

类特异材料半导体复合结构中的电子 Tamm 态

武执政 余坤 郭志伟 李云辉 江海涛

Electronic Tamm states of metamaterial-like semiconductor composite structures

Wu Zhi-Zheng Yu Kun Guo Zhi-Wei Li Yun-Hui Jiang Hai-Tao

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 64, 107302 (2015) DOI: 10.7498/aps.64.107302

在线阅读 View online: <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.107302>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn/CN/Y2015/V64/I10>

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

基于混合周期栅网结构的频率选择表面设计研究

Design and study of frequency selective surface based on hybrid period metallic mesh

物理学报.2015, 64(6): 067302 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.067302>

拓扑绝缘体 Bi_2Se_3 中层堆垛效应的第一性原理研究

Stacking effects in topological insulator Bi_2Se_3 : a first-principles study

物理学报.2014, 63(18): 187303 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.63.187303>

InAlN 材料表面态性质研究

Surface states of InAlN film grown by MOCVD

物理学报.2013, 62(17): 177302 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.62.177302>

非对称 DBR-金属-DBR 结构的光学 Tamm 态理论研究

Optical Tamm state theory study on asymmetric DBR-metal-DBR structure

物理学报.2013, 62(16): 167303 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.62.167303>

光学透明频率选择表面的设计研究

Design and study of optically transparent band-pass frequency selective surface

物理学报.2013, 62(14): 147304 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.62.147304>

类特异材料半导体复合结构中的电子 Tamm 态*

武执政 余坤 郭志伟 李云辉 江海涛†

(同济大学物理科学与工程学院, 先进微结构材料教育部重点实验室, 上海 200092)

(2014年12月8日收到; 2014年12月25日收到修改稿)

通过选取具有特殊能带结构的半导体材料碲镉汞 ($\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$), 类比电磁体系得到了电子体系中的类单负材料、类双负材料等类特异材料, 然后将其组合成一维复合异质结构. 通过数值计算, 发现复合结构中存在新型电子 Tamm 态, 包括反向电子 Tamm 态和含类近零折射率材料复合结构中的电子 Tamm 态. 这些结果拓展了人们对电子 Tamm 态的认识.

关键词: 电子 Tamm 态, 能带反转, 碲镉汞

PACS: 73.20.-r, 66.70.Df, 73.21.Cd

DOI: 10.7498/aps.64.107302

1 引言

电子 Tamm 态的概念最早由 Tamm 在 1932 年提出^[1], 之后在半导体超晶格中得到证实^[2]. 在半无限晶体中, 由于晶格的不完整性使得周期势场在表面处中断, 造成电子波函数在晶体表面外侧和内侧均按指数形式衰减. 这种局域在表面附近的电子态即被称为 Tamm 表面态. 由于波的相通性, 近年来人们在具有周期性介质的电磁微结构(被称为光子晶体^[3,4])的研究中, 通过类比固体物理中的电子 Tamm 态, 提出了光学 Tamm 态^[5,6]. 近期, 随着特异材料^[7-10] (metamaterials) 这一类具有奇特电磁性质材料的出现, 人们发现含特异材料的电磁复合结构中可能存在更为丰富的光学 Tamm 态^[11-13], 例如相速度和群速度方向相反的反向光学 Tamm 态^[13]. 事实上, 反过来很多在电磁体系中出现的奇特现象也可以移植到电子体系中来, 从而将特异材料的奇异电磁波传播现象与特殊电子能带所导致的新奇电子传输现象联系起来^[14-17]. 例如, 人们将负折射率特异材料中的光学负折射成像推广到石墨烯 P-N 结中的电子负折射成像中^[14]. 特异材料及其复合结构在电子体系中的对应必然能够带

来许多新奇的电子特性. 本文选取具有特殊能带结构的半导体材料碲镉汞 ($\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$), 类比电磁体系得到了电子体系中的类单负材料、类双负材料等类特异材料. 然后将其组合成复合异质结构, 并且得到其中的电子 Tamm 态色散方程. 研究发现基于碲镉汞的复合结构中存在更为丰富的电子 Tamm 态, 例如反向电子 Tamm 态和含类近零折射率材料复合结构中的电子 Tamm 态. 这些结果拓展了人们对电子 Tamm 态的认识.

