

基于静电相互作用模型的光子晶体拓扑相变

陈家禾^{1,2}, 李燕方^{1,2}, 杭志宏^{1,2,3,4*}¹苏州大学物理科学与技术学院, 江苏 苏州 215006;²苏州纳米科技协同创新中心, 江苏 苏州 215006;³苏州大学高等研究院, 江苏 苏州 215006;⁴江苏省薄膜材料重点实验室, 江苏 苏州 215006

摘要 对于由完美电导体圆柱构成的蜂窝晶格光子晶体, 类比静电相互作用, 提出一种可计算晶格内与晶格间耦合强度的数学模型, 通过对比晶格内耦合和晶格间耦合, 在结构层面解释了量子自旋霍尔效应。计算结果表明, 随着圆柱半径的增加, 晶格内与晶格间耦合强度发生变化, 即引发拓扑相变。数值模拟结果证实转变位置两侧的光子晶体能带结构发生了拓扑反转, 在不同拓扑相的光子晶体界面存在单向传播的拓扑光波导。所提出的数学模型可以用于预测光/声拓扑绝缘体的拓扑相变, 为后续的元器件开发提供参考。

关键词 物理光学; 光子晶体; 拓扑相变; 静电相互作用; 拓扑绝缘体

中图分类号 O436

文献标志码 A

DOI: 10.3788/AOS202242.2126010

Topological Phase Transition of Photonic Crystals Based on Electrostatic Interaction Model

Chen Jiahe^{1,2}, Li Yanfang^{1,2}, Hang Zhihong^{1,2,3,4*}¹School of Physical Science and Technology, Soochow University, Suzhou 215006, Jiangsu, China;²Collaborative Innovation Center of Suzhou Nano Science and Technology, Suzhou 215006, Jiangsu, China;³Institute for Advanced Study of Soochow University, Suzhou 215006, Jiangsu, China;⁴Jiangsu Provincial Key Lab of Thin Films, Suzhou 215006, Jiangsu, China

Abstract For the honeycomb-lattice photonic crystals made of perfect electric conductor cylinders, a mathematical model is proposed to calculate the inter- and intra-lattice coupling intensity by analogy with electrostatic interactions. The comparison of inter- and intra-lattice coupling is made to explain the quantum spin Hall effect at the structure level. The calculated results reveal that the intra- and inter-lattice coupling intensity changes with the increase in the cylinder radius, namely that a topological phase transition occurs. Numerical simulations confirm that topological inversion of the band structures of photonic crystals on both sides of the transition position occurs, and a unidirectional topological photonic waveguide emerges at the interfaces between these photonic crystals of different topological phases. The proposed mathematical model can predict the topological phase transition of optical/acoustic topological insulators and can provide a reference for subsequent component development.

Key words physical optics; photonic crystals; topological phase transition; electrostatic interaction; topological insulators

1 引言

拓扑学最初是一个抽象的数学概念, 近年来已成为凝聚态物理领域的研究热点^[1-3]。关于拓扑系统中独特的边缘或界面量子态的研究在自旋电子学和量子计算的发展中发挥了重要作用^[4-9], 光子系统也为拓扑

性质的实现提供了良好的平台。近年来, 拓扑光学体系受到研究人员的广泛关注, 研究者们已经对不同拓扑光学系统进行了大量研究并取得了丰富的研究成果^[10-12]。通过联立麦克斯韦方程和薛定谔方程, Haldane 和 Raghu^[13]提出一种利用磁光材料打破时间反演对称性的方法, 该方法可以实现电磁波单向传输

收稿日期: 2022-05-18; 修回日期: 2022-06-09; 录用日期: 2022-07-04

基金项目: 国家自然科学基金(11874274, 12274315)

通信作者: *zhhang@suda.edu.cn

手性边缘态。这一方法很快由 Wang 等^[14]利用二维磁性光子晶体在微波频段得到了证实,并且他们在实验中成功观测到鲁棒性单向传输边界态。Wu 和 Hu^[15]根据由介质柱构成的蜂窝晶格的变形,提出一种可实现光量子自旋霍尔效应的方案。Yang 等^[16]利用氧化铝光子晶体柱,在实验上观测到光量子自旋霍尔效应及其对应的赝自旋相关的单向传输边界态。

