

基于结构反转二维光子晶体的拓扑相变 及拓扑边界态的构建*

方云团[†] 王张鑫 范尔盼 李小雪 王洪金

(江苏大学计算机科学与通信工程学院, 镇江 212013)

(2020年3月19日收到; 2020年5月9日收到修改稿)

构建了二维六角蜂窝晶格的两种结构, 让散射体和基体材料反转. 由于特有的点群对称, 该晶格在布里渊区中心具有类比电子体系的 p 轨道和 d 轨道. 在散射体和基体反转的两种结构中, p 轨道和 d 轨道也直接实现了反转. 定量分析了产生轨道反转的原因来自于低频局域共振产生空气带和介质带的反转. 通过 p 轨道和 d 轨道的宇称特性, 构建了类比电子体系量子自旋霍尔效应的赝自旋态. 通过 Γ 点处有效哈密顿量的分析, 揭示轨道反转导致的拓扑相变. 通过结构的优化, 构建了基于赝自旋的拓扑边界态. 电磁波仿真模拟和能流矢量分析证明了结构具有电子体系量子自旋霍尔效应的特性, 即自旋与传播方向锁定和拓扑保护. 结果也证明经典波量子自旋霍尔效应的实现可以不经带隙关闭的过程. 与同类型的研究相比较, 本文的结构不需要晶格的缩放, 具有设计简单、带隙宽和边界态局域性较强的特点.

关键词: 光子晶体, 结构反转, 能带反转, 拓扑相变, 赝自旋**PACS:** 41.20.Jb, 03.65.Vf, 42.25.Gy**DOI:** 10.7498/aps.69.20200415

1 引言

量子霍尔效应和量子自旋霍尔效应开启了凝聚态物理中一个新的研究方向——拓扑绝缘体. 拓扑绝缘体成功地把数学中抽象的拓扑概念引入到描述结构量子化的电导率中. 拓扑绝缘体基本特征是体绝缘, 表面导电, 更重要的是其单向导电且具有克服背向散射的功能, 这有望解决未来芯片热效应的难题^[1-4]. 量子霍尔效应建立在时间反演对称破缺的基础上, 拓扑量由整数第一陈数来描述, 一般通过外加磁场来实现. 量子自旋霍尔效应建立在时间反演对称的基础上, 此时第一陈数为 0, 需用新的拓扑量子数 Z_2 拓扑数或自旋陈数来描述^[5,6]. 相对来说, 由于不需要外加磁场, 量子自旋霍尔效

应更具有独特的应用价值. 但所有电子体系的拓扑绝缘体在实验实现上都非常困难, 例如量子霍尔效应需要在低温和强磁场中才能实现, 给实际应用带来不便. 量子自旋霍尔效应建立在电子自旋和轨道角动量的耦合从而产生能带反转的基础上, 直到 2007 年才在 HgTe 量子阱实验体系中实现出来.

光子晶体是半导体量子理论在经典波领域的类比. 光子晶体具有更易制备的平台、更易于调控的能带结构. 人工周期的能带结构同样能够实现电子能带的拓扑性质. 因此, 伴随拓扑绝缘体的理论, 拓扑光子学的理论也得到很快的发展^[7-14]. 除了揭示和验证拓扑绝缘体的相关理论, 拓扑光子学在光通信领域也发挥独特的作用.

量子自旋霍尔效应基于成对出现的受到时间反演对称性保护的鲁棒拓扑边界态, 其关键是实现

* 江苏省工业网络安全技术重点实验室开放基金 (批准号: STICB201906) 资助的课题.

[†] 通信作者. E-mail: fang_yt1965@sina.com

边界态在能隙中的简并, 即 Kramers 简并. 电子作为费米子, 具有成对的“自旋”这个内禀属性, 其时间反演对称性正好满足这一简并条件. 光作为玻色系统, 其时间反演对称性与作为费米子的电子有本质的不同, 是无法直接构造 Kramers 简并的. 于是研究者构造各种光学赝自旋态来类比电子的自旋对. Khanikaev 等 [15] 通过双各向异性介质构造六角晶格, 并采用在高对称点附近的 TE + TE/TE - TM 线偏振作为赝自旋态; He 等 [16] 在理论上提出了一种基于压电/压磁超晶格构成的光拓扑绝缘体模型, 其采用四方晶格, 以旋光 LCP/RCP 构造赝自旋对. Guo 等 [17] 利用两种单负超材料把横电波和横磁波相结合构建了简并的自旋态, 并在实验上观察到光量子自旋霍尔效应. Bisharat 等 [18] 利用同样的方法使用反转的超材料金属表面晶格构造了简并的自旋态, 其基于表面波的拓扑边界态被限制在一维方向. 2015 年, Wu 和 Hu [19] 通过复式六方晶格中的 C_6 对称性在各向同性介质材料中构造出光量子自旋霍尔态, 其赝时间反演对称性来自晶格的对称性. 他们利用能带的折叠, 将本来处于布里渊区边界点的 Dirac 简并折叠至布里渊区中心 Γ 点, 从而形成双重 Dirac 点. 又通过拉伸和压缩晶格实现了 p 轨道和 d 轨道的能带反转. 在简并破缺后的体能带能隙中, 观测到赝自旋的鲁棒边界态. 该设计的优点是利用纯介质光子晶体构造光拓扑绝缘体, 这种不需要外加磁场的拓扑结构更具有实际应用价值. 文献 [20] 利用通过设计六角晶格 LC 电路系统构造类比实现了基于轨道反转的拓扑光子态. 之后研究者在此基础上展开了系列研究 [21-29], 虽然模型种类和方法很多, 但都包含两个要素: 其一, 能带要有 2 个双重简并点, 分别产生赝自旋的 p 轨道和 d 轨道; 其二, 要通过晶胞的缩放变形, 实现 p 轨道和 d 轨道的反转. 但由于需要能带的折叠, 晶胞单元的设计比较复杂, 依靠晶胞形变必须经历从带隙打开到关闭再重新打开的过程, 晶胞的形变是有限的, 这样导致带隙宽度非常有限, 拓扑边界态的局域效应也不强. 因此, 寻找新的机制获得轨道反转和拓扑相变就具有非常重要的意义. 本文在六角蜂窝晶格的基础上通过结构材料的反转实现拓扑相变, 并在此基础上通过优化结构, 实现自旋方向锁定的拓扑边界态, 即光量子自旋霍尔效应, 它具有带宽大、边界态局域效应明显、模型结构简单的特点.