2 基于碲镉汞材料的理论模型

2.1 碲镉汞 ($\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$) 材料

我们知道, 对于沿 x 方向传播的平面电磁波, 如果电场在 y 方向振动, 那么亥姆霍兹方程可化成一维的偏微分方程:

$$\frac{\partial^2 E_y}{\partial x^2} + k^2 E_y = 0, \quad (1)$$

其中波矢大小 $k = \omega\sqrt{\varepsilon\mu}$ (ω 为角频率, ε 和 μ 分别为介质的介电常数和磁导率), E_y 为电场. 同时, 在电子体系, 一维情况下描述电子运动的薛定谔方程可写成如下形式:

* 国家重点基础研究发展计划 (批准号: 2011CB922001)、国家自然科学基金 (批准号: 11234010, 11074187)、上海市教委科研创新基金 (批准号: 14ZZ040) 和中央高校基本科研专项资金资助的课题.

† 通信作者. E-mail: jiang-haitao@tongji.edu.cn

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{2m}{\hbar^2}(E - V)\psi = 0, \quad (2)$$

此处的 m , E , V 分别表示给定材料中的电子有效质量、电子能量和电子所处的势场, ψ 为电子的概率波函数, \hbar 为普朗克常数除以 2π . 上述两式在形式上非常类似. 通过对两种体系的边界条件进行对比分析, 可以看出电磁体系中的 ε 和 μ 等参数可用电子有效质量、电子能量和电子所处的势场所满足的一定关系来类比对应. 对应关系为: $E_y \rightarrow \psi$, $\varepsilon \rightarrow 2(E - V)$, $\mu \rightarrow m$, $\omega \rightarrow 1/\hbar$ [18]. 这意味着在具有特殊电子能带结构的半导体材料中, 可以实现类比负 ε 和负 μ 等的电子材料.

碲镉汞 ($\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$) 正是一种具有特殊电子能带结构的半导体材料, 它是三种元素按阴阳离子成键形成的所谓赝二元系化合物的半导体合金材料, 可以看作是半导体 CdTe 和 HgTe 的固溶体. 碲镉汞是一种能以任何比例合成的三元合金, 调节其合成比例, 可以很方便地改变其能隙宽度. 碲镉汞晶体的能带结构可用 Kane 模型 [19,20] 来描述. 研究表明, CdTe 晶体是正常半导体, 能隙宽度 $E_{\text{CdTe}} = 1.65$ eV (77 K), 而 HgTe 晶体的能带结构却为“反转型”的负能隙, 能隙宽度 $E_{\text{HgTe}} = -0.26$ eV (77 K), 是半金属. 所以碲镉汞的能隙宽度随合金组分增加连续单调地从负变成零, 再变到正, 而且接近线性.

在过去的几十年中, 人们广泛深入地研究了由这种合金组成的异质结构的性质 [21-24], 通过实验测量以及理论上的计算, 得到了电子有效质量、电子能量和电子所处的势场之间的函数关系如下 [18]:

$$E - V = E - E_{\Gamma_6}, \quad (3)$$

$$m = \frac{1}{\frac{2P^2}{3} \left(\frac{2}{E - E_{\Gamma_8}} + \frac{1}{E - E_{\Gamma_7}} \right)}, \quad (4)$$

其中 E_{Γ_6} , E_{Γ_7} , E_{Γ_8} 分别是能态 Γ_6 , Γ_7 , Γ_8 的带边能量, 满足 $E_{\Gamma_6} \approx (1.47x + 0.08)$ eV, $E_{\Gamma_7} \approx (-0.36x - 0.59)$ eV, $E_{\Gamma_8} \approx (-0.36x + 0.36)$ eV; P 为 Kane 参数, 满足 $2m_e P^2 \approx 18.5$ eV, m_e 为电子真实质量. 根据它们之间的变化关系可以给出碲镉汞结构的电子能量 E 与 x 的关系图, 并由 $E - V$ 和 m 的取值情况将其分为四个区域, 如图 1 所示. 对于图中的区域 I, $E - V > 0$, $m > 0$, 相当于电磁体系中的 $\varepsilon > 0$, $\mu > 0$, 即代表的是类双正材料; 对于区域 II, $E - V < 0$, $m < 0$, 对应 $\varepsilon < 0$, $\mu < 0$, 代表的是类双负材料; 对于区域 III, $E - V < 0$, $m > 0$, 对应 $\varepsilon < 0$, $\mu > 0$, 代表的是类电单负材料; 对于区

域 IV, $E - V > 0$, $m < 0$, 对应 $\varepsilon > 0$, $\mu < 0$, 代表的是类磁单负材料.

