt. Langwellige Anteile werden dabei stärker reduziert als kurzwellige, sodass höhere Harmonische relativ an Gewicht gewinnen können [20, 76, 85]. Für die WO-Analyse ist das unmittelbar relevant: Jede relevante Harmonische der Ordnung j besitzt bei einer geometrischen Gitterperiode a die effektive Periode a/j und kann damit prinzipiell eine eigene Familie von Kommensurabilitätsminima erzeugen. Für die zweite Harmonische ist diese effektive Periode gerade $a/2$, sodass ihre Minima bei gleicher Dichte zu höheren Magnetfeldern erwartet werden als diejenigen der Grundharmonischen.

Dass solche zusätzlichen Fourieranteile im Transport sichtbar werden können, ist aus lateralen Übergittern in konventionellen 2DEGs und in Graphen bekannt [61, 76, 83]. Auch in HgTe-basierten Strukturen wurde dieses Verhalten bereits beobachtet: In den geätzten periodischen Streifenstrukturen aus den Arbeiten von Giesl und Vrenegor traten für größere Gitterperioden ausgeprägtere Beiträge der zweiten und weiterer Harmonischer auf, während bei kleineren Perioden die Grundharmonische stärker dominierte [21, 23]. Da dort die Modulation durch geätzte Strukturen im Cap-Layer erzeugt wurde, ließ sich der Einfluss der Modulationsmethode selbst jedoch nur eingeschränkt von der eigentlichen Potentialform trennen. Einen aufschlussreichen Vergleich liefert die Arbeit von Altmann: Bei periodischen Lackstreifen traten für die dort untersuchten kleinen Gitterperioden von 300 nm und großen Gitterperioden 700 nm keine ausgeprägten Beiträge höherer Harmonischer mehr auf [25]. Damit zeigt sich bereits, dass nicht nur die Gitterperiode, sondern auch die konkrete Art der Potentialerzeugung die spektrale Form des wirksamen Modulationspotentials beeinflusst. Abbildung A.1 zeigt die drei genannten Methoden zur Erzeugung einer lateralen Modulation in HgTe-basierten Strukturen im Vergleich.

