

二维介电光子晶体中的赝自旋态与拓扑相变*

王彦兰 李妍†

(曲阜师范大学物理工程学院, 曲阜 273165)

(2019年12月24日收到; 2020年1月15日收到修改稿)

基于背散射抑制且对缺陷免疫的传输性质, 光子拓扑绝缘体为电磁传输调控提供了一种新颖的思路. 类比电子体系中的量子自旋霍尔效应, 本文设计出一种简单的二维介电光子晶体, 以实现自旋依赖的光子拓扑边界态. 该光子晶体是正三角环形硅柱子在空气中排列而成的蜂窝结构. 将硅柱子绕各自中心旋转 60° , 可实现二重简并的偶极子态和四极子态之间的能带翻转. 这两对二重简并态的平均能流密度围绕原胞中心的手性可充当赝自旋自由度, 其点群对称性可用于构建时间反演对称. 根据 $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ 微扰理论, 给出了布里渊区中心附近的有效哈密顿量以及对应的自旋陈数, 由此证实能带翻转的实质是拓扑相变. 数值计算结果揭示, 在拓扑非平庸和平庸的光子晶体分界面上可实现单向传输且对弯曲、空穴等缺陷免疫的拓扑边界态. 本文中的光子晶体只由电介质材料组成并且晶格结构简单, 实现拓扑相变时无需改变柱子的填充率或位置, 只需转动一个角度. 因此, 这种结构在拓扑边界态的应用中更为有效.

关键词: 光子晶体, 能带翻转, 拓扑相变, 赝自旋

PACS: 42.70.Qs, 03.65.Vf, 81.05.Xj, 78.67.Pt

DOI: 10.7498/aps.69.20191962

1 引言

量子霍尔效应 (quantum Hall effect, QHE)^[1,2] 的发现开启了凝聚态物理以拓扑相和拓扑相变作为核心概念的新篇章. 在拓扑性不同的系统分界面上, 存在受体拓扑性保护且对缺陷免疫的单向传输量子态, 这在自旋电子、量子计算等领域有着广泛的应用前景^[3-6]. 但是, 到目前为止, 已被证实具有非平庸拓扑性的电子系统是非常有限的, 而且大部分电子系统的拓扑性质都需要非常低的温度, 这阻碍了人们对拓扑态的研究和应用. 与凝聚态物理中的电子体系相比, 光子晶体、声子晶体等人工周期性结构在晶格结构设计、缺陷调控等方面具有更高的自由度, 这对拓扑现象的研究与应用非常有利. 在过去十几年中, 基于拓扑能带论的拓扑光子学研究^[7-28] 和拓扑声子学研究^[29-34] 不断发展. 2008年,

受电子系统中 QHE 的启发, Haldane 和 Raghu^[7] 从理论上指出, 在时间反演对称性 (time-reversal symmetry, TRS) 破缺的电磁波系统中可实现单向传输的手性边界态. 随后, Wang 等^[8,9] 在二维磁性光子晶体中利用材料的旋磁特性进行相关研究, 构建出陈数不为零的拓扑绝缘体, 从实验上证实了手性边界态的存在. Skirlo 等^[10,11] 在铁磁光子晶体中, 通过同时打破线性 Dirac 简并点和非线性简并点而获得陈数大于 1 的拓扑绝缘体以及相应的多重单向传输态. 上述基于 QHE 的光子拓扑边界态在光学耦合腔^[12]、磁性光子晶体板^[13] 等不同系统中也先后被实现. 但是, 自然界中具有磁光响应特性的材料稀少并且磁光响应需要较强的磁场, 这给光子 QHE 的实现带来较大困难. 而受拓扑保护的电磁波传输若具有 TRS, 则更有利于应用到半导体等技术中. 为此, 人们类比电子体系中的量子自旋霍尔效应 (quantum spin Hall effect, QSHE), 开

* 山东省自然科学基金青年科学基金 (批准号: ZR2016AQ09) 和国家自然科学基金青年科学基金 (批准号: 11704219) 资助的课题.

† 通信作者. E-mail: liyanQFNU@163.com

始致力于实现光子 QSHE 的研究, 以获得受 TRS 保护的螺旋边界态 [14–17,23–26]. 众所周知, 在自旋为 $1/2$ 的电子系统中存在受 TRS 保护的 Kramers 简并, 即能量的二重简并态, 它由自旋向上态和自旋向下态组成. 源于电子内禀自旋的 Kramers 简并对于螺旋边界态的实现至关重要 [3–6], 但光子是玻色子, 不具有这种独特的内禀属性. 近年来, 诸多研究将赝自旋作为光子内禀自由度, 采用不同的方法构建光子 Kramers 对, 以实现自旋依赖的光子拓扑边界态 [14–17]. 例如, 在电磁耦合超材料中利用横向电场 (transverse electric, TE) 与横向磁场 (transverse magnetic, TM) 偏振自由度构建赝自旋态 [14,15], 在压电-压磁超晶格光子晶体中利用左旋圆偏振与右旋圆偏振模拟电子自旋 [16], 在环形谐振腔所组成的周期性耦合阵列体系中通过控制电磁波在谐振腔中的传播方向来获得光子自旋 [17] 等. 与凝聚态物理中的 Floquet 拓扑绝缘体类似, 通过在光子哈密顿量中引入时间调制或等效于时间的调制, 也可以获得独特的拓扑特性, 这类光 Floquet 拓扑绝缘体已在光学谐振腔耦合阵列 [18]、螺旋形波导阵列 [19] 等体系中相继被实现. 研究表明, 在三维光子晶体系统中也可实现三维光子 QHE、三维光子 QSHE 等, 从而获得三维 \mathbf{k} 空间中的非平庸带隙以及相应的二维拓扑界面态 [20–22].