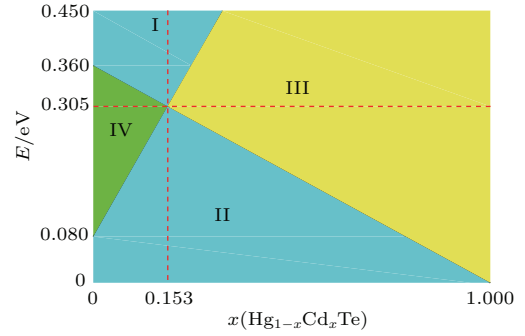


图 1 (网刊彩色) 碲镉汞结构的电子能量 E 与 x 的关系
Fig. 1. (color online) The variance of electron energy E with x for $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ semiconductors.

同时, 从碲镉汞的电子能量 E 与 x 的关系图中可以看出, 在区域 I 与区域 II 交界处附近, 即 $x = 0.153$, $E = 0.305$ eV 附近, 半导体材料实现了由类双负材料向类双正材料的转变. 在此交界处附近, $E - V \approx 0$, $m \approx 0$, 相当于特异材料中的 $\varepsilon \approx 0$, $\mu \approx 0$, 所以在此处实现了类近零折射率材料. 如果取 $x = 1$ 时, 即 CdTe 材料, 当 $E = 0 - 0.45$ eV 时, $E - V < 0$, $m > 0$, 可以实现类电单负材料; 取 $x = 0$ 时, 即 HgTe 材料, 当 $E = 0.08 - 0.36$ eV 时, $E - V > 0$, $m < 0$, 可以实现类磁单负材料. 这样, 我们便在电子体系中找到了类似特异材料的各种半导体材料, 为进一步研究复合结构提供了依据.

2.2 复合结构中电子 Tamm 态色散方程

通过类比特异材料产生光学 Tamm 态的一维异质结构, 我们设计了基于碲镉汞 ($\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$) 的半导体复合结构, 如图 2 所示. 图中材料 S 为半导体合金 $\text{Hg}_{0.847}\text{Cd}_{0.153}\text{Te}$ ($x = 0.153$), 在不同的电子能量处, 可以实现类双负材料、类双正材料和类近零折射率材料. 图中材料 A, B 分别为半导体 CdTe ($x = 1$) 和 HgTe ($x = 0$), 厚度分别为 d_1 , d_2 , 由 2.1 节可知, 在一定的电子能量区间内, 它们可以分别实现类电单负材料和类磁单负材料. 在电磁体系, 由两种单负材料组成的一维周期结构中存在着基于紧束缚模型机理形成的零有效相位能隙 [25]. 类比电磁体系, 在由两种类单负材料组成的一维电子周期结构 (CdTe /HgTe 超晶格) 中, 则存在着电子零有效相位能隙, 见图 3 所示的 $d_1 = 2$ nm, $d_2 = 14$ nm 时沿 x 方向的电子色散曲线 (求解过程详见下一段). 由于电子零有效相位能隙的存在, 图 2 的复合结构中将有可能存在电子 Tamm 态.

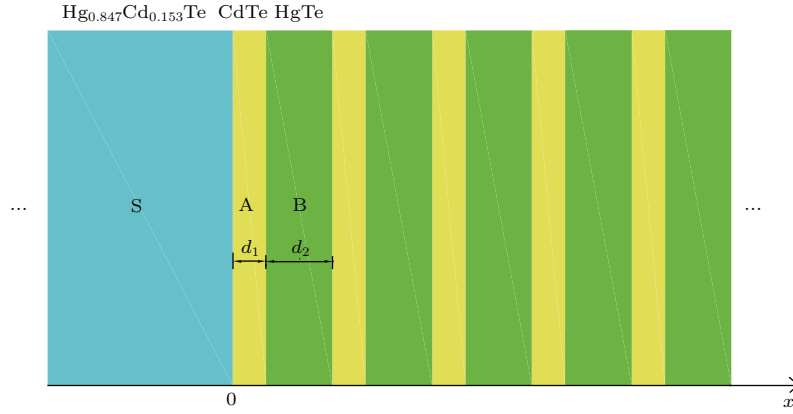


图2 (网刊彩色) 基于碲镉汞的一维半导体复合结构示意图

 Fig. 2. (color online) The schematic of one-dimensional composite structure based on $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ semiconductors.