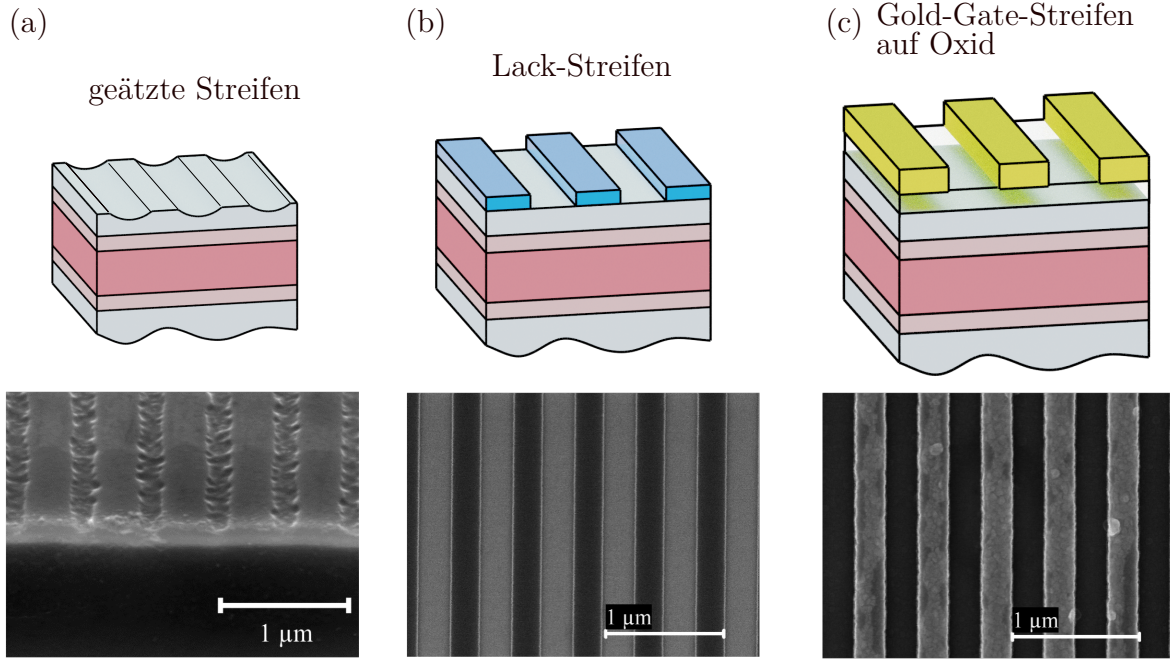


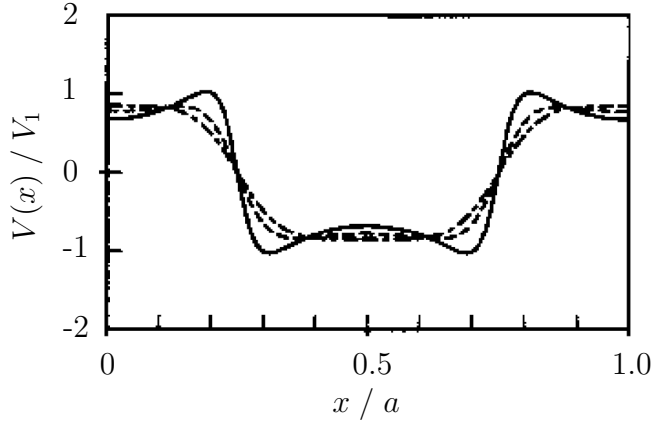
Abbildung A.1.: Gegenüberstellung der bisher in HgTe-basierten Strukturen eingesetzten Methoden zur Erzeugung einer eindimensionalen lateralen Modulation: (a) geätzte periodische Streifenstrukturen im Cap-Layer [21], (b) periodische Lack-Streifen [25] und (c) gate-definierte Gold-Streifen auf einer Oxidschicht [24]. In der oberen Bildreihe ist jeweils eine schematische Darstellung des Strukturkonzepts gezeigt, darunter die entsprechende Aufnahme im Rasterelektronenmikroskop. Alle gezeigten Strukturen besitzen eine Periode von 500 nm. Die verschiedenen Ansätze unterscheiden sich in der Art der Potentialerzeugung und im Abstand der modulierenden Struktur zur Heterostruktur. Diese Unterschiede sind für die Form des wirksamen Modulationspotentials und damit auch für das Auftreten höherer Harmonischer relevant.

Die hier durchgeführten elektrostatischen COMSOL-Berechnungen zeigen nun, dass ein entsprechendes Verhalten auch für die vorliegende gate-definierte Geometrie in Grenzwertsituationen zu erwarten ist. Für die vorliegende Struktur bedeutet das insbesondere, dass die Grundharmonische mit der Wellenzahl $q_1 = 2\pi/a$ stärker abgeschirmt wird als eine zweite Harmonische mit $q_2 = 4\pi/a$. In der Thomas-Fermi-Beschreibung folgt dies direkt aus Gleichung 4.40 zusammen mit Gleichung 4.41. Die in Abbildung 9.5 sichtbare Restmodulation bei kleinster Amplitude zeigt zugleich, dass das reale laterale Potential nicht rein kosinusförmig ausgehend von einer einzelnen Periode ist. Dass bereits ein einzelnes anharmonisches periodisches Potential mehrere Fourieranteile enthalten kann, ist in Abbildung A.2 dargestellt. Höhere Harmonische treten auf, weil die reale Geometrie der Goldstreifen und die inhomogene Feldverteilung an ihren Kanten ein anharmonisches Potential erzeugen können. Wird die Grundharmonische durch geeignete Gate-Kombinationen elektrostatisch klein, können diese zusätzlichen Fourierkomponenten im wirksamen Potential relativ deutlich hervortreten.

Ein zusätzlicher Mechanismus, der für Metallstreifen-Gitter diskutiert wurde, ist ein Beitrag thermischer Spannungen aufgrund unterschiedlicher Ausdehnungskoeffizienten [120]. Dieser Effekt wird in den hier gezeigten COMSOL-Berechnungen nicht berücksichtigt. Außerdem ist für die hier verwendete gate-definierte Struktur der Einfluss eines Ausdehnungskoeffizienten dadurch reduziert, dass zwischen den Metallstreifen

und der Heterostruktur eine 130 nm SiO₂/Al₂O₃-Schicht liegt.