如文献 [14–17] 所述, 对于光子 QSHE 的实现, 无论是利用电磁波的偏振自由度还是利用电磁波在谐振腔中的耦合, 往往都需要双各向异性或者具有电磁耦合等特殊性质的材料, 并且晶格结构相对复杂. 最近几年的研究表明, 通过晶格对称性的调控, 只用普通的介电材料即可在光子晶体中实现自旋依赖的拓扑边界态 [23–26]. 这种方案最早由 Wu 和 Hu [23] 在 2015 年提出. 他们在由传统介电材料组成的蜂窝状光子晶体结构变形为三角晶格结构的过程中, 实现了带隙从打开到关闭再到打开的拓扑相变, 这种拓扑相变与二重简并的偶极子态和四极子态 (也被称为 p 态和 d 态) 在布里渊区中心的能带翻转有关. 基于晶格对称性构建赝自旋态的这一物理思想不仅适用于布里渊区中心, 而且在布里渊区边界的角点处也适用, 这极大地促进了光子谷量子霍尔效应 [27,28] 的研究与应用.

在利用布里渊区中心 Γ 点的两对二重简并态来构建光子赝自旋时, 大多数研究讨论的是 TM 模式, 并且需要改变散射体的填充率或者改变

散射体在原胞中的位置, 才能实现拓扑相变. 与之不同, 本文设计了一种蜂窝状光子晶体结构, 只需旋转散射体, 即可实现 TE 模式的拓扑相变以及赝自旋依赖的拓扑边界态. 首先, 介绍两种具有 C_{6v} 对称性的蜂窝状光子晶体结构, 分别称为 P 型和 N 型光子晶体, 并计算出对应的能带结构. 结果显示, 在散射体旋转前后, Γ 点的两对二重简并态, 即 p 态和 d 态, 发生能带翻转. 然后, 分析 p 态和 d 态的对称性, 构建出赝时间反演对称算符和赝自旋态. 利用 $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ 方法, 以赝自旋态为一组完备基, 获得了 Γ 点附近的有效哈密顿量, 并由此计算出两种晶体的自旋陈数. 结果证实 p 态和 d 态的能带翻转实质上是一种拓扑相变. 最后, 通过数值模拟证实, 在 P 型和 N 型光子晶体分界面上存在背散射抑制且对缺陷免疫的拓扑边界态.

2 光子晶体中的能带翻转与拓扑相变

2.1 光子晶体系统

如图 1(a) 所示, 将两个正三角环硅柱子组成一个“人工原子”(图 1(a) 中用紫色标记), 让“人工原子”在空气中按三角晶格结构排列, 每一个硅柱子中心均位于六角蜂窝结构的格点上, 并且其朝向与晶格点阵的高对称方向重合. 因此, 整体上构造出与石墨烯晶格结构 [35] 类似的六角蜂窝状光子晶体. 在这里, 取晶格常数为 a , 硅柱子相对空气的介电常数和磁导率分别为 $\epsilon_r = 12$ 和 $\mu_r = 1$, 其横截面上内外正三角形顶点到中心的距离分别为 $r_1 = 0.2a/\sqrt{3}$ 和 $r_2 = 0.45a/\sqrt{3}$, 相邻硅柱子中心的相对距离为 $L = a/\sqrt{3}$. 将图 1(a) 中所有硅柱子绕各自中心转动 60° 后, 得到另一种蜂窝结构的光子晶体, 如图 1(b) 所示, 对应的“人工原子”在图中用橙色标记.

将图 1(a) 和图 1(b) 所示结构分别称为 P 型和 N 型光子晶体. 在这两种光子晶体中, 所有硅柱子的朝向都与六角蜂窝晶格点阵的高对称方向一致, 这使得整个晶体结构具有 C_{6v} 对称性. 根据群论, 这两种晶体在布里渊区中心上的任意一个本征态均对应 C_{6v} 点群中的一个不可约表示, 其中有两个二维不可约表示, 分别称为 E_1 和 E_2 不可约表示. E_1 表示对应的本征态对于 x 轴和 y 轴的镜像操作具有相反的宇称, 而 E_2 表示对应的本征态对于 x 轴和 y 轴的镜像操作具有相同的宇称. 换言之,

E_1 和 E_2 表示对应的本征态在空间反演操作下分别具有奇宇称和偶宇称对称性. 此外, 这两个二维不可约表示所对应的本征态都是二重简并的. 基于上述性质, 可以由 E_1 和 E_2 表示所对应的本征态构建出两对二重简并的赝自旋态, 并由 C_{6v} 中的基本操作组合出一个反么正算符 T_s , 满足 $T_s^2 = -1$. T_s 与电子体系中的 TRS 相似, 保证了光子体系中的 Kramers 简并, 对应的具有赝自旋的光子可类比为自旋为 1/2 的费米子. 但是需要指出的是, 光子是玻色子, 其“费米子”特性与所设计的蜂窝结构对称性息息相关.

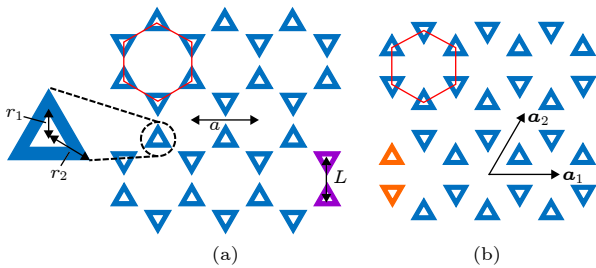


图 1 二维光子晶体的蜂窝结构示意图 (a) 由两个正三角环形硅柱子所组成的“人工原子”(图中用紫色标记) 在空气中排列而成的三角晶格结构; (b) 与 (a) 相同, 但组成“人工原子”的两个硅柱子绕各自中心转动 60° (图中用橙色标记). a 为晶格常数, \mathbf{a}_1 和 \mathbf{a}_2 为晶格基矢, 硅柱的相对介电常数 $\epsilon_r = 12$ 和相对磁导率 $\mu_r = 1$, 内外正三角形的顶点到硅柱中心的距离分别为 $r_1 = 0.2a/\sqrt{3}$ 和 $r_2 = 0.45a/\sqrt{3}$, 相邻硅柱中心的相对距离为 $L = a/\sqrt{3}$, 红色正六边形所标记的区域表示三角晶格的原胞

Fig. 1. Schematics of the honeycomb structure of two-dimensional photonic crystals: (a) Triangular lattice structure of “artificial atoms” composed by two equilateral-triangle-ring-shaped silicon rods, which are labeled by purple in the figure, embedded in an air host; (b) the same as panel (a), except that the silicon rods are rotated by 60° around their respective centers, the corresponding “artificial atom” is labeled by orange in the figure. \mathbf{a}_1 and \mathbf{a}_2 are unit vectors with length a as the lattice constant. The relative permittivity and permeability of silicon rods are $\epsilon_r = 12$ and $\mu_r = 1$, respectively. The distance from the vertices of the inner and outer equilateral triangles to the center of the silicon rod are $r_1 = 0.2a/\sqrt{3}$ and $r_2 = 0.45a/\sqrt{3}$, respectively. The distance between the centers of the neighboring silicon rods is $L = a/\sqrt{3}$. Red hexagons represent the unit cells of the triangular lattices.