现在我们来推导复合结构中电子 Tamm 态的色散方程. 首先, 根据一维薛定谔方程, 考虑到边界连续条件, 可以采用传输矩阵方法^[6], 其中在超晶格中的传输矩阵:

$$M = \begin{pmatrix} A & B \\ C & D \end{pmatrix}, \quad (5)$$

$$A = e^{ik_1 d_1} \left[\cos(k_2 d_2) + \frac{i}{2} \left(\frac{\kappa_1}{k_2} + \frac{k_2}{\kappa_1} \right) \sin(k_2 d_2) \right], \quad (6)$$

$$B = e^{ik_1 d_1} \frac{i}{2} \left(\frac{k_2}{\kappa_1} - \frac{\kappa_1}{k_2} \right) \sin(k_2 d_2), \quad (7)$$

$$C = e^{-ik_1 d_1} \frac{i}{2} \left(\frac{\kappa_1}{k_2} - \frac{k_2}{\kappa_1} \right) \sin(k_2 d_2), \quad (8)$$

$$D = e^{-ik_1 d_1} \left[\cos(k_2 d_2) - \frac{i}{2} \left(\frac{\kappa_1}{k_2} + \frac{k_2}{\kappa_1} \right) \sin(k_2 d_2) \right], \quad (9)$$

其中

$$k_j = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2(E - V_j)m_j - \beta^2} \quad j = 1, 2,$$

$$\kappa_1 = k_1 \frac{m_2}{m_1},$$

k_j 是 j 层中垂直界面的波矢分量, β 为平行界面的波矢分量, $E - V_j$ 和 m_j 的数值见 (3) 和 (4) 式. 由布洛赫定理, 我们得到如下色散方程:

$$e^{iKd} = \frac{1}{2} \left[(A + D) \pm \sqrt{(A + D)^2 - 4} \right], \quad (10)$$

其中 K 是布洛赫波矢, $d = d_1 + d_2$ 是晶格常数. 因此带边可以由方程 $\left| \frac{1}{2}(A + D) \right| = 1$ 表示. 图 3 中的色散曲线即是方程 (10) 在 $\beta = 0$ 时的解. 在方程

(10) 中, 当计算电子能量 E 随 β 的变化时, 则给出投影能带图.

在界面 $x = 0$ 的左侧即材料 S 中的垂直界面波矢 $k_s = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2(E - V_s)m_s - \beta^2}$. 当 $\beta^2 > 2(E - V_s)m_s$, 因为 k_s 为虚数, 所以可令 $q_s = \frac{k_s}{i} = \frac{1}{\hbar} \sqrt{\beta^2 - 2(E - V_s)m_s}$. 由 $x = 0$ 边界处波函数连续条件以及波函数在界面两侧指数衰减, 可以得到电子 Tamm 态的色散方程:

$$\frac{q_s m_1}{k_1 m_s} = -i \frac{e^{iKd} - A - B}{e^{iKd} - A + B}. \quad (11)$$

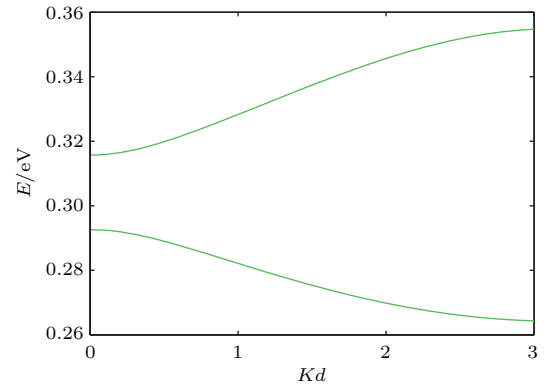

 图3 (网刊彩色) CdTe/HgTe 超晶格中 $d_1 = 2$ nm, $d_2 = 14$ nm 时的电子色散关系

 Fig. 3. (color online) Dispersion relation of electrons in the CdTe/HgTe superlattice with $d_1 = 2$ nm, $d_2 = 14$ nm.