Abbildung A.2.: Anharmonisches eindimensionales Modulationspotential, normiert auf die Amplitude der Grundharmonischen V_1 . Die Ortskoordinate ist in Einheiten der Gitterperiode a dargestellt. Die Abbildung veranschaulicht, dass die Form eines einzelnen periodischen Potentials mehrere höhere Fourieranteile enthalten kann. Nach [83].



Die zusätzlichen Minima in den hier gemessenen WO-Daten werden deshalb höheren Harmonischen desselben lateralen Potentials zugeordnet. Die Zuordnung einzelner Strukturen im Farbplot erfolgt dabei über die unterschiedliche Magnetfeldskala der Harmonischen. Da die zweite Harmonische einer effektiven Periode von $a/2$ entspricht, werden ihre Kommensurabilitätsminima bei gleicher Dichte zu etwa doppelt so großen Magnetfeldern erwartet wie die entsprechenden Minima der Grundharmonischen. In der Praxis führt dies nicht zu einer einfachen Verdopplung aller sichtbaren Muster, sondern zu einer selektiven Überlagerung einzelner Minima. Besonders im Niederfeldbereich kann sich dadurch die erste Ordnung der Grundharmonischen mit höheren Ordnungen der zweiten Harmonischen räumlich annähern. Genau in solchen Bereichen kann die Interpretation der WO-Struktur mit höherer Harmonischer mehrdeutig werden, wenn das Modulationspotential nicht kontrolliert wird. Ein Beispiel für ein in der Thomas-Fermi-Näherung nahezu kompensiertes, aber weiterhin anharmonisches Restpotential ist in Abbildung A.3 dargestellt. Eine Zuordnung zur Grundharmonischen ließe sich bei der Auswertung der Ladungsträgerdichte schnell ausschließen, da die daraus bestimmte Dichte größer ausfallen würde als die aus den Hall-Messungen bestimmte Gesamtladungsträgerdichte.

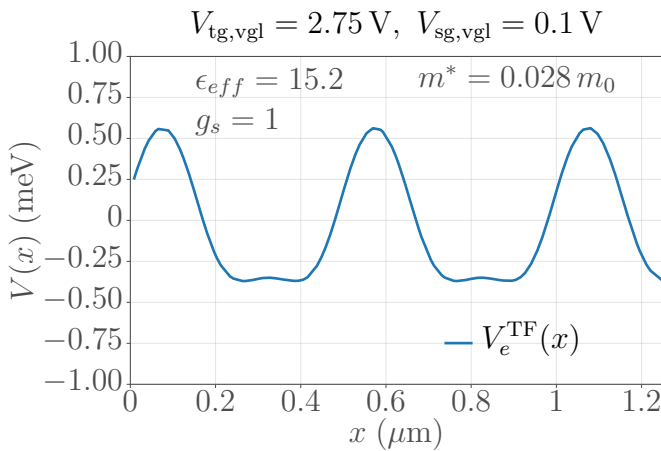


Abbildung A.3.: Thomas-Fermi-gescreentes Modulationspotential $V_0^{TF}(x)$ für $V_{tg,vgl} = 2.75$ V und $V_{sg,vgl} = 0.1$ V, Hysterese-bereinigt. Gezeigt ist das aus einem Fourier-Fit mit $N = 8$ Harmonischen berechnete wirksame Potential für $m^* = 0.028 m_0$, $\epsilon_{eff} = 15.2$ und $g_s = 1$. Trotz der nahezu kompensierten Grundharmonischen bleibt eine kleine nichtsinusförmige Restmodulation im Sub-meV-Bereich erhalten, die die Grundlage für sichtbare Beiträge höherer Harmonischer im Längswiderstand bildet.