2.2 能带翻转与拓扑相变

考虑二维光子晶体中的 TE 模式, 即磁场平行于硅柱子的轴向, 只有 z 分量 H_z , 而电场在平面

内, 具有 x 分量 E_x 和 y 分量 E_y 的情形. 由 Maxwell 方程组可知, H_z 满足以下波动方程:

$$\nabla \cdot \left[\frac{1}{\epsilon_r(\mathbf{r})} \nabla H_z \right] = -\frac{\omega^2}{c^2} \mu_r(\mathbf{r}) H_z, \quad (1)$$

其中 $\epsilon_r(\mathbf{r}) = \epsilon(\mathbf{r})/\epsilon_0$ 和 $\mu_r(\mathbf{r}) = \mu(\mathbf{r})/\mu_0$ 分别表示相对介电常数和相对磁导率, $c = 1/\sqrt{\epsilon_0\mu_0}$ 是真空或空气中的光速. 与电子晶体类似, 二维光子晶体具有周期性, 波动方程 (1) 的解应满足布洛赫定理, 即

$$\Psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}, \quad (2)$$

其中 $u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ 是与晶格结构具有相同周期性的周期性函数. 上述布洛赫函数所对应的本征频率 $\omega_{n\mathbf{k}}$ 与布洛赫波矢 \mathbf{k} 之间的关系即为色散关系, 又称为光子晶体的能带结构. 布洛赫函数 $\Psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ 满足的正交关系为

$$\langle \Psi_{l\mathbf{k}} | \mu_r | \Psi_{j\mathbf{k}} \rangle = \frac{(2\pi)^2}{\Omega} \int \Psi_{l\mathbf{k}}^*(\mathbf{r}) \mu_r(\mathbf{r}) \Psi_{j\mathbf{k}}(\mathbf{r}) d\mathbf{r} = \delta_{lj}, \quad (3)$$

其中 Ω 表示原胞面积, 积分遍及整个原胞; δ_{lj} 是克罗内克函数.

求解波动方程的方法有很多, 可以利用一种基于有限元方法的商业软件 COMSOL Multiphysics 求波动方程的解, 从而得到光子晶体的本征态和能带结构. 图 2(a) 和图 2(b) 分别给出 P 型和 N 型光子晶体的能带结构. 由图 2 可知, 在 Γ 点有两个二重简并点, 对应本征态的磁场分布如插图所示. 显然, 其中一对二重简并态是两个偶极子态, 而另一对二重简并态则是两个四极子态. 偶极子态和四极子态相伴出现, 并且二者与电子系统中的 p, d 轨道对称性是相同的, 因此可将偶极子态和四极子态分别称为 p 态和 d 态. 两个简并的 p 态关于 x 轴和 y 轴的镜像操作有相反的宇称, 而两个简并的 d 态关于 x 轴和 y 轴的镜像操作有相同的宇称. 这与前面对晶格对称性的分析相一致, p 态对应二维不可约表示 E_1 , d 态对应二维不可约表示 E_2 . 将 p 态中关于 x 轴和 y 轴分别具有偶宇称和奇宇称对称性的本征态记为 p_x 态, 另一个记为 p_y 态; 将 d 态中关于 x 轴和 y 轴同时具有偶宇称对称性的本征态记为 $d_{x^2-y^2}$ 态, 另一个记为 d_{xy} 态.

虽然 P 型和 N 型光子晶体在 Γ 点都出现 p 态和 d 态, 但两种本征态的相对位置不同. 在 P 型光子晶体中, p 态的频率低于 d 态的频率; 但在 N 型光子晶体中, p 态的频率高于 d 态的频率. 这说明通过旋转散射体可实现能带翻转, 而能带翻转前后