在其他经典波系统中,利用蜂窝晶格及其变形也能实现类似的量子自旋霍尔效应。在声学系统中,He 等^[17]调节蜂窝晶格中圆柱半径的大小,Zhang 等^[18]采用蜂窝晶格的变形,他们都利用蜂窝晶格声子晶体四重简并狄拉克点及声拓扑相变,设计实现了赝自旋相关的声拓扑绝缘体。在弹性波系统中,Yu 等^[19]利用类似的机制,实现了弹性波的赝自旋传输。

光学系统中拓扑相变的产生机理也引起了研究人员的兴趣。Zhu 等^[20]证明了连续改变由圆形空气孔组成的二维光子晶体的几何结构可以产生多重拓扑相变,为拓扑相变的研究提供了新思路。然而,目前研究人员对光学系统中拓扑相变的机理研究,主要通过计算拓扑

不变量,缺乏基于光子晶体几何结构的数学模型。为了解决这一问题,本文提出一种类比静电相互作用的数学模型,通过计算和对比晶格内与晶格间耦合强度,可以解释光学量子自旋霍尔效应的存在。所提模型的数值模拟仿真结果验证了该模型在拓扑相变分析中的合理性,适用于由完美电导体组成的光子晶体以及由固体构建的声子晶体,可以明显简化今后光/声拓扑绝缘体的设计,为后续器件开发提供模型参考。

2 光子晶体结构与数学模型

如图 1(a)所示,蜂窝晶格(原胞为黑色菱形虚线)光子晶体由无限高圆柱形散射体组成。结构的晶格常数为 a 。该结构以真空(有效折射率为 1)为背景,由圆柱形散射体构成复合原胞结构。圆柱形散射体为完美电导体,半径为 r 。采用有限元软件 COMSOL Multiphysics 模拟光拓扑绝缘体特性。由于采用了理想电导体圆柱形散射体,仅需在圆柱体边界考虑理想电导体边界条件——光子晶体的磁偏振,即磁场沿光子晶体柱传播,电场在平面内。

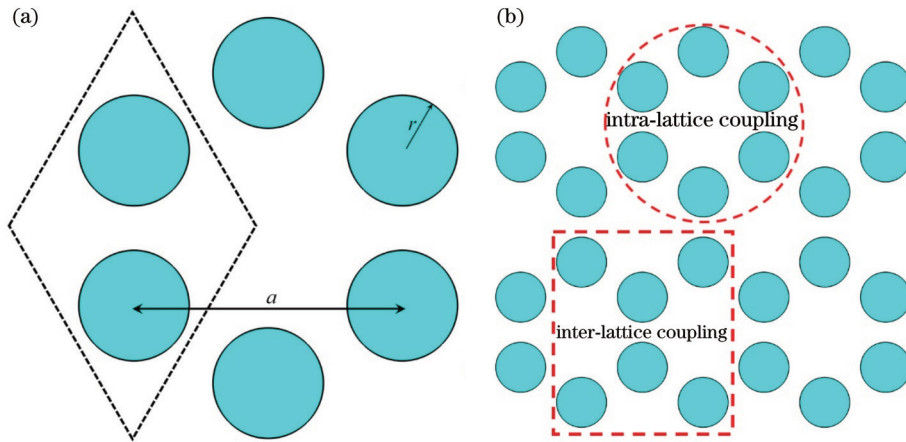


图 1 光子晶体原胞及两种耦合的示意图。(a)由完美电导体圆柱组成的蜂窝晶格光子晶体原胞示意图;(b)基于静电相互作用类比的数学模型示意图,其中圆形虚线区域表示晶格内耦合,矩形虚线区域表示晶格间耦合

Fig. 1 Schematic of a photonic crystal unit cell and two types of couplings. (a) Schematic of honeycomb lattice photonic crystal unit cell composed of perfect electric conductor cylinders; (b) schematic of mathematical model based on electrostatic interaction analogy, where circular dashed line area represents intra-lattice coupling and rectangular dashed line area represents inter-lattice coupling