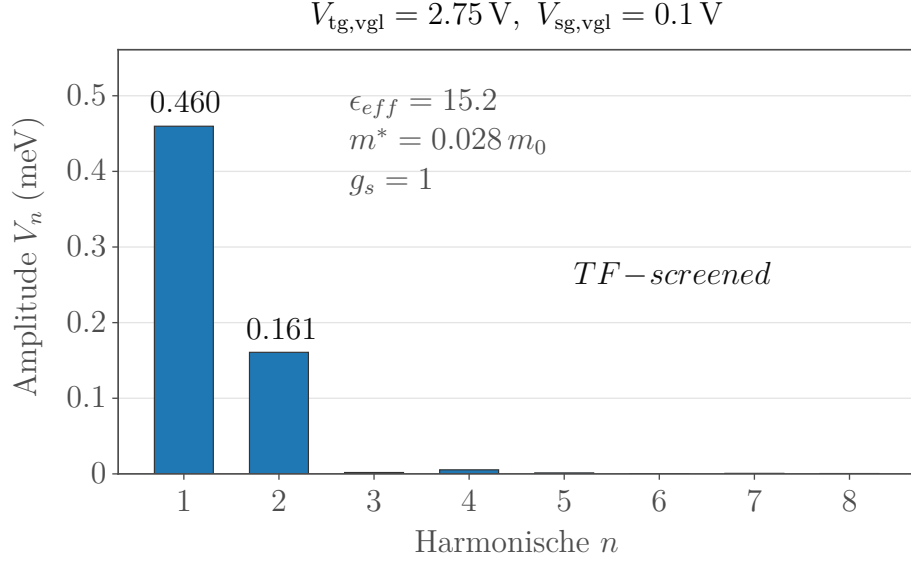


Abbildung A.4.: Fourieramplituden des Thomas-Fermi-gescreenten Modulationspotentials für dieselbe Gate-Konfiguration wie in Abbildung A.3 mit $V_{\text{tg,vgl}} = 2.75 \text{ V}$ und $V_{\text{sg,vgl}} = 0.1 \text{ V}$. Die Grundharmonische $n = 1$ dominiert, aber die zweite Harmonische $n = 2$ ist mit etwa einem Drittel der Amplitude der Grundharmonischen nicht mehr zu vernachlässigen. Weitere höhere Harmonische $n = 3$ bis $n = 8$ können als vernachlässigbar angesehen werden.

In Abbildung A.4 sind die Fourieramplituden der gescreenten Modulation für die ersten acht Harmonischen dargestellt. Es zeigt sich, dass die Grundharmonische, in dieser Gate-Spannungskombination für $V_{\text{tg,vgl}} = 2.75 \text{ V}$ und $V_{\text{sg,vgl}} = 0.1 \text{ V}$ immer noch den größten Anteil mit 0.460 meV zum Modulationspotential beiträgt, die zweite Harmonische aber nicht mehr als zu vernachlässigen angesehen werden kann mit 0.161 meV . Weitere höhere Harmonische sind zu vernachlässigen.

Abbildung A.5 zeigt, dass bereits eine schwache zweite Harmonische ausreicht, um zusätzliche Minima der experimentellen WO-Struktur auszubilden. In Abbildung A.5(a) wird zunächst gezielt die Grundharmonische angefittet, um die erwarteten Minima der Grundharmonischen zu identifizieren. Dies erfolgt sowohl im n-Regime als auch im p-dominierten Regime für die Ordnungen $\lambda = 1$, $\lambda = 2$ und $\lambda = 3$. Besonders im Leitungsband fällt auf, dass der Fit und damit die Äste der roten Dreiecke nicht alle Minima der WO-Struktur erfassen. Insbesondere für $\lambda = 2$ lässt sich eine Aufspaltung der Minima beobachten. Dass diese Aufspaltung im Leitungsband besser aufgelöst wird, hängt unter anderem mit der höheren Ladungsträgerdichte und dem stärkeren Screening zusammen. Durch die höhere Ladungsträgerdichte liegen die erwarteten Minima-Positionen weiter auseinander und können dadurch besser getrennt werden. Gleichzeitig wird durch das stärkere Screening die ohnehin klein eingestellte Grundharmonische stärker unterdrückt als die zweite Harmonische, sodass letztere relativ deutlicher hervortreten kann. Analog zeigt sich dieser Effekt auch im p-dominierten Regime, dort jedoch deutlich schwächer. Auch hier lässt sich keine alternative Zuordnung finden, die die zusätzlichen Minima allein auf Basis der Grundharmonischen konsistent erfasst.