2 结构模型设计和能带的反转

根据光量子自旋霍尔效应的设计要素, 要产生赝自旋的 p 轨道和 d 轨道, 需要能带的二重简并. 因为属于 C_6 对称点群的晶格有两个二维不可约表象 E_1 和 E_2 , 分别对应能带的二重简并点, 因此本文考虑一个六角蜂窝晶格, 如图 1 所示. 该晶格是一个三角晶格的复式格子, 每个格点是两个等价的圆柱形散射体位于基体材料中. 在图 1(a) 中, 白色空气柱是散射体, 绿色是基体介质; 在图 1(b) 中, 绿色介质柱是散射体, 白色基体是空气. 图 1(a) 和图 1(b) 的晶格是一样的, 但散射体和基体材料正好反转. 为表示方便, 以散射体英文首字母命名图 1(a) 为 A 型结构, 图 1(b) 为 D 型结构. 六边形是晶格原胞, 其中晶格基矢为 $\mathbf{a}_1 = a/2\mathbf{i} + a\sqrt{3}/2\mathbf{j}$, $\mathbf{a}_2 = a\mathbf{i}$, a 为晶格常数, 原胞边长为 $a_0 = a\sqrt{3}/3$, 两种结构散射体半径均为 $a_0/3$. 图 1(c) 是计算能带依据的简约布里渊区, Γ , K 和 M 是简约布里渊区 3 个高对称点.

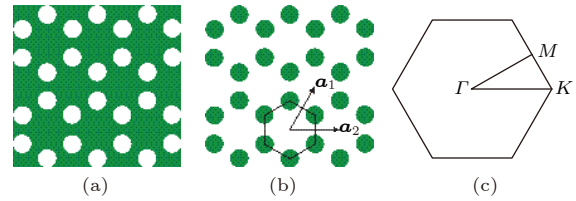


图 1 六角蜂窝晶格结构模型 (六边形是原胞, \mathbf{a}_1 和 \mathbf{a}_2 是晶格基矢) (a) A 型结构, 散射体是空气柱, 基体是介质; (b) D 型结构, 散射体是介质柱, 基体是空气; (c) 晶格第一布里渊区

Fig. 1. Schematic of hexagonal honeycomb lattice (the hexagon is the unit cell, and \mathbf{a}_1 and \mathbf{a}_2 are the basic vectors of lattice): (a) The scatterer and matrix are air rods and dielectric, respectively; (b) the scatterer and matrix are dielectric rods and air, respectively; (c) the first Brillouin zone.

在上述晶格的基础上, 应用基于有限元方法的 Comsol 软件进行能带的计算. 考虑 E 极化电磁波 (电场 E_z 分量, 磁场 H_x 和 H_y 分量), 介质介电常数为 11.7, 扫描方向为 $M-\Gamma-K$, 结果如图 2 所示. 图 2(a) 对应 A 型的晶格, 在 Γ 点出现 2 个能带简并点. 2 个简并点的 E_z 模场特征分别类比于量子力学电子波函数的 p 轨道和 d 轨道 [19]. 正三角晶格具有 C_6 对称性的晶格结构, 在 Γ 点的本征态有 2 个二维不可约表示: E_1 和 E_2 . 不可约表示 E_1 对应二重简并的偶极子态, 如图 2 中 2 个 p 轨

道: p_x 和 p_y , 具有奇宇称; 不可约表示 E_2 对应二重简并的四极子态, 如图 2 中 2 个 d 轨道: $d_{x^2-y^2}$ 和 d_{2xy} , 具有偶宇称. 当前情况下, d 轨道的频率比 p 轨道频率大, 对应的带隙是拓扑平庸的带隙. 图 2(b) 对应 D 型的晶格, 在 Γ 点也出现 2 个能带简并点. 根据简并点的 E_z 模场特征, 它们也分别类比于量子力学电子波函数的 p 轨道和 d 轨道. 同样根据正三角晶格的点群特性, 在 Γ 点的本征态同样有 2 个二维不可约表示: E_1 和 E_2 . 不同于图 2(a) 的是, 不可约表示 E_1 对应二重简并的四极子态, 如图 2(b) 中 2 个 d 轨道: $d_{x^2-y^2}$ 和 d_{2xy} , 具有偶宇称; 不可约表示 E_2 对应二重简并的偶极子态, 如图 2(b) 中 2 个 p 轨道: p_x 和 p_y , 具有奇宇称. 在图 2(b) 中, d 轨道的频率比 p 轨道频率小, 与图 2(a) 比较, 能带轨道被反转, 对应的带隙是拓扑非平庸的. 这里的轨道反转的机制与文献 [19] 及其他类似的文献不同. 通过晶格原胞的连续变形来实现轨道反转都要经历一个带隙关闭产生双重狄拉克点的过程. 目前情况下, 轨道反转直接在两种结构材料反转的晶格中实现, 没有了带隙关闭再打开的过程, 是实现基于光子量子霍尔效应拓扑相变又一种途径. 本文和文献 [18] 都是通过结构材料的反转实现了拓扑相变, 但文献 [18] 是基于金属超材料的设计, 本文是基于光子晶体结构. 另外本文设计的是一种全介质结构, 工作频段取决于晶格常数, 不受材料性质的限制, 是可以从微波扩展到光波. 文献 [21] 同样利用两个反转的二维正方形格子光子晶体构造边界态, 但需要用 Zak 相位描述能带的拓扑性质. 另外由于结构是 C_4 点群对称, 无法构建光子自旋霍尔效应的拓扑边界态.