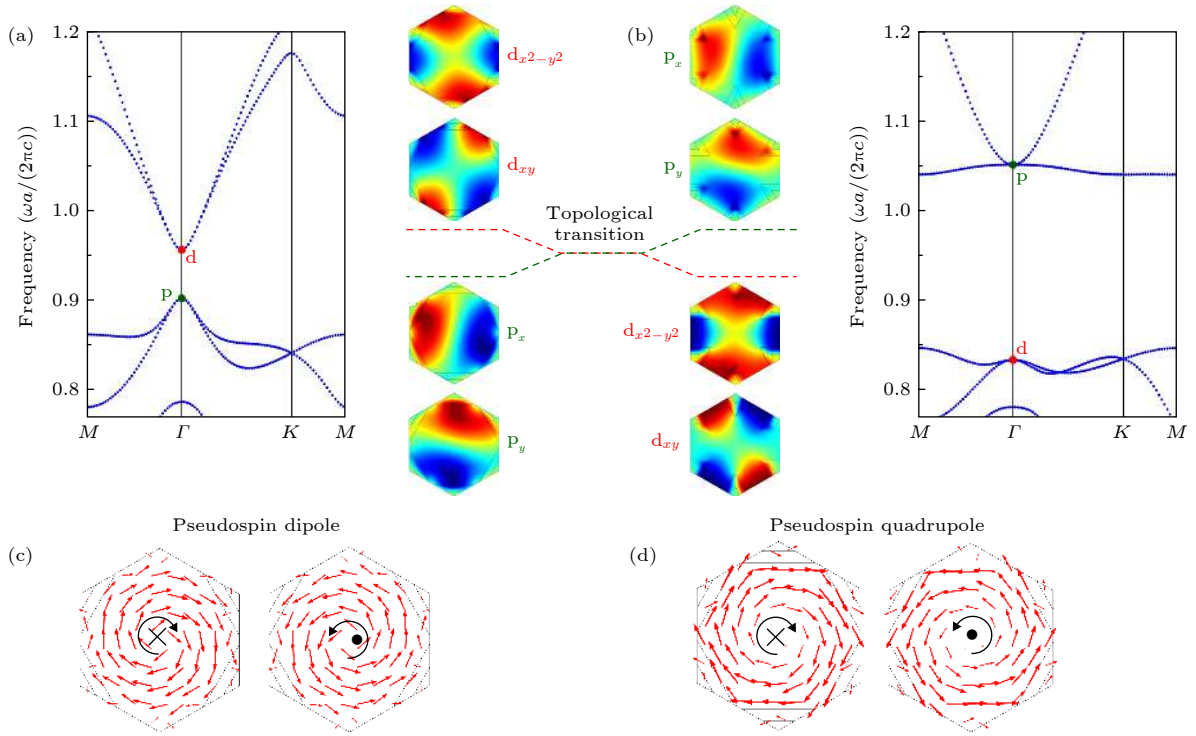


图2 能带结构与不可约表示 E_1 和 E_2 所对应的本征态 (a) P型光子晶体的带结构; (b) N型光子晶体的带结构. (a), (b) 中的插图给出 Γ 点的二重简并偶极子态 (图中标记为 p_x/p_y) 和二重简并四极子态 (图中标记为 $d_{x^2-y^2}/d_{xy}$) 的磁场分布, 深红色和深蓝色分别表示磁场 H_z 的正负最大值, 旋转硅柱子后发生了能带翻转; (c) P型光子晶体中偶极子态的平均能流密度分布; (d) P型光子晶体中四极子态的平均能流密度分布, 箭头显示能流密度的大小和方向. 在原胞中心附近, 能流密度具有逆时针和顺时针圆偏振特性, 反映出赝自旋向上和赝自旋向下的取向性

Fig. 2. Band structures and the eigenstates for E_1 and E_2 irreducible representations: (a) Band structure of P-type photonic crystal; (b) band structure of N-type photonic crystal, the insets of (a) and (b) show the magnetic field distributions of the twofold degenerated dipolar state (marked as p_x/p_y) and the twofold degenerated quadrupolar state (marked as $d_{x^2-y^2}/d_{xy}$) at Γ point, and the positive and negative maxima of the magnetic field, H_z , are represented by dark red and dark blue, respectively, band inversion takes place under the rotation of the silicon rods; (c) real-space distributions of the time-averaged Poynting vector for the dipolar states in P-type photonic crystal; (d) real-space distributions of the time-averaged Poynting vector for quadrupolar states in P-type photonic crystal; the arrows show the direction and magnitude of the Poynting vector, whose anticlockwise/clockwise circular polarization around the unit cell center reveals the pseudospin-up/pseudospin-down orientation.

所对应带隙的拓扑性不同. 能带翻转前, p态和d态之间的带隙是拓扑平庸的; 而能带翻转后, 二者之间的带隙是拓扑非平庸的. 换言之, 将光子晶体由P型变为N型时发生了拓扑相变, 后面的讨论将进一步验证这一结论. 这里需要注意的是, 两种晶体的能带结构除了发生能带翻转以外, 还具有共同的完全带隙, 这为实现拓扑边界态提供了非常有利的条件.

3 赝时间反演对称性与赝自旋态

在图1所示的系统中, 除了Maxwell方程所反映的TRS以外, 还隐藏着与晶体 C_{6v} 对称性相关的赝时间反演对称性. 根据群论, 三角晶格中二维不可约表示 E_1 和 E_2 的基函数分别为 (x, y) 和

$(x^2 - y^2, 2xy)$, 它们与 $(p_x, p_y), (d_{x^2-y^2}, d_{xy})$ 态具有相同的对称性^[23]. 以 (x, y) 为基函数, 转动 θ 角所对应的矩阵表示为

$$D_{E_1} = \begin{pmatrix} \cos \theta & -\sin \theta \\ \sin \theta & \cos \theta \end{pmatrix}. \quad (4)$$

定义一个幺正算符

$$U = \frac{1}{\sqrt{3}} [D_{E_1}(C_6) + D_{E_1}(C_6^2)] = -i\sigma_y, \quad (5)$$

其中 σ_y 是泡利矩阵. 以 $(x^2 - y^2, 2xy)$ 为基函数, 转动 θ 角所对应的矩阵表示为

$$D_{E_2} = \begin{pmatrix} \cos^2 \theta - \sin^2 \theta & -2 \cos \theta \sin \theta \\ 2 \cos \theta \sin \theta & \cos^2 \theta - \sin^2 \theta \end{pmatrix}. \quad (6)$$

对应算符 $U = [D_{E_2}(C_6) - D_{E_2}(C_6^2)]/\sqrt{3} = -i\sigma_y$.

U 与复共轭算符 K 可以组成一个反么正算符 T_s , 即

$$T_s = UK. \quad (7)$$

可以验证

$$T_s^2 \begin{pmatrix} p_x \\ p_y \end{pmatrix} = T_s \begin{pmatrix} -p_y \\ p_x \end{pmatrix} = - \begin{pmatrix} p_x \\ p_y \end{pmatrix}, \quad (8)$$

$$T_s^2 \begin{pmatrix} d_{x^2-y^2} \\ d_{xy} \end{pmatrix} = T_s \begin{pmatrix} -d_{xy} \\ d_{x^2-y^2} \end{pmatrix} = - \begin{pmatrix} d_{x^2-y^2} \\ d_{xy} \end{pmatrix}. \quad (9)$$

由上述分析可知, 在所设计的光子晶体系统中, 对于 E_1 和 E_2 模式均有 $T_s^2 = -1$. 这与电子系统中 TRS 的性质是相同的, 保证了晶体在 Γ 点出现 Kramers 简并. 因此, 称 (7) 式所定义的算符 T_s 为赝时间反演算符, 晶体对称性在构建赝时间反演对称性时起到很关键的作用.