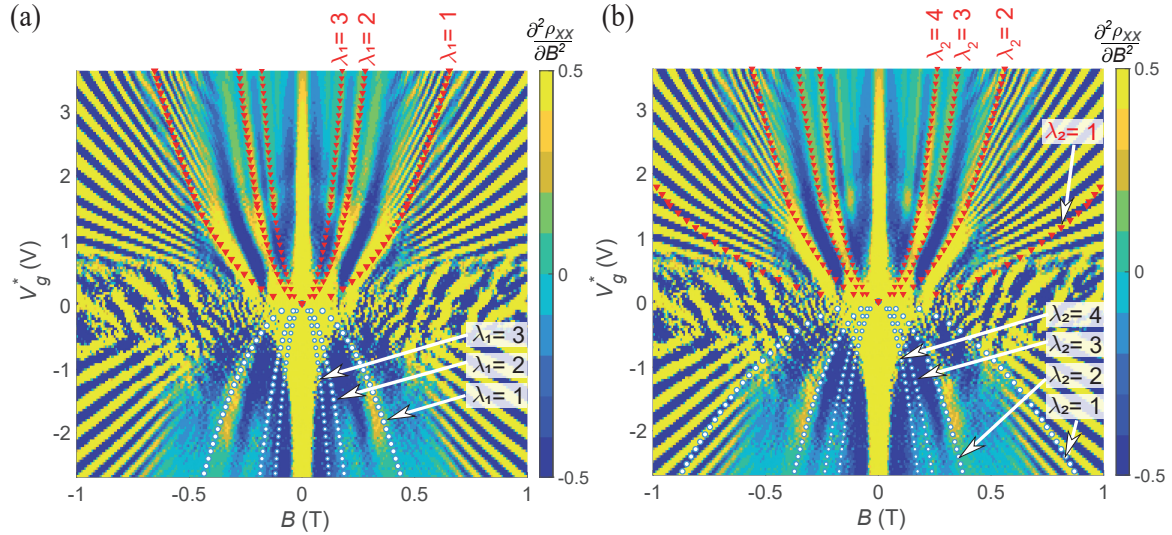


Abbildung A.5.: Vergleich der WO-Struktur für eine Beschreibung nur mit der Grundharmonischen und mit zusätzlicher zweiter Harmonischer. Dargestellt ist jeweils die negative zweite Ableitung des Längswiderstands als Funktion von Magnetfeld B und effektiver Gate-Spannung V_g^* . In (a) sind nur die erwarteten Minima der Grundharmonischen mit der Gitterperiode $a_1 = 500$ nm eingezeichnet. Die roten Beschriftungen λ_1 kennzeichnen die zugehörigen Ordnungen. In (b) wird zusätzlich eine zweite Harmonische mit der effektiven Periode $a_2 = a_1/2 = 250$ nm berücksichtigt. Die roten Beschriftungen λ_2 markieren die entsprechenden Ordnungen der zweiten Harmonischen. Zusätzliche Strukturen, die mit der Grundharmonischen allein nicht konsistent beschrieben werden, lassen sich dadurch insbesondere im Niederfeldbereich und auf der Lochseite einordnen. Die Abbildung dient damit als phänomenologische Visualisierung der in der Potentialform angelegten höheren Fourierkomponenten.

In Abbildung A.5(b) wird die zweite Harmonische mit der effektiven Periode $a/2$ berücksichtigt, ausgehend von derselben Ladungsträgerdichte wie in Abbildung A.5(a). Es zeigt sich, dass dadurch zusätzliche Minima, die mit der Grundharmonischen allein nicht konsistent beschrieben werden können, insbesondere im Niederfeldbereich und auf der Lochseite eingeordnet werden können. Eine Kombination aus Grundharmonischer und zweiter Harmonischer kann die beobachtete WO-Struktur deutlich vollständiger erfassen. Das ist ein deutlicher Hinweis darauf, dass die in der Potentialform angelegten höheren Fourierkomponenten tatsächlich im Magnetotransport sichtbar werden können. Gerade in der Nähe des Kompensationspunkts, wo die Grundharmonische stark unterdrückt ist, können dadurch zusätzliche Minima entstehen, die sich nicht ohne Weiteres einer einzelnen Gitterperiode zuordnen lassen.

Für die vorliegende Struktur zeigt sich damit, dass die WO-Interpretation nicht allein von der Amplitude des Modulationspotentials, sondern auch von dessen Fourierzusammensetzung bestimmt wird. Mit der hier vorliegenden Doppel-Gate-Struktur lässt sich insbesondere in der Nähe des Kompensationspunkts ein Modulationspotential einstellen, bei dem höhere Harmonische sichtbar werden. Eine stärkere Unterdrückung dieser Harmonischen, auch bei kleinen angelegten Modulationspotentialen, könnte durch eine gezielte Anpassung der Gate-Geometrie erreicht werden. Denkbar wären eine Anpassung der Symmetrie, der Streifenbreite sowie der Dicke der Streifen, als auch die Isolatorschicht. Mit den in dieser Arbeit gewonnenen Kenntnissen könnte eine Simulation vorab sinnvoll sein.