图 1(a)所示的复合晶格中存在两种相互竞争的耦合:一种为晶格内耦合,定义为组成一个六角形结构的 6 个圆柱之间的相互作用,如图 1(b)的圆形虚线区域所示;另一种为晶格间耦合,定义为相邻六角形间复合晶格边界处 6 个圆柱之间的相互作用,如图 1(b)矩形虚线区域所示。为了比较这两种耦合随圆柱半径 r 的变化情况,可以类比静电相互作用构建相应数学模型进行计算。由于完美电导体边界是无损耗表面,电磁波不能在其内部传播,可以采用线积分的思路,认为圆柱的边缘均匀分布着 N 个静电荷,并利用静电势的计算方法计算它们的相互作用势,计算公式为

$$U = \sum_{m=1}^5 \sum_{n=m+1}^6 \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N \frac{1}{|\mathbf{r}_{mi} - \mathbf{r}_{nj}|} (m, n, i, j, N \in \mathbf{Z}), \quad (1)$$

式中: m 和 n 分别表示计算中选取的两个圆柱的序号; i 和 j 分别表示计算中在第 m 个圆柱和第 n 个圆柱上选取的点电荷的序号; \mathbf{r}_{mi} 与 \mathbf{r}_{nj} 分别表示这两个点电荷在同一坐标系中的位置矢量; N 表示每个圆柱上均匀分布的点电荷数量。需要特别指出的是,本研究不考虑同一圆柱中 N 个静电荷之间的相互作用。根据上述方法,可以分别计算出图 1(b)中虚线区域的晶格内耦合和晶格间耦合强度。特别地,在图 1(b)矩形虚线区域中,由于中间其他圆柱的阻挡,左上角与右下角圆柱、右上角与左下角圆柱之间并不直接相邻,它们之间的

耦合在计算中可忽略不计。

本研究选取 $N=6$ 计算晶格内耦合强度与晶格间耦合强度, 计算结果如图 2(a)、(c) 所示。利用式(1)对晶格常数 a 进行归一化, 意味着相关结论可以等比缩放。晶格内耦合强度由实线表示, 晶格间耦合强度由虚线表示。图 2(a)、(c) 分别显示圆柱半径处于 $0.05a \sim 0.25a$ 和圆柱半径处于 $0.2770a \sim 0.2790a$ 时这两种耦合强度随圆柱半径的变化情况。可以看出, 当圆柱半径处于 $0.05a \sim 0.25a$ 时, 晶格内耦合强度与晶格间耦合强度均随着圆柱半径的增大而缓慢增大, 如图 2(a) 所示。当圆柱半径处于 $0.2770a \sim 0.2790a$ 时, 这两种耦合强度均急剧增加, 且晶格间耦合强度增加得更快, 因此这两种耦合强度逐渐接近。当圆柱半径增大到 $r=0.2776a$ 时, 晶格内耦合强度与晶格间耦合强度相等, 如图 2(c) 的黑色圆点所示。继续增大圆

柱半径, 这两种耦合强度的大小关系发生转变, 且它们的差距随着圆柱半径的增大而增大。这意味着 $r > 0.2776a$ 的蜂窝光子晶体结构与 $r < 0.2776a$ 的蜂窝光子晶体结构可能处于不同的拓扑相。这种耦合大小关系的转变为拓扑相变研究提供了新思路。此外, 增加圆周上的点电荷数量到 $N=12$ 时, 耦合强度虽然在数值上与 $N=6$ 时不同, 但两种耦合强度大小关系的转变仍然会在相近的半径处产生, 如图 2(b)、(d) 所示。

为了进一步研究这种转变导致的拓扑性质变化, 将选取转变位置 ($r=0.2776a$) 两侧的点 $r=0.1328a$ 与 $r=0.2783a$, 并在后续开展仿真分析。为了更加清晰地显示两种耦合强度的变化关系, 在图 2 中标记了对应的晶格内耦合强度 (实心圆) 和晶格间耦合强度 (实心三角)。