在 P 型和 N 型光子晶体中, 定义赝自旋态为

$$\begin{aligned} p_{\pm} &= (p_x \pm ip_y)/\sqrt{2}, \\ d_{\pm} &= (d_{x^2-y^2} \pm id_{xy})/\sqrt{2}. \end{aligned} \quad (10)$$

以 (p_+, p_-) 为基函数的表象与以 (p_x, p_y) 为基函数的表象之间的么正变换矩阵为

$$S = \begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} & 1/\sqrt{2} \\ i/\sqrt{2} & -i/\sqrt{2} \end{pmatrix}. \quad (11)$$

因此, 以 (p_x, p_y) 为基函数时, (5) 式所定义的算符相应地变为

$$U' = S^+ U S = \begin{pmatrix} -i & 0 \\ 0 & i \end{pmatrix}. \quad (12)$$

对应的赝时间反演算符为 $T'_s = U' K$, 并且

$$T_s'^2 p_{\pm} = \mp i p_{\pm}, \quad T_s'^2 d_{\pm} = -d_{\pm}. \quad (13)$$

由 (13) 式可知, 波函数 (p_+, p_-) 是两个对应不可约表示 E_1 的赝自旋态, 在赝时间反演操作下, 赝自旋向上的 p_+ 态变为赝自旋向下的 p_- 态, 反之亦然. 显然, 对于 (d_+, d_-) 有相同的结论, 二者分别表示与不可约表示 E_2 对应的赝自旋向上和赝自旋向下的态.

为观察 p 态和 d 态的赝自旋性, 计算出两种本征态的能流密度时间平均值 $\langle S \rangle = \text{Re}[\mathbf{E} \times \mathbf{H}^*]/2$.

图 2(c) 和图 2(d) 分别给出 P 型光子晶体中赝自旋偶极子态和赝自旋四极子态的平均能流密度分布. 在原胞中心附近, 平均能流密度呈逆时针圆偏振或顺时针圆偏振分布, 即显示出左旋手性或右旋手性, 对应赝自旋向上或赝自旋向下.

4 有效哈密顿量与自旋陈数

为理解图 2 所示的两种晶体带隙的拓扑性质, 下面根据 $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ 微扰理论^[23,36,37] 得到 Γ 点附近的有效哈密顿量, 并计算出对应的自旋陈数. 设 Γ 点的四个本征态为 Γ_{α} ($\alpha = 1, 2, 3, 4$): $\Gamma_1 = p_x$, $\Gamma_2 = p_y$, $\Gamma_3 = d_{x^2-y^2}$, $\Gamma_4 = d_{xy}$. 由 $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ 微扰理论可知, 在 Γ 点附近, 任意 \mathbf{k} 点的本征态 $\Psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ 均可展开为 Γ_{α} ($\alpha = 1, 2, 3, 4$) 态的线性组合, 即

$$\Psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \sum_{\alpha} A_{n\alpha}(\mathbf{k}) e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \Gamma_{\alpha}(\mathbf{r}). \quad (14)$$

将 (14) 式代入 (1) 式, 并利用基函数 Γ_{α} 的正交关系可得 Γ 点附近的有效哈密顿量为

$$\mathbf{H}_{mn}^{\text{eff}} = \mathbf{H}'_{mn} + \sum_{\alpha} \frac{\mathbf{H}'_{m\alpha} \mathbf{H}'_{\alpha n}}{\varepsilon_m^{(0)} - \varepsilon_{\alpha}^{(0)}} \quad (m, n = 1, 2, 3, 4), \quad (15)$$

其中 $\varepsilon_{1,2}^{(0)} = \varepsilon_p^{(0)}$ 和 $\varepsilon_{3,4}^{(0)} = \varepsilon_d^{(0)}$ 分别表示 $\Gamma_{1,2}$ 和 $\Gamma_{3,4}$ 的本征频率, \mathbf{H}' 表示 $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ 微扰项, 并且

$$\mathbf{H}' = \frac{2i}{\varepsilon_r} \mathbf{k} \cdot \nabla + i\mathbf{k} \cdot \nabla \frac{1}{\varepsilon_r} - \frac{k^2}{\varepsilon_r}, \quad (16)$$

$$\begin{aligned} \mathbf{H}'_{mn} &= \langle \Gamma_m | \mathbf{H}' | \Gamma_n \rangle \\ &= \langle \Gamma_m | \frac{2i}{\varepsilon_r} \mathbf{k} \cdot \nabla + i\mathbf{k} \cdot \nabla \frac{1}{\varepsilon_r} - \frac{k^2}{\varepsilon_r} | \Gamma_n \rangle \\ &= \frac{(2\pi)^2}{W} \int \Gamma_m^*(\mathbf{r}) \frac{2i}{\varepsilon_r(\mathbf{r})} \mathbf{k} \cdot [\nabla \Gamma_n(\mathbf{r})] d\mathbf{r} \\ &\quad + \frac{(2\pi)^2}{\Omega} \int \Gamma_m^*(\mathbf{r}) \left(i\mathbf{k} \cdot \nabla \frac{1}{\varepsilon_r(\mathbf{r})} \right) \Gamma_n(\mathbf{r}) d\mathbf{r} \\ &\quad - \frac{(2\pi)^2}{\Omega} \int \Gamma_m^*(\mathbf{r}) \frac{k^2}{\varepsilon_r(\mathbf{r})} \Gamma_n(\mathbf{r}) d\mathbf{r}, \end{aligned} \quad (17)$$

当以 (p_+, d_+, p_-, d_-) 为一组完备基时, Γ 点附近的有效哈密顿量为

$$\mathbf{H}^{\text{eff}}(\mathbf{k}) = \begin{pmatrix} M - Bk^2 & Ak_+ & 0 & 0 \\ A^*k_- & -M + Bk^2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & M - Bk^2 & Ak_- \\ 0 & 0 & A^*k_+ & -M + Bk^2 \end{pmatrix}. \quad (18)$$

其中 $k_{\pm} = k_x \pm ik_y$; $M = (\epsilon_d^0 - \epsilon_p^0)/2$ 表示 d 态和 p 态在 Γ 点的频率差; A 源于一阶微扰 $\mathbf{H}'_{mn} = \langle \Gamma_m | \mathbf{H}' | \Gamma_n \rangle$ 的非对角元项, 即 $m = 1, 2$ 且 $n = 3, 4$; B 由二阶微扰 $\mathbf{H}'_{m\alpha} \mathbf{H}'_{\alpha n}$ 的对角元项决定.