B. Prozessschritte der Probenherstellung

I. Optische Lithographie

1. Standardreinigung: Aceton (Ultraschallbad, 30 s), Aceton (1 min), Propanol (1 min); Trocknen mit Stickstoffpistole (N_2).
2. Belacken: Photolack (S1813), 6000 rpm, 30 s.
3. Heizplatte: 80 °C, 3 min.
4. Belichten: Mask Aligner, UV-Belichtung; 3 min.
5. Entwickeln: MF 26-A (40 s); 20 s in H_2O neutralisieren; Trocknen mit Stickstoffpistole (N_2).

Ila. Mesa-Ätzen (nasschemisch)

1. Ethylenglycol : H_2O : Br_2 = 100 : 25 : 0.1 bei 0 °C.
 - Rührfisch: 300 rpm.
 - Dauer: etwa 4 min.
 - Ätzstopp und Neutralisation: 5 s in Reinstwasser.

III. Isolatorschicht SG

III. Erste Isolatorschicht für das Streifen-Gate

1. Standardreinigung.
2. PECVD: 30 nm SiO_2 bei 80 °C.
 - 3×15 s mit SiH_4 (170 sccm) und N_2O (710 sccm) bei 150 W.
3. ALD: 30 nm Al_2O_3 bei 80 °C.
 - 0.015 s Puls, 66 s Spülen, 350 Zyklen.

IV. Streifen-Gate

IV. Streifen-Gate (Elektronenstrahlolithographie)

1. Standardreinigung.
2. Belacken 2: PMMA 200 k, 9 %, 4000 rpm, 30 s.
3. Heizplatte: 80 °C, 30 min.
4. Belacken 3: PMMA 950 k, 2 %, 6000 rpm, 30 s.
5. Heizplatte: 80 °C, 30 min.
6. Belichten:
 - Elektronenstrahlolithographie, SG-Struktur: 30 kV, 30 μm -Blende, lackabhängige Dosis 250 $\mu\text{C}/\text{cm}^2$.
 - Elektronenstrahlolithographie, Zuleitung: 30 kV, 120 μm -Blende, lackabhängige Dosis 250 $\mu\text{C}/\text{cm}^2$.
7. Entwickeln: MIBK 40 s; 20 s in Propanol neutralisieren; Trocknen mit Stickstoffpistole (N_2).
8. Aufdampfen: Ti (5 nm), Au (30 bis 100 nm).
9. Lift-off: Aceton, 60 °C, einen Tag.

V. Isolatorschicht TG

V. Zweite Isolatorschicht für das Top-Gate

1. ALD: 100 nm Al_2O_3 bei 80 °C.
 - 0.015 s Puls, 66 s Spülen, 1200 Zyklen.

VI. Top-Gate

VI. Top-Gate (Elektronenstrahlolithographie)

1. Standardreinigung.
2. Belacken 2: PMMA 200 k, 9 %, 4000 rpm, 30 s.
3. Heizplatte: 80 °C, 30 min.
4. Belacken 3: PMMA 950 k, 2 %, 6000 rpm, 30 s.
5. Heizplatte: 80 °C, 30 min.

B. Prozessschritte der Probenherstellung

6. Belichten:

- Elektronenstrahlolithographie, TG-Struktur: 30 kV, 30 μm -Blende, lackabhängige Dosis 250 $\mu\text{C}/\text{cm}^2$.
- Elektronenstrahlolithographie, Zuleitung: 30 kV, 120 μm -Blende, lackabhängige Dosis 250 $\mu\text{C}/\text{cm}^2$.