根据图 2 模场分布的宇称可判断轨道的类型和反转. 根据电磁变分原理, 电场能量越集中于高介电常数分布区域, 模式的频率越低 [30]. 一般情况下, 对于低带隙的两个边带, 下边带的电场能量集中在高介电常数区域, 被称为“介质带”, 相当于电子的价带; 上边带的电场能量有相当一部分进入低介电常数区域, 被称为“空气带”, 相当于电子的导带 [30]. 光子晶体带隙的形成主要是 Bragg 散射产生的干涉效应. 但在低频带隙, 局域共振也发挥一定的作用 [31,32]. 在本文的六角蜂窝晶格中, 由于介质柱距离较近, 每个原胞在波长大于介质柱间距的情况下容易形成局域共振, 局域共振的结果使基体介质的电场能量增大. 对 A 型结构, 由于基体是介质, 局域共振的结果使下边带电磁能量更集中于介

质, 能带没有反转. 对 D 型结构, 由于基体是空气, 局域共振使基体空气积累了较多的电场能量, 导致低频的下边带变成空气带, 而上边带, 由于频率增加, 局域共振变弱, 变成介质带, 介质带和空气带出现反转, 从而导致图 2 中 d 轨道和 p 轨道交换了位置, 出现轨道反转现象.

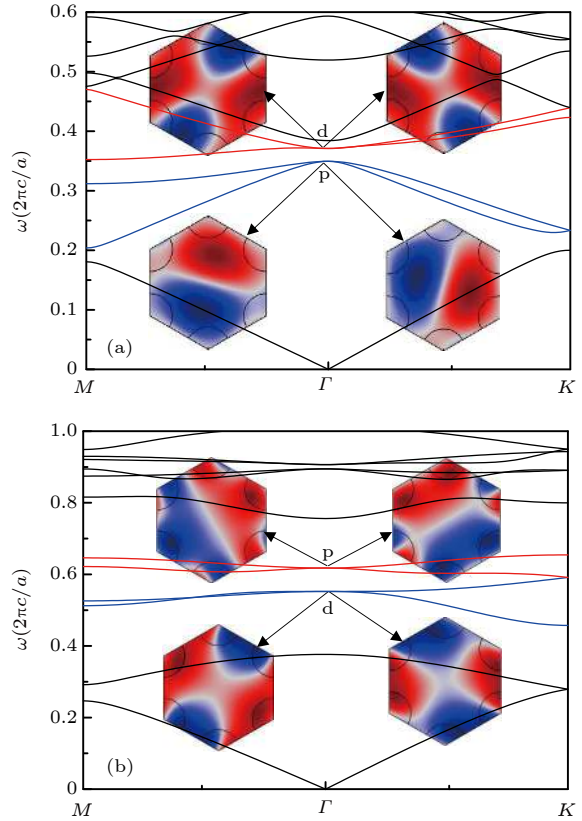


图 2 两种结构的能带和在 Γ 点的 p 轨道和 d 轨道 (a) A 型结构; (b) D 型结构
Fig. 2. Band structures of the hexagonal honeycomb lattices, and the orbitals of p and d: (a) Type A; (b) type D.

为了验证上述分析, 分别输出 Γ 点两轨道在空气和介质区域的电场 E_z 的分布数据. 根据公式 $w = \frac{1}{2} D_z E_z$ 求出每点的电场能量密度, 再对各区域求平均, 得到空气和介质区域电场平均能量密度 \bar{w}_{air} 和 $\bar{w}_{\text{dielectric}}$, 它们的比值反映电场能量分布的变化. 表 1 是针对图 1 两种结构的计算结果. 对 A 型结构, p 轨道为下边带, 其 $\frac{\bar{w}_{\text{air}}}{\bar{w}_{\text{dielectric}}}$ 值小于上边带 d 轨道的, 所以下边带是介质带, 上边带是空气带, 符合一般情况, 没有能带反转. 而对于 D 型结构, p 轨道变为上边带, 但 $\frac{\bar{w}_{\text{air}}}{\bar{w}_{\text{dielectric}}}$ 小于下边带 d 轨道的, 因此上边带变成介质带, 下边带变成空气带, 能带确实发生了反转.

表 1 电场能量密度在两种类型结构的分布
Table 1. Distribution of electric field energy density in two structures.

| | p orbit | d orbit |
|--------|--|---|
| Type A | $\frac{\bar{w}_{\text{air}}}{\bar{w}_{\text{dielectric}}} = \frac{9.8962 \times 10^{-13} \text{ J} \cdot \text{m}^{-2}}{6.4143 \times 10^{-11} \text{ J} \cdot \text{m}^{-2}} = 0.01542$ | $\frac{\bar{w}_{\text{air}}}{\bar{w}_{\text{dielectric}}} = \frac{2.834 \times 10^{-12} \text{ J} \cdot \text{m}^{-2}}{5.9366 \times 10^{-11} \text{ J} \cdot \text{m}^{-2}} = 0.04774$ |
| Type D | $\frac{\bar{w}_{\text{air}}}{\bar{w}_{\text{dielectric}}} = \frac{3.2652 \times 10^{-12} \text{ J} \cdot \text{m}^{-2}}{9.2058 \times 10^{-11} \text{ J} \cdot \text{m}^{-2}} = 0.03574$ | $\frac{\bar{w}_{\text{air}}}{\bar{w}_{\text{dielectric}}} = \frac{3.603 \times 10^{-12} \text{ J} \cdot \text{m}^{-2}}{8.5597 \times 10^{-11} \text{ J} \cdot \text{m}^{-2}} = 0.042$ |

为了验证结构的反转导致拓扑相变是不是需要特定的结构参数, 通过散射体和基体材料介电常数的相对连续的变化来观察轨道的变化. 研究中散射体半径设为 $a_0/2$, 记录在 Γ 点处 p 轨道和 d 轨道的频率随散射体介电常数 ϵ_s 和基体材料介电常数 ϵ_m 之差的变化, 初始值为 $\epsilon_s = 1, \epsilon_m = 11.7$. 结果如图 3 所示. 在 $\epsilon_s - \epsilon_m < 0$ 的区间能带没有反转, 属于拓扑平庸相; 在 $\epsilon_s - \epsilon_m > 0$ 的区间能带反转, 属于拓扑非平庸相. 对应任何 $\epsilon_s - \epsilon_m$ 互为相反数的位置, 结构是反转的.

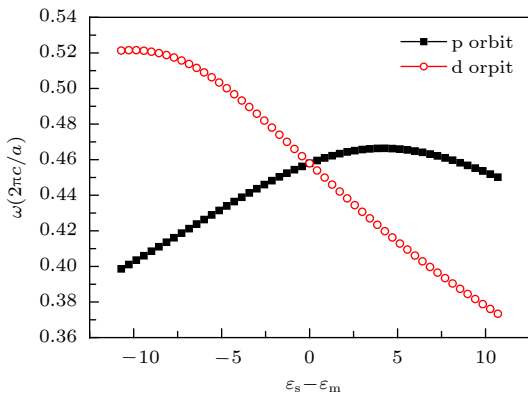


图 3 p 轨道和 d 轨道的频率随散射体材料介电常数 ϵ_s 和基体材料介电常数 ϵ_m 之差的变化

Fig. 3. Frequency positions of p and d orbits with the differences of ϵ_s and ϵ_m .