3 数值仿真结果

我们现在来数值求解色散方程 (11). 为方便起见, β 的值用某个波矢 $k_0 = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2(E - V_0)m_0}$ 进行归一化, 例如选取 $E - V_0 = 0.185$ eV, $m_0 =$

$0.054m_e$. 选取半导体 CdTe 和 HgTe 的厚度分别为 $d_1 = 2$ nm, $d_2 = 14$ nm, 我们给出了相应的电子色散图, 如图 4 所示. 其中, 紫色和白色区域分别表示 CdTe / HgTe 超晶格中投影能带中的通带和禁带, 红线表示复合结构中的电子 Tamm 态. 由图 1 可知, 图 4 中的蓝色虚线 $E = 0.305$ eV 表示半导体 $\text{Hg}_{0.847}\text{Cd}_{0.153}\text{Te}$ 实现类双负和类双正材料的分界线, 并且在其附近可看作类近零折射率材料; 绿色虚线 $E = 0.36$ eV 表示 HgTe 实现类磁单负材料和类双正材料的分界线; CdTe 在整个能量区间内均为类电单负材料. 因为在不同的电子能量区间复合结构表现出不同的类特异材料的性质, 所以图中的五条 Tamm 态色散曲线是对应不同结构的电子 Tamm 态. 下面分别讨论这五条 Tamm 态色散曲线.

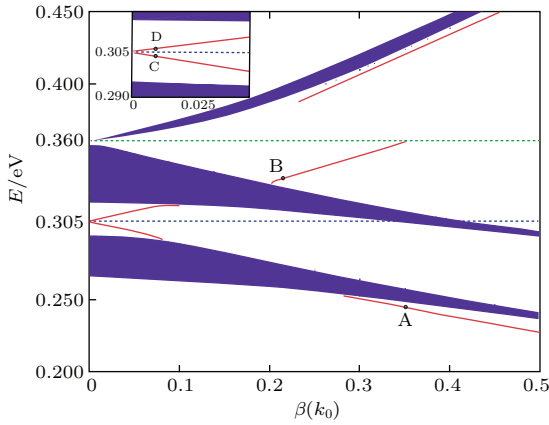


图 4 (网刊彩色) $d_1 = 2$ nm, $d_2 = 14$ nm 时的色散图 其中紫色和白色区域对应 CdTe / HgTe 超晶格的投影能带图中的通带和禁带, 红线表示复合结构中的电子 Tamm 态, 小插图为 $E = 0.305$ eV 附近的放大图

Fig. 4. (color online) Dispersion relation for $d_1 = 2$ nm, $d_2 = 14$ nm, where the purple and the white regions correspond to the allowed and the forbidden bands in projected band diagram of CdTe/HgTe superlattice, respectively. Red line indicates the electronic Tamm state in composite structure, and the inset is the enlarged view when E is around 0.305 eV.

在第一个能隙(最下面的能隙)中, $\text{Hg}_{0.847}\text{Cd}_{0.153}\text{Te}$, CdTe 和 HgTe 分别为类双负材料、类电单负材料和类磁单负材料. 从图 4 中可以看出, 这个能隙中的表面局域模开始于第一个通带的下带边并逐渐偏离下带边向下移动, 斜率一直为负. 当 Tamm 态靠近带边时, 相应的场在表面中的局域性较弱, 偏离带边时, 局域性则较强. 因为色散曲线的斜率对应电子 Tamm 态的群速度, 斜率为负的色散表示此时 Tamm 态为反向态. 这是因为在类双负材料中, 电子的相速度和群速度方向相反. 因此,

在含类双负材料的复合结构中出现的电子 Tamm 态将保留类双负材料带来的性质, 从而形成反向的电子 Tamm 态.