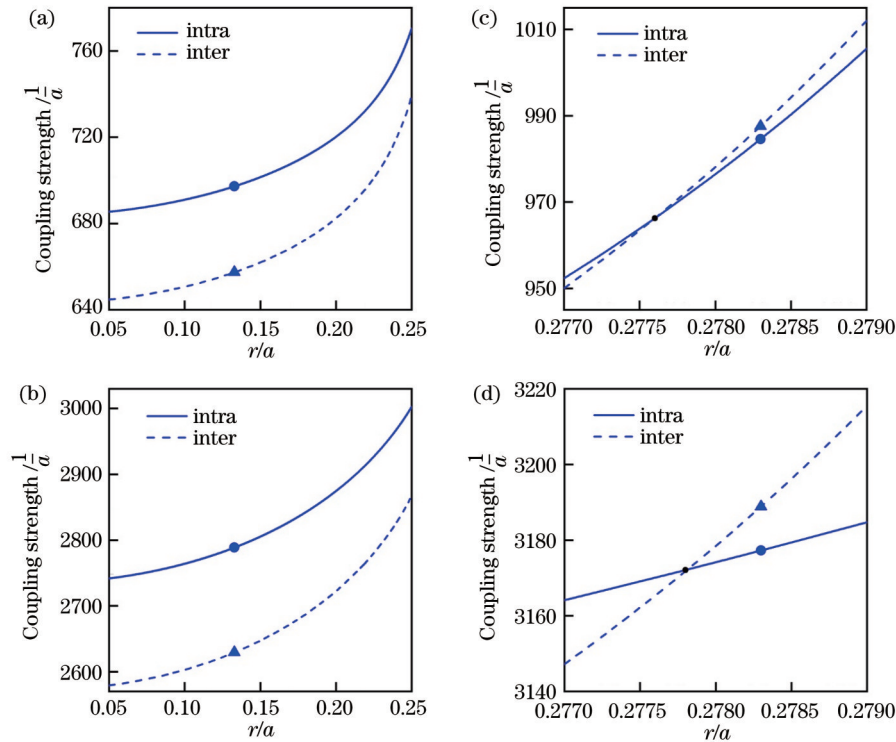


图 2 晶格内耦合强度与晶格间耦合强度随圆柱半径的变化关系 (使用无量纲化的耦合强度, 归一到晶格常数 a)。圆柱半径为 $0.05a \sim 0.25a$ 时, (a) $N=6$ 与 (b) $N=12$ 的耦合强度; 圆柱半径为 $0.2770a \sim 0.2790a$ 时, (c) $N=6$ 与 (d) $N=12$ 的耦合强度

Fig. 2 Intra-lattice and inter-lattice coupling strength changing with cylinder radius (the dimensionless coupling strength is used and normalized to the lattice constant a). Cylinder radius ranging from $0.05a$ to $0.25a$ when (a) $N=6$ and (b) $N=12$; cylinder radius ranging from $0.2770a$ to $0.2790a$ when (c) $N=6$ and (d) $N=12$

3 仿真结果与讨论

图 3 所示为不同圆柱半径 $r=0.2783a$ 与 $r=0.1328a$ 下光子晶体的能带结构, 纵坐标使用归一化频率 c/a , 其中 c 为光速。本研究只考虑磁偏振, 即磁场沿光子晶体柱方向传播。如图 3(a) 所示, 当 $r=0.2783a$ 时, 在布里渊区中心出现类似于电子 p 和 d 轨道的双重简并态, 其中 p 态的频率在 d 态之下, 表现为拓扑平庸相, 其具体的本征场见图 4。图 3(b) 所示为

$r=0.1328a$ 时的能带结构, 与 $r=0.2783a$ 时光子晶体的特征相反, 此时 p 态频率比 d 态高, 即光子晶体能带出现反转, 表现为拓扑非平庸相。由此可见, 这种拓扑性质的改变与图 2 中晶格内与晶格间耦合强度大小关系的转变密不可分。

图 4 所示为当 $r=0.2783a$ 与 $r=0.1328a$ 时光子晶体在布里渊区中心的双重简并点对应的本征模式磁场分布。可以看出, 两种光子晶体均存在一对偶极与四极模式, 且能带发生反转。光子晶体体模式的源自