但轨道反转并不是实现光量子霍尔效应的充分条件, 光量子霍尔效应是建立在边界态的基础上, 还需要拓扑非平庸结构和拓扑平庸结构存在公共带隙, 这样在它们连接的边界上才能形成边界模式. 在图 2 中, 两带隙没有相交, 在图 3 中, 虽然在 Γ 处存在共同的带隙, 但形成边界态要在整个截断方向的波矢都存在公共带隙, 上述结构都不具备这样的条件, 无法形成边界模式.

研究发现两种结构的带隙宽度会随着散射体半径的增大而变大, 但带隙位置不一致. 受文

献 [22, 23] 的启发, 圆环结构的调节能显著改善带隙属性. 为了得到尽可能大的公共带隙, 把图 1(b) 的介质柱变成空心的圆环, 经验证, 这样内环半径的改变不影响带隙宽度, 但可以改变带隙的位置. 通过优化, 图 1(a) 空气柱半径为 $a_0/2$, 图 1(b) 介质柱外环半径为 $a_0/2$, 内环半径为 $a_0/3$. 两种周期结构的能带结构如图 4 所示, 图 4(a) 对应 A 型结构, 图 4(b) 对应 D 型结构, D 型结构在 Γ 点处实现能带轨道的反转. 在图 4(a) 中两轨道之间掺杂一条能带, 公共带隙上边应该是该能带的最低点, 测得公共频率带隙范围为 $0.43(2\pi c/a) - 0.49(2\pi c/a)$, 如图中阴影部分所示, 相对带宽 $\frac{\Delta\omega}{\omega_c} = 13\%$ (ω_c 是带隙中间频率).

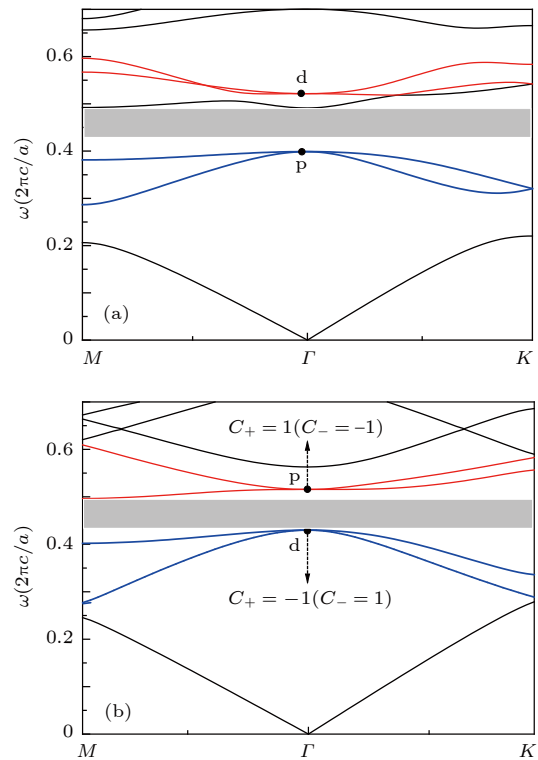


图 4 优化后两种结构的能带以及 p 轨道和 d 轨道的位置 (a) A 型结构; (b) D 型结构

Fig. 4. Band structures of the optimized lattices, and the orbitals of p and d: (a) Type A; (b) type D.

3 基于赝自旋拓扑相的理论分析

在光学系统中实现自旋霍尔效应的关键是建立受时间反转对称保护的赝自旋态. 根据 Wu 等^[19] 在对称群基础上构建的光量子自旋霍尔效应的理论, 在二维不可约表象 E_1 和 E_2 中重新构造基函数 $[p_+, p_-]$ 和 $[d_+, d_-]$, 其中 $p_{\pm} = (p_x \pm ip_y)/\sqrt{2}$, $d_{\pm} = (d_{x^2-y^2} \pm id_{2xy})/\sqrt{2}$, 得到赝时间反演算符 $T = UK$, 其中 $U = i\sigma_y$ 是一个反么正算符, K 是一个复共轭算符. 在 T 算符的作用下 $[p_+, p_-]$ 具有如下的变换:

$$\begin{cases} Tp_{\pm} = \mp ip_{\mp} \\ T^2 p_{\pm} = -p_{\pm} \end{cases} \quad (1)$$

此时 T 算符的作用完全类似于电子系统中真实的时间反演算符. 根据麦克斯韦方程, 可以由基函数对应的 E_z 场 p_{\pm} 求出对应的磁场. 具体过程如下:

$$\begin{aligned} \mathbf{H}_1 &= -\frac{i}{\mu_0\omega} \nabla \times (p_x \hat{z}) = h_{1x} \hat{x} + h_{1y} \hat{y}, \\ \mathbf{H}_2 &= -\frac{i}{\mu_0\omega} \nabla \times (p_y \hat{z}) = h_{2x} \hat{x} + h_{2y} \hat{y}, \\ \mathbf{H}_{\pm} &= -\frac{i}{\mu_0\omega} \nabla \times [(p_x \pm ip_y) \hat{z}] \\ &= (h_{1x} \pm ih_{1y}) \hat{x} \mp i(h_{1x} \pm ih_{1y}) \hat{y}. \end{aligned} \quad (2)$$

从 (3) 式可以看出, 基函数 p_{\pm} 对应的磁场是 2 个旋转方向相反的圆极化偏振, 分别对应电子自旋向上和向下态; 同样地, 基函数 d_+ 和 d_- 也分别对应电子自旋向上和向下态, 称赝自旋态. 根据 $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ 微扰理论^[19], 在 Γ 点两个二重简并的本征态分别表示为 $\Gamma_1 = p_x = |x\rangle$, $\Gamma_2 = p_y = |y\rangle$, $\Gamma_3 = d_{x^2-y^2} = |x^2 - y^2\rangle$, $\Gamma_4 = d_{2xy} = |2xy\rangle$. 在上述四个基矢下系统有效哈密顿量表示为

$$\mathbf{H}(\mathbf{k}) = \mathbf{H}_0 + \mathbf{H}'.$$

$$\text{这里 } \mathbf{H}_0 = \begin{bmatrix} \varepsilon_p & & & \\ & \varepsilon_p & & \\ & & \varepsilon_d & \\ & & & \varepsilon_d \end{bmatrix} \text{ 是系统在 } k=0 \text{ 的哈}$$