在第二个能隙中, 即打开的电子零有效相位能隙中, 半导体 CdTe, HgTe 分别为类电单负材料和类磁单负材料, 而 $\text{Hg}_{0.847}\text{Cd}_{0.153}\text{Te}$ 则是在 $E = 0.305$ eV 处由类双负材料转变为类双正材料. 可以看到在这个能隙中存在两条色散曲线, 这两种局域模式分布在 $E = 0.305$ eV 两侧, 一条斜率为正, 一条斜率为负, 原因是由于 $\text{Hg}_{0.847}\text{Cd}_{0.153}\text{Te}$ 材料性质的转变引起的. 另外, 当能量 E 趋近于 0.305 eV 时, 半导体 $\text{Hg}_{0.847}\text{Cd}_{0.153}\text{Te}$ 的 $(E - V_s)m_s$ 趋近于零, 即可看作类近零折射率材料, 并且内部的波矢满足 $q_s = \frac{1}{\hbar} \sqrt{\beta^2 - 2(E - V_s)m_s}$. 由此可知, 当 $(E - V_s)m_s$ 趋近于零时, 对于局域模式, β 也会趋近于零, 于是便有了两条无限接近 $E = 0.305$ eV 的色散曲线. 所以, 在 $E = 0.305$ eV 附近的局域模式即是含类近零折射率材料结构中的电子 Tamm 态.

在第三个能隙中, 虚线 $E = 0.36$ eV 下方, $\text{Hg}_{0.847}\text{Cd}_{0.153}\text{Te}$, CdTe 和 HgTe 分别为类双正材料、类电单负材料和类磁单负材料. 这个能量区间内的局域模式开始于第二个通带的上带边并逐渐偏离上带边直至 $E = 0.36$ eV 处断开, 斜率始终为正. 虚线 $E = 0.36$ eV 上方, $\text{Hg}_{0.847}\text{Cd}_{0.153}\text{Te}$, CdTe 和 HgTe 分别为类双正材料、类电单负材料和类双正材料. 这个能量区间内的局域模式的斜率始终为正, 为传统的正向电子 Tamm 态.

为了理解不同 Tamm 态的特性, 我们计算了图 4 中的 A, B 两点和小插图中 C, D 两点处用最大幅度归一化的电子概率波幅度 ($|\psi|$) 分布, 分别如图 5(a)–(d) 所示. 四点对应的 β 分别为 0.35, 0.22, 0.01, 0.01, 电子能量分别为 0.2456, 0.3343, 0.3033, 0.3068 eV. 红色实线表示电子概率波幅度在复合结构中的分布. 由图 5 可以看出, 电子概率波均局域在 CdTe / HgTe 超晶格和均匀材料 $\text{Hg}_{0.847}\text{Cd}_{0.153}\text{Te}$ 的分界面 ($x = 0$) 附近, 并且在其中都出现了指数衰减. 但是, 对应 A, B 和对应 C, D 的分布中, 电子概率波在 $\text{Hg}_{0.847}\text{Cd}_{0.153}\text{Te}$ 中的衰减程度很不一样. 在 $E = 0.305$ eV 附近, $\text{Hg}_{0.847}\text{Cd}_{0.153}\text{Te}$ 可以看作类近零折射率材料, 因而电子的波矢很小, 导致电子的概率波振幅在其中衰减非常缓慢, 如图 5(c) 和 (d) 所示. 这反映了含类近零折射率材料的复合结构中的电子 Tamm 态与一般电子 Tamm 态的区别.