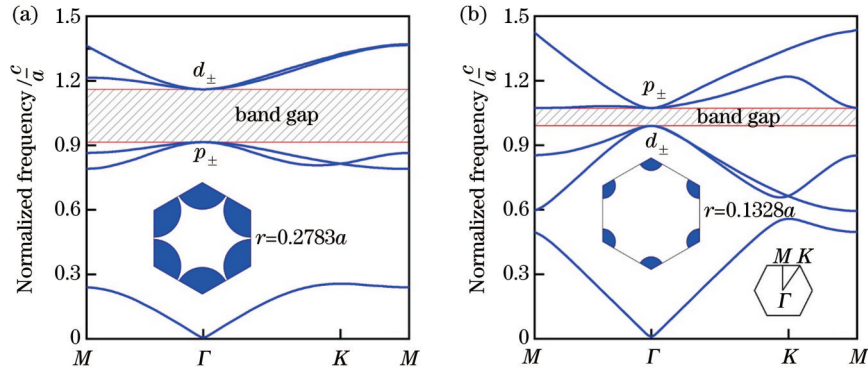


图 3 光子晶体在不同圆柱半径时的能带图。(a) $r=0.2783a$; (b) $r=0.1328a$

Fig. 3 Band diagrams of photonic crystals with different cylinder radii. (a) $r=0.2783a$; (b) $r=0.1328a$

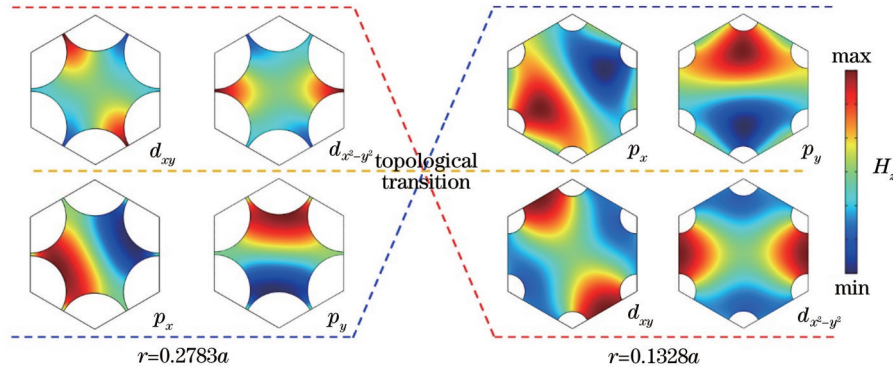


图 4 当 $r=0.2783a$ 与 $r=0.1328a$ 时赝自旋偶极模式和赝自旋四极模式在布里渊区中心的磁场 H_z 分布

Fig. 4 Simulated magnetic field H_z distributions of pseudospin dipole modes and pseudospin quadrupole modes with $r=0.2783a$ and $r=0.1328a$ at Brillouin zone center

旋 1/2 态可以通过杂化磁场 $p_{\pm} = (p_x \pm ip_y)/\sqrt{2}$ 与 $d_{\pm} = (d_{xy} \pm id_{x^2-y^2})/\sqrt{2}$ 得到。在此系统中,利用 $k \cdot p$ 微扰法,只考虑两个二重简并态的贡献,可得到体系的有效哈密顿量为

$$H^{\text{eff}}(k) = \begin{bmatrix} M - Bk^2 & Ak_+ & 0 & 0 \\ A^*k_- & -M + Bk^2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & M - Bk^2 & Ak_- \\ 0 & 0 & A^*k_+ & -M + Bk^2 \end{bmatrix}, \quad (2)$$

式中: $M = (\epsilon_d - \epsilon_p)/2$ 表示 d 态和 p 态的频率差; k 为波数, $k_{\pm} = k_x \pm ik_y$; A 由一阶微扰项的非对角元素决定; B 由二阶微扰的对角项决定,且始终小于零。基于式 (2),可得到相应能带的自旋陈数为

$$C_{\pm} = \pm \frac{1}{2} [\text{sgn}(M) + \text{sgn}(B)]. \quad (3)$$

由图 3 可知:当 $r=0.2783a$ 时, d 态频率高于 p 态频率,因此 $M > 0$, B 和 M 异号, $C_{\pm} = 0$, 表明此时产生的带隙对应拓扑平庸态;当 $r=0.1328a$ 时, p 态频率高于 d 态频率,因此 $M < 0$, $BM > 0$, $C_{\pm} = 1$, 表明此时产生的带隙对应拓扑非平庸态。自旋陈数的变化表明光子晶体确实发生了拓扑相变。而将具有量子自