密顿量, ε_p 和 ε_d 是 p 轨道和 d 轨道的本征频率. \mathbf{H}' 是微扰项, 可表示为

$$H'_{ij} = M_{ij} + \sum_{\alpha} \frac{M_{i\alpha} M_{\alpha j}}{\varepsilon_i - \varepsilon_{\alpha}} \quad (j = 1, 2, 3, 4), \quad (4)$$

其中 $M_{ij} = \langle \Gamma_i | \mathbf{k} \cdot \mathbf{p} | \Gamma_j \rangle$ 是不同基矢 Γ_i 和 Γ_j 的交叠积分. 如果进行基矢变换, 在新的基矢空间 p_{\pm} 和 d_{\pm} 下, 系统的有效哈密顿量重写为

$$\mathbf{H}(\mathbf{k}) = \begin{bmatrix} \mathbf{H}_+ & 0 \\ 0 & \mathbf{H}_- \end{bmatrix}, \quad (5)$$

式中 $\mathbf{H}_{\pm} = \begin{bmatrix} -M + Bk^2 & A(k_x \pm ik_y) \\ A^*(k_x \pm ik_y) & M - Bk^2 \end{bmatrix}$ 是两个分块矩阵, 其中 $M = \frac{\varepsilon_d - \varepsilon_p}{2}$, A 来自一阶微扰项 M_{ij} 的非对角项, B 来自二阶微扰项的对角项, 且小于 0. (5) 式正好类似于建立在量子阱 CdTe/HgTe/CdTe 上的 Bernevig-Hughes-Zhang 模型^[33], 所以可以用下面公式计算系统的自旋陈数^[33-35]

$$C_{\pm} = \pm \frac{1}{2} [\text{sgn}(M) + \text{sgn}(B)]. \quad (6)$$

(6) 式的结果取决于 MB 的值. 如果 $MB < 0$, 对应拓扑平庸相; 如果 $MB > 0$, 对应拓扑非平庸相. 正常情况下, $\varepsilon_p < \varepsilon_d$, $M > 0$, $MB < 0$, $C_s = 0$, 对应拓扑平庸; 反转情况下, $\varepsilon_p > \varepsilon_d$, $M < 0$, $MB > 0$, $C_s = \pm 1$, 对应拓扑非平庸态. 图 4 中 C_+ 和 C_- 分别代表自旋反向的两个简并态的自旋陈数. 在本文研究的系统中, 通过散射体和基体材料的反转, 出现轨道的反转, 为实现光量子霍尔效应创造了条件. 当拓扑非平庸态结构与拓扑平庸态结构相接构成边界, 如果两个结构存在公共带隙, 在带隙里面就会形成类似量子电子霍尔效应的螺旋边界态.

4 赝自旋霍尔效应边界态的构建

4.1 超胞及边界态模式分析

在图 4 结构参数的基础上, 构建三明治结构的超胞, 如图 5(a) 所示. 中间 D 型结构层属拓扑非平庸相, 两边 A 型结构层属拓扑平庸相. 超胞产生的投影能带如图 5(b) 所示, 波矢扫描方向为 Γ -K 方向. 此带隙位置和图 4 公共带隙基本一致, 相对带隙宽度 $\Delta\omega/\omega_c = 13\%$. 与用晶胞缩放产生的带隙宽度相比较, 具有明显的优势. 例如, 从文献^[19] 估算出相对带隙宽度 $\Delta\omega/\omega_c = 6.3\%$. 在文献^[28] 中, 形成边界态的两个光子晶体的公共带隙频率从 7.40 GHz 到 7.56 GHz, 相对带隙宽度为 2.14%.

文献 [36] 是通过晶胞中心介质柱半径的变化产生赝自旋边界态, 其频率带隙更小, 大约为 $0.00021c/a$. 较大的带隙宽度能保证边界态有较好的局域性, 提高边界态的传输性能. 图 5(b) 带隙中的两条粗(红)线属于边界态色散曲线, 上面两点 A 和 B 对应 $k_x = \pm 0.1(2\pi/a)$. 值得注意的是, 曲线上每一点

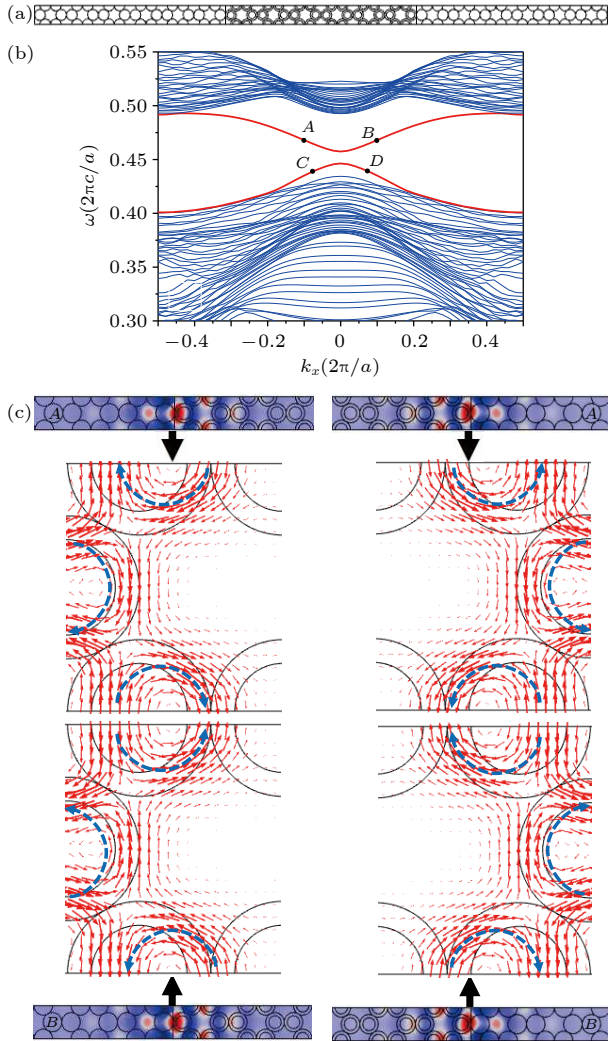


图 5 边界态的构建与分析 (a) 超胞; (b) 超胞的带结构; (c) 模式分析; 图 (c) 给出图 (b) 边界态 A 和 B 两点在拓扑非平庸层(中间层)左、右两侧边界激发的模场 E_z 和边界靠非平庸层一侧的能流矢量, 它们分别对应不同旋转方向的赝自旋, 分别用旋转箭头表示; 由于边界处能流矢量比涡旋处能流矢量大很多, 为了看清矢量旋转方向, 将矢量图的位置向非平庸层方向进行了适当的偏离