方程 (18) 所描述的有效哈密顿量与 Bernevig-Hughes-Zhang 模型中描述 CdTe/HgTe/CdTe 量子阱系统的有效哈密顿量形式类似, 由此可知, 所设计的光子系统会因能带翻转而出现光子的 QSHE. 为进一步验证这一结论, 需要计算出两种带隙所对应的自旋陈数^[4,23,38]. 由方程 (18) 得自旋陈数为

$$C_{\pm} = \pm \frac{1}{2} [\text{sgn}(M) + \text{sgn}(B)]. \quad (19)$$

对于图 2(a) 中所示的 P 型光子晶体, $M > 0$, $B < 0$, 因此 $C_{\pm} = 0$, 这说明对应的带隙是拓扑平庸的; 对于图 2(b) 中的 N 型光子晶体, $M < 0$, $B < 0$, 因此 $C_{\pm} = \pm 1$, 对应的带隙是拓扑非平庸的. 由此可见, 通过旋转散射体, 基于能带翻转可实现由平庸态到非平庸态的拓扑相变.

5 赝自旋依赖的拓扑边界态

5.1 超原胞与拓扑边界态

由前面的分析可知, 在 P 型和 N 型光子晶体分界面上会出现自旋依赖的拓扑边界态. 为证实拓扑边界态的存在, 计算出由拓扑非平庸和拓扑平庸光子晶体所构成的超原胞的投影带结构, 结果如图 3(b) 所示. 在投影带结构中, 除了两种晶体的体态 (图 3 中用黑点标注) 以外, 在共同带隙中还存在着非体态 (图 3 中用红点标注). 计算红点所对应的本征场分布后发现, 它们的磁场主要局域在两种晶体的分界面上, 在晶体内部会迅速衰减. 这说明图 3(b) 中红点表示边界态的色散关系. 需要注意的是, 边界态的色散关系在 Γ 点有微小的带隙, 这是因为 C_{6v} 对称性在两种晶体的分界面上受到一定程度的破坏, 但这并不影响对应结构的拓扑性质. 在图 3(b) 中取两点 C 和 D , 即 $k_{//} = \pm 0.02 \times \pi/a$, 所对应的磁场和平均能流密度在超原胞下分界面

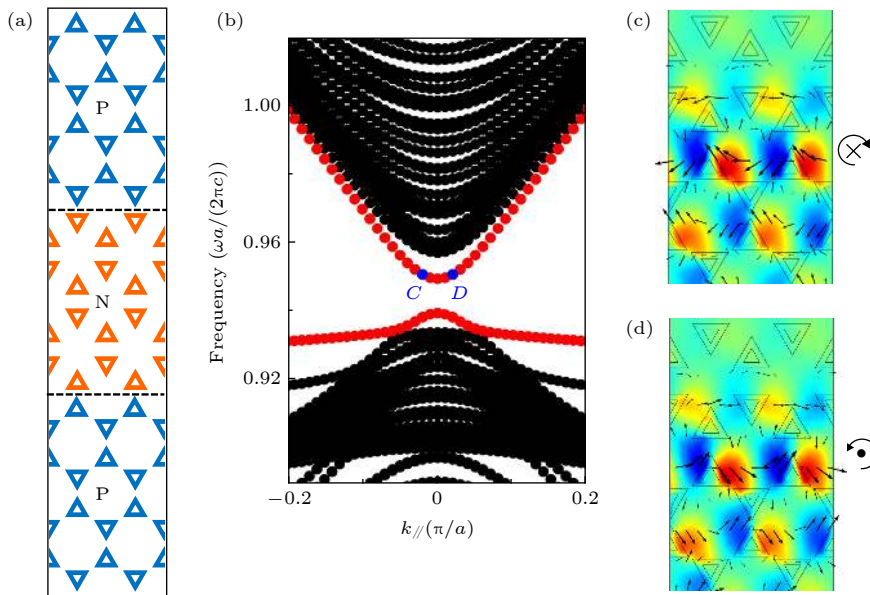


图 3 投影带结构与拓扑边界态 (a) 由拓扑非平庸和拓扑平庸光子晶体所组成的条带形的超原胞结构示意图; (b) 超原胞沿 ΓK 方向的投影带结构, 条带形的超原胞中间有 20 个非平庸原胞, 其两端各有 10 个平庸原胞, 红点和黑点分别表示边界态和体态; (c) C 点所对应的磁场和平均能流密度在超原胞的下分界面上的分布; (d) 与图 (c) 相同, 但对应的是图 (b) 中的 D 点; 红色和蓝色分别代表磁场 H_z 的正负最大值, 箭头显示能流的大小和方向

Fig. 3. Project band structure and topological edge states: (a) Schematic of a ribbon-shaped supercell composed of topologically nontrivial crystal with its two edges clad by topologically trivial crystals; (b) dispersion relation along ΓK direction for the ribbon-shaped supercell, the ribbon has 20 nontrivial unit cells in the middle and 10 trivial unit cells on both sides, the red and black dots display the edge and bulk states, respectively; (c) distribution of the magnetic field and time-averaged Poynting vector around the lower interface of the supercell, corresponding to point C indicated in panel (b); (d) the same as panel (c), but corresponding to the point D indicated in panel (b); the positive and negative maxima of the magnetic field, H_z , are represented by dark red and dark blue, respectively, and the arrows show the direction and magnitude of the Poynting vector.

上的分布如图 3(c) 和图 3(d) 所示. 显然, C 和 D 两点的平均能流密度分别呈逆时针和顺时针分布, 这与赝自旋向上态和赝自旋向下态的手性特征相符合. 根据边界态的手性可知, 在图 3(a) 所示体系的上边界上同时存在两种边界态: 向右传输的赝自旋向下态和向左传输的赝自旋向上态; 在下边界上也同时存在两种边界态: 向左传输的赝自旋向下态和向右传输的赝自旋向上态.

5.2 拓扑边界态的单向传输性

将蜂窝状晶格结构沿不同方向裁剪, 可以得到两种典型的边界, 即 zigzag 型和 armchair 型^[35]. 因此, 将 P 型和 N 型光子晶体放在一起会形成两种典型的分界面: zigzag 型分界面和 armchair 型分界面 (图 4). 在这两种典型分界面上都会出现单向传输且对缺陷免疫的拓扑边界态.