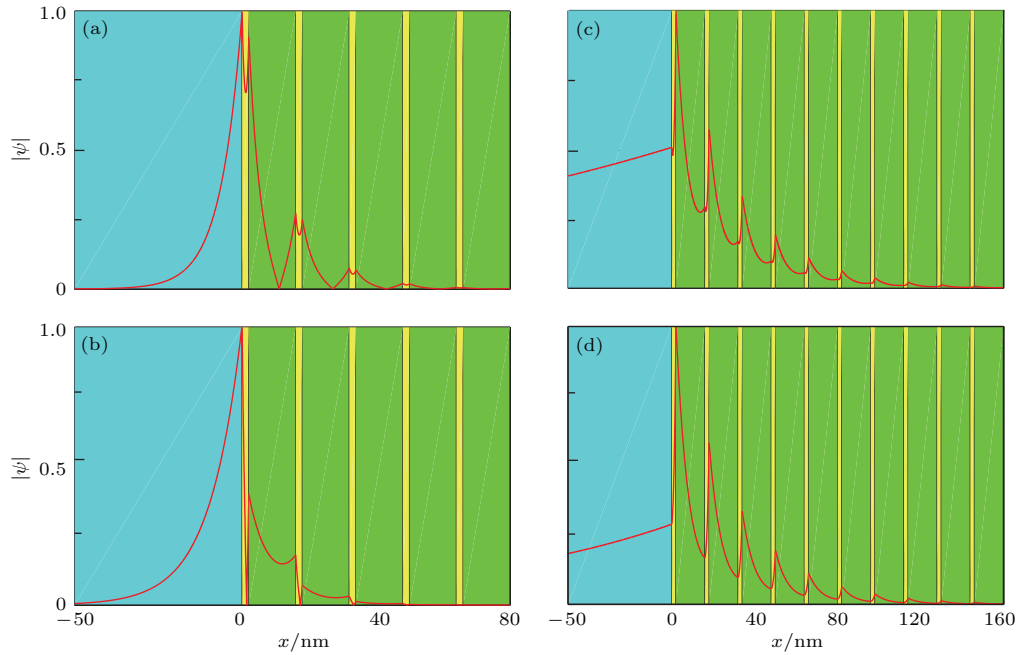


图5 (网刊彩色) 复合结构中电子概率波幅度分布 (a) 对应图4中A点, $\beta = 0.35$, $E = 0.2456$ eV; (b) 对应B点, $\beta = 0.22$, $E = 0.3343$ eV; (c) 对应C点, $\beta = 0.01$, $E = 0.3033$ eV; (d) 对应D点, $\beta = 0.01$, $E = 0.3068$ eV
 Fig. 5. (color online) Distributions of the amplitude of the electronic probability in composite structure: (a) for the A point in Fig. 4, $\beta = 0.35$, $E = 0.2456$ eV; (b) for the B point, $\beta = 0.22$, $E = 0.3343$ eV; (c) for the C point, $\beta = 0.01$, $E = 0.3033$ eV; (d) for the D point, $\beta = 0.01$, $E = 0.3068$ eV.

4 结 论

我们利用碲镉汞 ($\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$) 这类具有特殊能带结构的半导体材料, 通过类比实现了电子体系中的各种类特异材料, 并将其组合成复合结构. 通过数值计算, 我们发现基于碲镉汞的复合结构中存在更为丰富的电子 Tamm 态, 例如返向电子 Tamm 态和含类近零折射率材料复合结构中的电子 Tamm 态. 这些结果拓宽了人们对电子 Tamm 态的认识, 并为其实验研究提供了理论指导.

参考文献

- [1] Tamm I Y 1932 *Phys. Z. Sowjetunion* **1** 733
- [2] Ohno H, Mendez E E, Brum J A, Hong J M, Agulló R F, Chang L L, Esaki L 1990 *Phys. Rev. Lett.* **64** 2555
- [3] Yablonoitch E 1987 *Phys. Rev. Lett.* **58** 2059
- [4] John S 1987 *Phys. Rev. Lett.* **58** 2486
- [5] Yeh P, Yariv A, Cho A Y 1978 *Appl. Phys. Lett.* **32** 104
- [6] Yeh P 1988 *Optical Waves in Layered Media* (New York: Wiley) pp337–344
- [7] Veselago V G 1968 *Sov. Phys. Usp.* **10** 509
- [8] Pendry J B, Holden A J, Stewart W J 1996 *Phys. Rev. Lett.* **76** 4773
- [9] Pendry J B, Holden A J, Robbins D J 1999 *IEEE Trans. Microwave Theory Tech.* **47** 2075
- [10] Monticone F, Alù A 2014 *Chin. Phys. B* **23** 047809
- [11] Martorell J, Sprung D W L, Morozov G V 2006 *Pure Appl. Opt.* **8** 630
- [12] Malkova N, Ning C Z 2006 *Phys. Rev. B* **73** 113113
- [13] Namdar A, Shadrivov I V, Kivshar Y S 2007 *Phys. Rev. A* **75** 053812
- [14] Cheianov V V, Vladimir F, Altshuler B L 2007 *Science* **315** 1252
- [15] Haldane F D M, Raghu S 2008 *Phys. Rev. Lett.* **100** 013904
- [16] Wang Z, Chong Y D, Joannopoulos J D, Soljacic M 2009 *Nature* **461** 772
- [17] Zandbergen S R, Michiel J A 2010 *Phys. Rev. Lett.* **104** 043903
- [18] Jelinek L, Baena J D, Voves J, Marquesn R 2011 *New J. Phys.* **13** 083011
- [19] Kane E O 1957 *J. Phys. Chem. Sol.* **1** 249
- [20] Bastard G 1988 *Wave Mechanics Applied to Semiconductor Heterostructures* (New York: Wiley) pp41–48
- [21] Kowalczyk S P, Cheng J T, Kraut E A 1986 *Phys. Rev. Lett.* **56** 1605
- [22] Johnson N F, Hui P M, Ehrenreich H 1988 *Phys. Rev. Lett.* **61** 1993
- [23] Mecabih L, Amrane N, Belgoumene B 2000 *Physica A* **276** 495
- [24] Yu Y F, Lu C, Wei L Y, Lin S 2012 *Chin. Phys. B* **21** 017804
- [25] Jiang H T, Chen H, Li H Q, Zhang Y W 2004 *Phys. Rev. E* **69** 066607