Fig. 5. Construction and analysis of the edge states: (a) Supercell; (b) bands of the supercell; (c) mode analysis. The mode field E_z of the energy flow vectors of points A and B in (c) reveal the pseudo spins at the two edges of the middle non-trivial layer in (a). Because the energy flow vectors at the edge are much larger than those in the vortex, we move the vector plots to the non-trivial layer for a proper distance.

对应二重简并, 是受时间反转对称保护的赝自旋顺时针和赝自旋逆时针的两个态, 分别属于 D 型结构层左右不同的边界. 在图 5(c) 中, 画出了点 A 和 B 对应的模场 E_z 的分布以及界面处的能流密度矢量, 左侧图形对应超胞左边界, 右侧图形对应超胞右边界. 可以看出, 模场完全局域在两种结构的界面处. 从放大的能流矢量可以看出, 能流矢量涡旋不在边界, 而是偏向非平庸层一侧. 从能流的旋转方向看, 点 A 在拓扑非平庸层的左边界是顺时针赝自旋, 右边界是逆时针赝自旋; 点 B 相反, 在拓扑非平庸层的左边界是逆时针赝自旋, 右边界是顺时针赝自旋. 对下面的带也可作同样的分析, 不过在同一波矢处, 上下带模式点的赝自旋方向正好相反. 这样在每个边界上(不管是左侧边界还是右侧边界), 都存在 2 个边界态, 每个边界态对应一个特定的赝自旋, 且方向被锁定, 因此, 这种边界态是手性的. 由于受时间反转对称的保护, 在同一边界, 两个相反赝自旋的边界态彼此正交, 因此后向的散射被禁止, 边界态具有拓扑保护的性能.

4.2 拓扑边界态传输

上述拓扑边界态的性质可以通过 Comsol 软件电磁波频域模拟来验证. 构建图 6 两种结构的边界模型, 上半空间是拓扑非平庸结构, 下半空间是拓扑平庸结构, 对应图 5 超胞右侧边界, 四周为散射边界条件. 在边界中间设置赝自旋源(白色六角星), 频率分别为 $0.476(2\pi c/a)$ 和 $0.437(2\pi c/a)$, 分别位于图 5(b) 中 AB 和 CD 所在的位置, 记录归一化电场 E_z 幅度的分布. 根据图 5(c) 右边界模场的自旋方向, 在图 6(a) 中, 逆时针自旋源只能激发模式 A , 边界态被锁向 $-k$ 方向 (A 点群速度为负), 向左传输; 在图 6(b) 中, 顺时针自旋源只能激发模式 B , 边界态被锁向 $+k$ 方向 (群速度为正), 向右传输. 在图 6(c) 中, 赝自旋源方向与图 6(a) 相同, 激发模式 D , 边界态也是向左传输; 在图 6(d) 中, 赝自旋源方向与图 6(b) 相同, 激发模式 C , 边界态向右传输. 插图显示介质柱内能流的旋转方向, 与赝自旋源方向一致, 证明传播方向与自旋方向锁定的关系. 因此在同一边界看自旋方向, 模式 A 和 D 、模式 B 和 C 同向; 而模式 A 和 B 、模式 C 和 D 反向. 从能流矢量和场的分布可以看出, 此处边界态具有较强的局域性, 电场幅度向边界两侧延伸很少, 这也是该结构拓扑边界态的优越性.

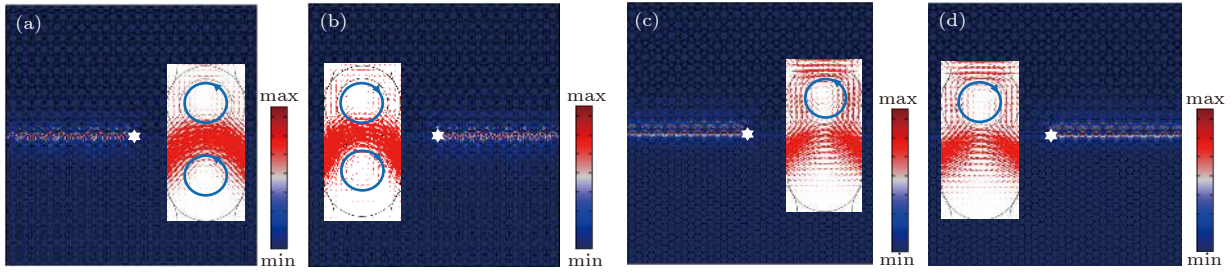


图 6 赝自旋源(白色六角星)激发的电磁波边界态传输 (a) 频率位置为 AB , 逆时针自旋; (b) 频率位置为 AB , 顺时针自旋; (c) 频率位置为 CD , 逆时针自旋; (d) 频率位置为 CD , 顺时针自旋

Fig. 6. Edge state transmission of electromagnetic wave excited by pseudospin source (white hexagon star): (a) Frequency position at AB and counterclockwise spin; (b) frequency position at AB and clockwise spin; (c) frequency position at CD and counterclockwise spin; (d) frequency position at CD and clockwise spin.