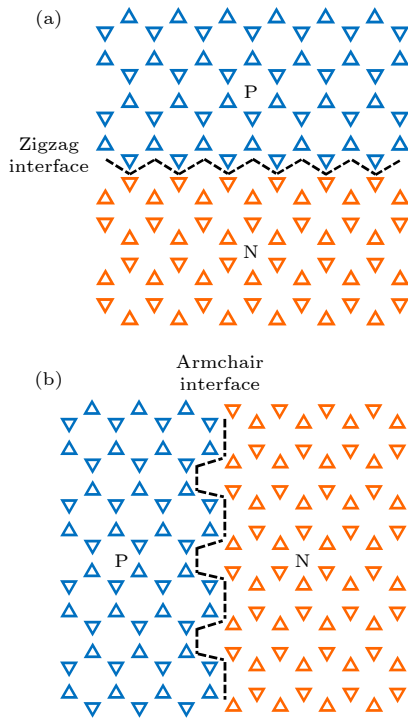


图 4 P 型和 N 型光子晶体的两种典型分界面 (a) zigzag 型分界面; (b) armchair 型分界面

Fig. 4. Two typical interfaces between P-type and N-type photonic crystals: (a) Zigzag interface; (b) armchair interface.

为了在拓扑性不同的晶体分界面上激发单一赝自旋的拓扑边界态, 采用由八个天线所组成的手性类点源. 如图 5(a) 所示, 这八个天线均匀分布于半径 $R \approx 0.03a$ 的圆上, 并且相邻天线间的相位差为 $\pi/4$. 当八个天线的相位逆时针减小时, 它们在

空气中所激发的磁场分布如图 5(b) 所示, 对应的手性类点源可激发赝自旋向上的拓扑边界态; 当八个天线的相位顺时针减小时, 它们在空气中所激发的磁场分布如图 5(c) 所示, 对应的手性类点源可激发赝自旋向下的拓扑边界态. 在图 5(d) 中, 将相

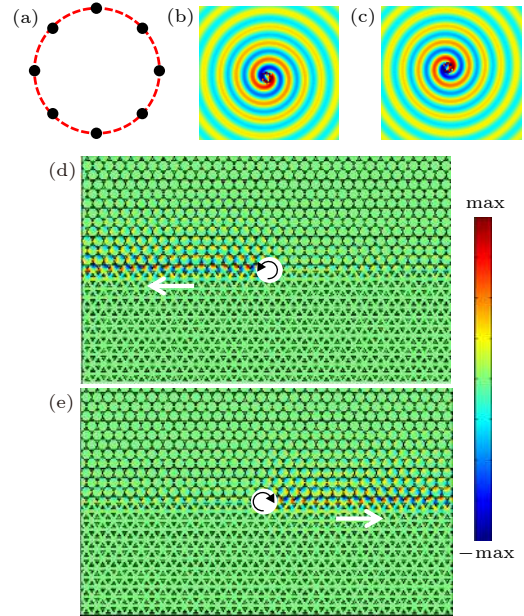


图 5 赝自旋依赖的边界态沿 zigzag 型分界面的单向传输 (a) 由 8 个天线所组成的手性类点源示意图, 相邻天线的相位差为 $\pi/4$; (b) 相位逆时针减小的手性类点源在空气中所激发的磁场分布; (c) 相位顺时针减小的手性类点源在空气中所激发的磁场分布; (d) 由 (b) 图中的源所激发的电磁波沿 zigzag 型分界面向左单向传输; (e) 由 (c) 图中的源所激发的电磁波沿 zigzag 型分界面向右单向传输. (d), (e) 图所示结构的四周围围着完美匹配层; 手性类点源频率为 $f \approx 0.95c/a$, 白色圆标记源的位置, 其中的黑色箭头表示源的相位减小方向; 水平方向的白色箭头表示边界态的传播方向

Fig. 5. Unidirectional propagation of the pseudospin-dependent edge states localized at the zigzag interface: (a) Schematic of a point-like chiral source made by an eight-antenna array with phase delay of $\pi/4$ one by one; (b) magnetic field distribution stimulated by the point-like chiral source with an anticlockwise phase delay in the air; (c) magnetic field distribution stimulated by the point-like chiral source with a clockwise phase delay in the air; (d) leftward unidirectional electromagnetic wave propagation excited by the source in panel (b) along the zigzag interface; (e) rightward unidirectional electromagnetic wave propagation excited by the source in panel (c) along the zigzag interface. The structures in panel (d) and (e) are surrounded by the perfectly matched layers; the point-like chiral sources are marked as white circles with operating frequency $f \approx 0.95c/a$, and their phase delay directions are represented by black arrows; the white arrows along the horizontal direction indicate the propagation directions of the edge states.

位逆时针减小的手性类点源置于 zigzag 型分界面中部, 激发频率 $f \approx 0.95c/a$. 显然, 此类点源所激发的电磁波在两种晶体内部迅速衰减, 这是由激发频率位于两种晶体的共同带隙之中所导致的. 在晶体分界面上, 此类点源只能激发赝自旋向上的边界态, 因此电磁波只能向左传输, 而向右传输的电磁波几乎为零. 与之相反, 将相位顺时针减小的手性类点源置于 zigzag 型分界面中部时, 电磁场只能向右传输, 对应赝自旋向下的拓扑边界态 (图 5(e)). 图 6 给出 armchair 型分界面上的边界态. 由图 6 可知, 相位逆时针减小的手性类点源所激发的电磁波只能向下传输, 而相位顺时针减小的手性类点源所激发的电磁波只能向上传输. 上述数值模拟结果表明, 在所设计的两种光子晶体分界面上, 可以出现赝自旋依赖的单向传输拓扑边界态.