旋霍尔相变的光子晶体摆放在一起,在两者的公共光子带隙中存在拓扑界面态,其本征模式是平面内自旋向下或者向上的光产生的磁场,且沿不同方向传播^[15-16]。

为了进一步验证拓扑性质的变化,可以设计尺寸为 $20a \times 24a$ 的蜂窝晶格光子晶体阵列,并在界面上方放置 $r=0.1328a$ 的圆柱,界面下方放置 $r=0.2783a$ 的圆柱,分别对应拓扑非平庸相和拓扑平庸相。两种光子晶体的界面为锯齿形界面。在光子晶体分界面处放置 4 个激发源,这 4 个激发源均匀分布在半径为 $0.1732a$ 的圆上,相位沿顺时针方向依次减小 $\pi/2$, 组成平面内自旋向下的光源。这样的光源设计在实验上已经被证实能够激发单向传输的拓扑界面态^[16]。取激发源的频率为 $1.06c/a$, 该频率处于两个光子晶体的公共带隙中,所激发的磁场分布如图 5 所示。可以看出,由于平面内自旋向下的光受到背向散射抑制,光源在光子晶体波导结构中所激发的电磁场沿边界向右传播。此外,电磁波从界面处向体内扩散时发生衰减。但是,图 3 中两种光子晶体的体带隙宽度相差较大,导致界面两侧衰减不对称,电磁波倾向于衰减进入带隙较窄的 $r=0.1328a$ 的光子晶体一侧。这种衰减的快慢不影响两种光子晶体的拓扑性质。因此,通过构建

的单向传输拓扑波导,进一步证实了两种光子晶体的拓扑性质不同。

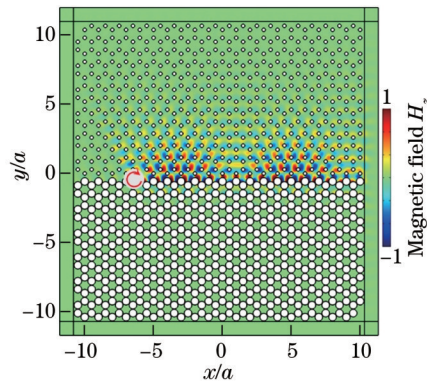


图 5 平面内自旋向下光源沿锯齿形界面传播时在 $1.06c/a$ 频率处拓扑边缘态的磁场 H_z 分布

Fig. 5 Simulated magnetic field H_z distributions of topological edge states at $1.06c/a$ excited by a pseudospin down source propagating along the zigzag interface

4 结 论

基于由完美电导体圆柱构成的蜂窝晶格,类比静电相互作用,提出了计算晶格内与晶格间耦合强度的数学模型。计算结果表明:随着圆柱半径的增加,晶格内与晶格间耦合强度的大小关系会发生转变。在转变位置两侧分别选取一种光子晶体,计算它们的能带结构,其二重简并的 p 态与 d 态发生了反转。分别计算它们的本征模式磁场分布,可以看出,两种光子晶体均存在一对偶极与四极模式。此外,为了进一步验证拓扑性质的变化,设计了尺寸为 $20a \times 24a$ 的蜂窝晶格光子晶体阵列,并构建了锯齿形界面光波导。从平面内自旋向下光源的电磁波传播情况可以看到,由于受到拓扑保护,其背向光散射被抑制,光源在光子晶体波导结构中所激发的场只沿边界向右传播。上述模拟结果验证了晶格内与晶格间耦合强度的大小关系和拓扑相变的对应关系。

虽然在模型中仅考虑磁偏振下由完美电导体结构组成的光子晶体,但相应的波动方程与无限高的声学硬墙壁柱组成的声子晶体类似,因此该模型可以推广应用到声拓扑绝缘体。同时,也有可能将对边界线积分的静电相互作用推广到计算面积分的静电相互作用,用以研究电偏振下由介质柱组成的光子晶体。所提出的基于静电相互作用的用于研究拓扑相变的数学模型,可为具有更加复杂几何结构的光/声拓扑绝缘体及其拓扑相变的研究提供参考。

参 考 文 献

- [1] Klitzing K V, Dorda G, Pepper M. New method for high-accuracy determination of the fine-structure constant based on quantized Hall resistance[J]. Physical Review Letters, 1980, 45(6): 494
- [2] Thouless D J, Kohmoto M, Nightingale M P, et al.