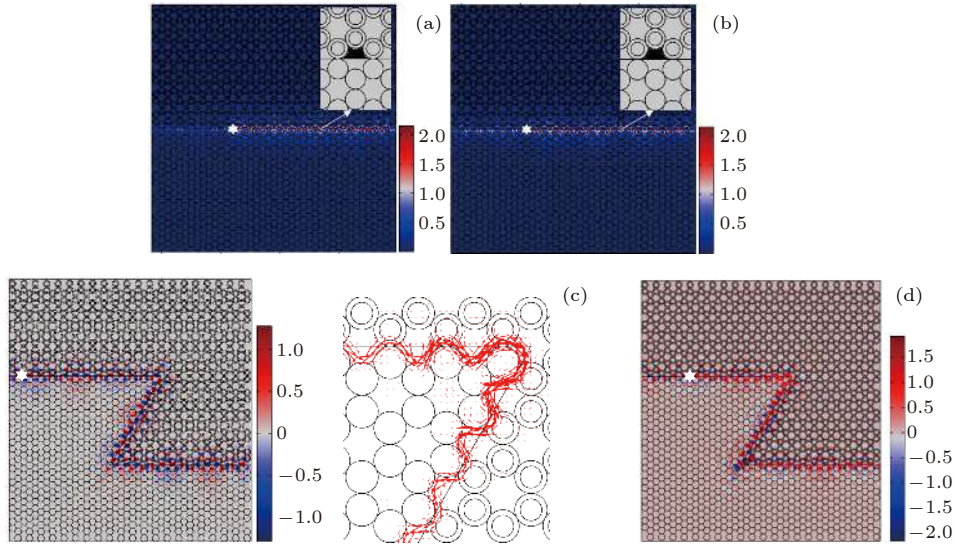


图 7 拓扑边界态鲁棒性的验证, 白色六角星为赝自旋源位置 (a) 电场 E_z 幅度的分布, 障碍物(插图黑色区域)介电常数 2.25; (b) 电场 E_z 幅度的分布, 障碍物介电常数 11.7; (c) 边界态沿 z 型路线传输 E_z 场的分布, 插图为局部放大的能流矢量分布; (d) 边界态沿 z 型路线传输的能流矢量和 E_z 场的分布, 和图 (c) 比较, 源向右移动 3 个晶格常数距离

Fig. 7. Robust of the topological boundary states and the pseudo-spin source position represented by white hexagonal star: (a) The distribution of the E_z field amplitude with the obstacle (the black area in the illustration) permittivity 2.25; (b) the distribution of the E_z field amplitude with the obstacle permittivity 11.7; (c) the distribution of the E_z field from the edge state transmission along the z -type route (the inset shows a locally amplified Poynting vector distribution); (d) the distribution of the E_z field and the energy flow vectors from the edge state transmission along the z -type route with the source moved $3a$ to the right.

下面验证拓扑边界态抗干扰的鲁棒特性. 二维介质柱阵列和介质板打孔结构的异质结构在制作上容易在界面上形成缺陷, 这些缺陷会产生逆向散射, 对传输造成不利的影响, 其影响程度可以检验拓扑边界态鲁棒性的大小. 在图 6(b) 的边界上设置结构缺陷, 如图 7(a) 和图 7(b) 插图所示, 在本为空气的区域(黑色)设置成介质构成缺陷. 当缺陷介电常数分别为 2.25 和 11.7 时, 传输结果如图 7(a) 和图 7(b) 所示. 当缺陷介电常数与空气相近时, 传输结果几乎没有变化. 但是当缺陷介电常数与空气相差较大时, 在逆方向上出现一定的反

射, 这种逆反射说明自旋对传输方向的锁定并不是完全的, 也说明了本文结构的局限性. 这种不完全性来源于图 5(b) 中边界态曲线并没有完全关闭带隙. 接着把边界设置成 z 型, 如图 7(c) 和图 7(d) 所示. 在边界上设置角频率为 $0.4746(2\pi c/a)$ 顺时针的自旋源(白色六角星). 对一般的 z 型波导, 电磁波在弯曲处会遇到强烈的散射而无法传输, 但是对于现在的拓扑边界态波导, 源设在边界左侧, 电磁波完全绕过拐角, 几乎没有损耗地沿着波导传输, 图 7(c) 显示电场 E_z 的传输结果, 右边插图显示局部拐角处能流矢量的分布情况. 可以看出, 整个电

磁波能量完全局域在边界, 通过拐角时几乎没有散射和能量的损耗, 达到理想的传输. 进一步把源沿边界向右移动 3 个晶格常数距离, 其他条件不变, 场图和能流矢量如图 7(d) 所示. 除逆向有少量的反射外, 电磁波基本向右传输.

5 结 论

本文不仅发现了三角晶格体系具有双重简并形成的 p 轨道和 d 轨道, 还发现了能通过散射体和基体的反转直接实现能带的反转和拓扑相变. 这里没有了同类型结构实现能带反转需要经历带隙打开到关闭再到重新打开的过程, 这样在模型的设计上给我们提供了更多的自由度, 在优化结构后还获得了局域性非常好的边界态模式. 构建了基于上述拓扑相优化后的边界结构, 电磁波模拟仿真的结果验证了该结构的边界态具有量子自旋霍尔效应特有的单向自旋锁定和拓扑保护的. 研究为光量子自旋霍尔效应体系的设计提供了新的方向.