Electronic Tamm states of metamaterial-like semiconductor composite structures*

Wu Zhi-Zheng Yu Kun Guo Zhi-Wei Li Yun-Hui Jiang Hai-Tao†

(MOE Key Laboratory of Advanced Micro-structure Materials, School of Physics Science and Engineering, Tongji University, Shanghai 200092, China)

(Received 8 December 2014; revised manuscript received 25 December 2014)

Abstract

In a semi-infinite crystal, the periodic potential is destroyed at the surface, and the electronic wave functions exponentially decay from the surface to both sides. Such localized electronic states in the vicinity of the surface are known as Tamm surface states. In analogy to the electronic Tamm states, in recent years, optical Tamm states have been found at the surface of the truncated photonic crystal composed of two kinds of dielectrics. Very recently, novel types of optical Tamm states including backward Tamm states in which the phase velocity and the group velocity of optical waves are in the opposite direction have been discovered in the photonic structures containing metamaterials. In fact, the concepts in electronic field and photonic field can inspire each other. Many unique phenomena in photonic systems can also be mapped to the electronic systems. In this paper, we study the novel types of electronic Tamm states in electronic systems, inspired by the novel types of optical Tamm states in photonic structures.

At first, comparing Maxwell equations with Schrodinger equations, one can see a correspondence between the parameters in electromagnetic system and the parameters in the electronic system. In particular, $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ semiconductors with special electronic band structures can realize various electronic materials in analogy to the optical metamaterials with various values of permittivity and permeability. By tuning the parameter x of $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$, we obtain a variety of metamaterial-like electronic materials, in analogy to the single-negative metamaterials, the double-negative metamaterials and the near-zero-index metamaterials in optical systems. Then, inspired by the one-dimensional heterostructures with metamaterials that generate optical Tamm states, we design a one-dimensional electronic heterostructure consisting of $\text{Hg}_{0.847}\text{Cd}_{0.153}\text{Te}$ and CdTe/HgTe superlattice. When $\text{Hg}_{0.847}\text{Cd}_{0.153}\text{Te}$ is analogous to the double-negative metamaterial, we find the backward electronic Tamm states in which the phase velocity and the group velocity of electronic waves are in the opposite directions. When $\text{Hg}_{0.847}\text{Cd}_{0.153}\text{Te}$ is analogous to the near-zero-index metamaterial, we find a novel electronic Tamm states in which the amplitude of the electronic probability decays very slowly in $\text{Hg}_{0.847}\text{Cd}_{0.153}\text{Te}$. The discovery of these new types of electronic Tamm states enlarges our knowledge of electronic surface states.

Keywords: electronic Tamm states, band inversion, $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$

PACS: 73.20.-r, 66.70.Df, 73.21.Cd

DOI: 10.7498/aps.64.107302

* Project supported by the National Basic Research Program of China (Grant No. 2011CB922001), the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 11234010, 11074187), the Innovation Program of Shanghai Municipal Education Commission, China (Grant No. 14ZZ040), and the Fundamental Research Funds for the Central Universities, China.

† Corresponding author. E-mail: jiang-haitao@tongji.edu.cn