7. Entwickeln: MIBK 40 s; 20 s in Propanol neutralisieren; Trocknen mit Stickstoffpistole (N_2).

8. Aufdampfen: Ti (5 nm), Au (30 bis 100 nm).

9. Lift-off: Aceton, 60 °C, einen Tag.

Abbildungsverzeichnis

1.1. Ausgangssituation und laterale Modulation	3
2.1. Bandstruktur und Zustandsdichte von verspanntem HgTe	5
2.2. Chirale Randleitung im Quanten-Hall-Regime	7
2.3. Randzustände im Quanten-Spin-Hall-Zustand	8
2.4. Randbandstrukturen und Bandinversion	9
2.5. TRIM und Paritätsvorzeichen schwacher topologischer Isolatoren	11
2.6. Paritätskriterium und Oberflächenzustände starker TIs	12
2.7. Bandkanten und Bandinversion in CdTe und HgTe	14
2.8. Bandstruktur an der CdTe/HgTe-Grenzfläche	15
2.9. Einfluss der Verspannung auf die HgTe-Bandstruktur	16
3.1. Landau-Fächer und Shubnikov-de-Haas-Oszillationen	20
3.2. Landau-Fächer eines 3D-topologischen Isolators	21
3.3. Quanten-Hall-Effekt in verspanntem HgTe	23
4.1. Flachbandbedingung der Weiss-Oszillationen	26
4.2. Zyklotronbahn in einem periodischen Potential	27
4.3. Semiklassische Trajektorien im modulierten 2DES	28
4.4. Geschlossene und offene Trajektorien	32
4.5. Bestimmung der Modulationsstärke aus dem Sättigungsfeld	33
5.1. Schichtfolge des 80-nm-HgTe-Wafers	39
5.2. Gateabhängiger Transport in verspanntem HgTe	40
5.3. Bandprofile für verschiedene Gate-Regime	41
6.1. Herstellungszyklus der Mesa-Struktur	46
6.2. Probengeometrie mit Streifen- und Top-Gate	47
6.3. Probengeometrie der modulierten und Referenz-Hall-Bar	48
6.4. Herstellungsablauf der Doppel-Gate-Struktur	49
6.5. REM-Aufnahme der Goldstreifen	51
6.6. Querschnitt der HgTe-Doppel-Gate-Struktur	51
6.7. Elektrische Kontaktierung und Messaufbau	52
6.8. Helium-Kryostat mit ^3He -Insert	53
7.1. Charakterisierung der Referenz-Hall-Bar	56
7.2. Beweglichkeiten und freie Weglängen der Referenz-Hall-Bar	59
7.3. Leckstrommessung der Gates	60
7.4. Hysterese der Doppel-Gate-Struktur	61
7.5. Gate-Maps verschiedener Doppel-Gate-Geometrien	63
7.6. Abgeschätzte Richtung konstanten Modulationspotentials	64
7.7. Gate-Map mit Sweep-Richtungen	65

7.8. Weiss-Oszillationen in Bandlücke und Leitungsband	68
7.9. Gitterperiodenabhängigkeit der Weiss-Oszillationen	69
7.10. Vergleich symmetrischer und asymmetrischer Gittergeometrien	70
7.11. Weiss-Oszillationen im n-Regime	74
7.12. Wasserfalldiagramm der Weiss-Oszillationen	75
7.13. Weiss-Oszillationen im Lochbereich	77
7.14. Ladungsträgerdichten im modulierten Bereich	80
7.15. Maximal aufgelöste Weiss-Oszillationsminima	81
7.16. Beweglichkeit und freie Weglänge im modulierten Bereich	83
8.1. Einzelsweep-Simulation im Leitungsband	88
8.2. Einzelsweep-Simulation in der Bulk-Bandlücke	89
8.3. Einzelsweep-Simulation im Valenzband	90
8.4. Simulationen der Weiss-Oszillationen im Elektron-Loch-System	93
8.5. Messung und Simulation mit SdH-Beitrag	94
8.6. Theoretische Bandstruktur von verspanntem HgTe	95
8.7. Bandprofile im Valenzbandregime	96
9.1. Experimentelle Kontrolle der Modulationsstärke	100
9.2. Ungescreentes COMSOL-Potentialprofil	101
9.3. Thomas-Fermi-gescreentes Modulationspotential für Elektronen	103
9.4. Fourieramplituden des gescreenten Elektronenpotentials	104
9.5. Gescreentes Potential entlang der Modulationsstärke	105
9.6. Thomas-Fermi-gescreentes Modulationspotential für Löcher	106
9.7. Fourieramplituden des gescreenten Lochpotentials	107
10.1. Perspektivische Darstellung der Weiss-Oszillationen	110
A.1. Methoden zur lateralen Modulation in HgTe	122
A.2. Anharmonisches eindimensionales Modulationspotential	123
A.3. Nahezu kompensiertes Restpotential	123
A.4. Fourieramplituden bei nahezu kompensierter Grundharmonischer	124
A.5. Grundharmonische und zweite Harmonische der WO-Struktur	125