参考文献

- [1] Hasan M Z, Kane C L 2010 *Rev. Mod. Phys.* **82** 3045
- [2] Qi X L, Zhang S C 2011 *Rev. Mod. Phys.* **83** 1057
- [3] Thouless D J, Kohmoto M, Nightingale M P, den Nijs M 1982 *Phys. Rev. Lett.* **49** 405
- [4] Haldane F D M 1988 *Phys. Rev. Lett.* **61** 2015
- [5] Kane C L, Mele E J 2005 *Phys. Rev. Lett.* **95** 146802
- [6] Sheng L, Sheng D N, Ting C S, Haldane F D M 2005 *Phys. Rev. Lett.* **95** 136602
- [7] Wang Z, Chong Y D, Joannopoulos J D, et al. 2009 *Nature* **461** 772
- [8] Wang Z, Chong Y D, Soljačić M 2008 *Phys. Rev. Lett.* **100** 013905
- [9] Fang Y T, He H Q, Hu J X, Wen Z 2016 *Phys. Rev. A* **91** 033827
- [10] Fang Y T, He H Q, Hu J X 2016 *IEEE J. Sel. Top. Quant.* **22** 4901109
- [11] Lu L, Joannopoulos J D, Soljačić M 2014 *Nat. Photonics* **8** 821
- [12] Sun X C, He C, Lu M H, Chen Y F 2017 *Acta Phys. Sin.* **66** 224203 (in Chinese) [孙晓晨, 何程, 卢明辉, 陈延峰 2017 物理学报 **66** 224203]
- [13] Wang H F, Xie B Y, Zhan P, Lu M H, Chen Y F 2019 *Acta Phys. Sin.* **68** 224206 (in Chinese) [王洪飞, 解碧野, 詹鹏, 卢明辉, 陈延峰 2019 物理学报 **68** 224206]
- [14] Skirlo S A, Lu L, Soljačić M 2014 *Phys. Rev. Lett.* **113** 113904
- [15] Khanikaev A B, Mousavi S H, Tse W K, Kargarian M, MacDonald A H, Shvets G 2013 *Nat. Mater.* **12** 233
- [16] He C, Sun X C, Liu X P, Lu M H, Chen Y, Feng L, Chen Y F 2016 *Proc. Natl. Acad. Sci. USA* **113** 4924
- [17] Guo Z W, Jiang H T, Long Y, Yu K, Ren J, Xue C H, Chen H 2017 *Sci. Rep.* **7** 7742
- [18] Bisharat D J, Sievenpiper D F 2019 *Laser Photonics Rev.* **13** 1900126
- [19] Wu L H, Hu X 2015 *Phys. Rev. Lett.* **114** 223901
- [20] Li Y, Sun Y, Zhu W W, Guo Z W, Jiang J, Kariyado T, Chen H, Hu X 2018 *Nat. Commun.* **9** 4598
- [21] Huang X Q, Yang Y T, Hang Z H, Zhang Z Q, Chan C T 2016 *Phys. Rev. B* **93** 085415
- [22] Xu L, Wang H X, Xu Y D, Chen H Y, Jiang J H 2016 *Opt. Express* **24** 18059
- [23] Mei J, Chen Z G, Wu Y 2016 *Sci. Rep.* **6** 32752
- [24] Gao Y F, Jiang Z and Zhang L L, et al. 2018 *J. Appl. Phys.* **124** 213107
- [25] Wang J, Wu S Q, Mei J 2017 *Acta Phys. Sin.* **66** 224301 (in Chinese) [王键, 吴世巧, 梅军 2017 物理学报 **66** 224301]
- [26] Jia D, Ge Y, Yuan S Q, Sun H X 2019 *Acta Phys. Sin.* **68** 224301 (in Chinese) [贾鼎, 葛勇, 袁寿其, 孙宏祥 2019 物理学报 **68** 224301]
- [27] Xia B Z, Fan H Y, Liu T T 2019 *Int. J. Mech. Sci.* **155** 197
- [28] Yang Y T, Xu Y F, Xu T, Wang H X, Jiang J H, Hu X, Hang Z H 2018 *Phys. Rev. Lett.* **120** 217401
- [29] Yang Y H, Sun H X, Xia J P, Xue H R, Guo Z, Ge Y, Jia D, Yuan S Q, Chong Y D, Zhang B L 2019 *Nat. Phys.* **15** 645
- [30] John D J, Steven G J, Robert D M 2008 *Photonic Crystals Molding the Flow of Light* (2nd Ed.) (Princeton: Princeton University Press) pp46–49
- [31] Wen X S, Wen J H, Yu D L, Wang G, Liu Y Z, Han X Y 2009 *Phononic Crystals* (Beijing: National Defense Industry Press) p8 (in Chinese) [温熙森, 温激鸿, 郁殿龙, 王刚, 刘耀宗, 韩小云 2009 声子晶体 (北京: 国防工业出版社) 第8页]
- [32] Lemoult F, Kaina N, Fink M, Lerosey 2013 *Nat. Phys.* **9** 55
- [33] Bernevig B A, Hughes T L, Zhang S C 2006 *Science* **314** 1757
- [34] Xia J P, Jia D, Sun H X, Yuan S Q, Ge Y, Si Q R, Liu X J 2018 *Adv. Mater.* **30** 1805002
- [35] Jiang Z, Gao Y F, He L, Sun J P, Song H, Wang Q 2019 *Phys. Chem. Chem. Phys.* **21** 11367
- [36] Ji C Y, Liu G B, Zhang Y Y, Zou B S, Yao Y G 2019 *Phys. Rev. A* **99** 043801

Topological phase transition based on structure reversal of two-dimensional photonic crystals and construction of topological edge states*

Fang Yun-Tuan[†] Wang Zhang-Xin Fan Er-Pan
Li Xiao-Xue Wang Hong-Jin

(School of Computer Science and Telecommunication Engineering, Jiangsu University, Zhenjiang 212013, China)

(Received 19 March 2020; revised manuscript received 9 May 2020)

Abstract

Two kinds of two-dimensional photonic crystal with hexagonal honeycomb lattices are constructed in which the scatterer and the matrix materials are reversed. Due to the symmetry of special point group, the lattices have p and d orbitals in the center of Brillouin region, which are similar to those in the electronic system. With the structure reversal, the p and d orbitals are also directly inverted. Quantitative analysis shows that the orbital inversion is due to the inversion of air band and medium band because of the local resonance effect in the low frequency bands. Based on the parity properties of p and d orbitals, the pseudo spin states are constructed by analogy to the quantum spin Hall effect in electronic systems. The analysis of the effective Hamiltonian at Γ point shows that the topological phase transition caused by orbital inversion is revealed. The pseudo spin edge states construct an optimal structure. The electromagnetic wave simulations and energy flow vector analysis show that the structure edge takes on the properties of quantum spin Hall effect, namely, the propagation direction is locked by the spin direction and the propagation is topologically protected. The results also show that the quantum spin Hall effect can be realized without undergoing the closing of gap. The comparison among similar researches indicates that the realization of the pseudo spin states does not need the deformation of lattice, and the structure proposed in this work possesses the characteristics of simple design, wide band gap and strong edge localization.

Keywords: photonic crystal, structure reversal, band reversal, topology transition, pseudospin

PACS: 41.20.Jb, 03.65.Vf, 42.25.Gy

DOI: 10.7498/aps.69.20200415

* Project supported by the Open Fund of Jiangsu Key Laboratory of Security Tech. for Industrial Cyberspace, China (Grant No. STICB201906).

[†] Corresponding author. E-mail: fang_yt1965@sina.com