Quantized Hall conductance in a two-dimensional periodic potential[J]. Physical Review Letters, 1982, 49(6): 405-408.

- [3] Haldane F D M. Model for a quantum Hall effect without Landau levels: condensed-matter realization of the "parity anomaly" [J]. Physical Review Letters, 1988, 61(18): 2015-2018.
- [4] Kane C L, Mele E J. Quantum spin Hall effect in graphene[J]. Physical Review Letters, 2005, 95(22): 226801.
- [5] Bernevig B A, Hughes T L, Zhang S C. Quantum spin Hall effect and topological phase transition in HgTe quantum wells[J]. Science, 2006, 314(5806): 1757-1761.
- [6] König M, Wiedmann S, Brüne C, et al. Quantum spin Hall insulator state in HgTe quantum wells[J]. Science, 2007, 318(5851): 766-770.
- [7] Hasan M Z, Kane C L. *Colloquium*: topological insulators[J]. Reviews of Modern Physics, 2010, 82(4): 3045-3067.
- [8] Qi X L, Zhang S C. Topological insulators and superconductors[J]. Reviews of Modern Physics, 2011, 83(4): 1057.
- [9] Weng H M, Yu R, Hu X, et al. Quantum anomalous Hall effect and related topological electronic states[J]. Advances in Physics, 2015, 64(3): 227-282.
- [10] 陈剑锋, 梁文耀, 李志远. 磁光光子晶体中拓扑光子态研究进展[J]. 光学学报, 2021, 41(8): 0823015.
Chen J F, Liang W Y, Li Z Y. Progress of topological photonic state in magneto-optical photonic crystal[J]. Acta Optica Sinica, 2021, 41(8): 0823015.
- [11] 刘超, 郭小伟, 李绍荣, 等. 拓扑光子晶体边缘态理论与应用[J]. 激光与光电子学进展, 2022, 59(1): 0100001.
Liu C, Guo X W, Li S R, et al. Theory and application of edge states in topological photonic crystals[J]. Laser & Optoelectronics Progress, 2022, 59(1): 0100001.
- [12] 李雪梅, 张明达, 朱小冬, 等. 光通信波段中基于谷霍尔效应的单向波导[J]. 光学学报, 2021, 41(19): 1913001.
Li X M, Zhang M D, Zhu X D, et al. Unidirectional wave guide based on valley Hall effect in optical communication band[J]. Acta Optica Sinica, 2021, 41(19): 1913001.
- [13] Haldane F D M, Raghu S. Possible realization of directional optical waveguides in photonic crystals with broken time-reversal symmetry[J]. Physical Review Letters, 2008, 100(1): 013904.
- [14] Wang Z, Chong Y D, Joannopoulos J D, et al. Observation of unidirectional backscattering-immune topological electromagnetic states[J]. Nature, 2009, 461(7265): 772-775.
- [15] Wu L H, Hu X. Scheme for achieving a topological photonic crystal by using dielectric material[J]. Physical Review Letters, 2015, 114(22): 223901.
- [16] Yang Y T, Xu Y F, Xu T, et al. Visualization of a unidirectional electromagnetic waveguide using topological photonic crystals made of dielectric materials [J]. Physical Review Letters, 2018, 120(21): 217401.

- [17] He C, Ni X, Ge H, et al. Acoustic topological insulator and robust one-way sound transport[J]. *Nature Physics*, 2016, 12(12): 1124-1129.
- [18] Zhang Z W, Wei Q, Cheng Y, et al. Topological creation of acoustic pseudospin multipoles in a flow-free symmetry-broken metamaterial lattice[J]. *Physical Review Letters*, 2017, 118(8): 084303.
- [19] Yu S Y, He C, Wang Z, et al. Elastic pseudospin transport for integrable topological phononic circuits[J]. *Nature Communications*, 2018, 9: 3072.
- [20] Zhu X, Wang H X, Xu C Q, et al. Topological transitions in continuously deformed photonic crystals[J]. *Physical Review B*, 2018, 97(8): 085148.