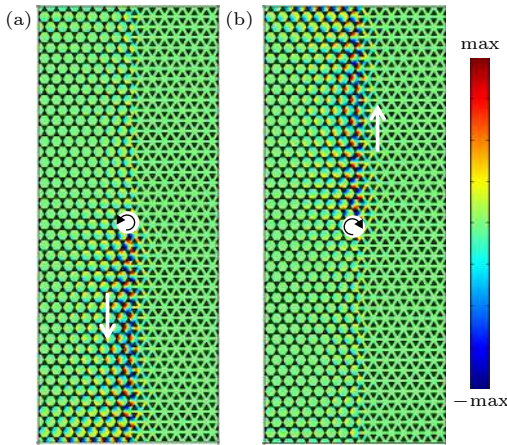


图 6 赝自旋依赖的边界态沿 armchair 型分界面的单向传输 (a) 相位逆时针减小的手性类点源所激发的电磁波沿 armchair 型分界面向下单向传输; (b) 相位顺时针减小的手性类点源所激发的电磁波沿 armchair 型分界面向上单向传输; 图中结构的四周包围着完美匹配层; 手性类点源频率为 $f \approx 0.95c/a$, 白色圆标记源的位置, 其中的黑色箭头表示源的相位减小方向; 竖直方向的白色箭头表示边界态的传输方向

Fig. 6. Unidirectional propagation of the pseudospin-dependent edge states localized at the armchair interface: (a) Downward unidirectional electromagnetic wave propagation excited by the point-like chiral source with an anticlockwise phase delay along the armchair interface; (b) upward unidirectional electromagnetic wave propagation excited by the point-like chiral source with a clockwise phase delay along the armchair interface. The structures are surrounded by the perfectly matched layers. The point-like chiral sources are marked as white circles with operating frequency $f \approx 0.95c/a$, and their phase delay directions are represented by black arrows. The white arrows along the vertical direction indicate the propagation directions of the edge states.

5.3 拓扑边界态的鲁棒性

拓扑边界态的一个重要特性是鲁棒性, 即拓扑边界态对缺陷免疫. 为验证利用设计的光子系统所实现的拓扑边界态具有鲁棒性, 将 P 型和 N 型光子晶体拼接到一起, 形成含有四处 90° 弯曲的分界面 (图 7(a)). 频率 $f \approx 0.95c/a$ 的平面电磁波从体系的左侧入射, 结果显示边界态几乎没有反射地向前传输, 即使分界面上有四处 90° 的弯曲. 在图 7(b) 中, 将两个硅柱子从分界面上移走, 同样让平面电磁波从左侧入射, 可以发现边界态几乎不受这种空穴缺陷的影响, 仍然可以无反射地向前传输. 由此可知, 在 P 型和 N 型光子晶体的分界面上, 拓扑边界态对弯曲、空穴等缺陷免疫, 具有很好的鲁棒性.

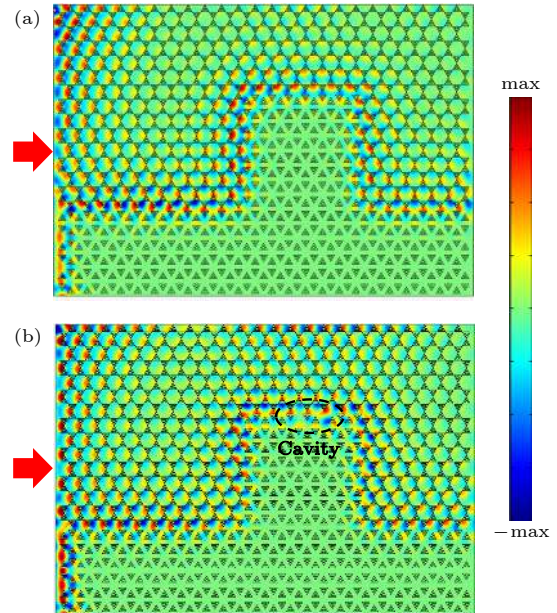


图 7 拓扑边界态的鲁棒性 (a) 频率 $f \approx 0.95c/a$ 的平面波入射到由 P 型和 N 型光子晶体组成的系统中所激发的磁场分布; (b) 与 (a) 图相同, 但在分界面上引入空穴缺陷 (图中用椭圆形标出). 图中结构的四周包围着完美匹配层, 红色箭头表示入射方向, 拓扑边界态对分界面上的弯曲、空穴等缺陷免疫

Fig. 7. Robustness of the topological edge states against defects: (a) Magnetic field distribution under the excitation of a plane wave with operating frequency $f \approx 0.95c/a$ in the system consisting of P-type and N-type photonic crystals; (b) the same as panel (a), except that a cavity defect (displayed by ellipse) is introduced into the interface. The structures are surrounded by the perfectly matched layers. Red arrows represent the incident directions. The topological edge states are immune to various defects including sharp bend and cavity at the interface.

6 结 论

将正三角环形硅柱子在空气中排列成蜂窝结构, 通过旋转散射体在 Γ 点实现了二重简并 p 态和二重简并 d 态之间的能带翻转. 利用 p 态和 d 态的 C_{6v} 点群对称性, 构建出该光子体系中的赝时间反演对称性, 并获得赝自旋向上态和赝自旋向下态. 赝时间反演对称性与晶体对称性息息相关, 它与电子体系中真实的时间反演对称性类似, 满足 $T_S^2 = -1$, 正是这种赝时间反演对称性保证了对应光子体系中的 Kramers 简并. 基于晶体对称性的赝自旋态可用来实现光子体系中的 QSHE. 采用 $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ 方法, 获得 Γ 点附近的有效哈密顿量, 由此计算出两种光子晶体的自旋陈数, 对应结果阐释了能带翻转与拓扑相变之间的内在关系. 数值模拟结果表明, 在所设计的拓扑性不同的光子晶体分界面上, 可以实现自旋依赖的单向传输边界态, 并且边界态具有很好的鲁棒性, 对弯曲、空穴等缺陷免疫. 所设计的光子晶体结构简单, 并且只需要传统的电介质材料, 没有内在的焦耳热损耗, 在拓扑边界态的实际应用中具有较大的优势.

参考文献

- [1] Klitzing K V, Dorda G, Pepper M 1980 *Phys. Rev. Lett.* **45** 494
- [2] König M, Wiedmann S, Brüne C, Roth A, Buhmann H, Molenkamp L W, Qi X L, Zhang S C 2007 *Science* **318** 766
- [3] Kane C L, Mele E J 2005 *Phys. Rev. Lett.* **95** 226801
- [4] Bernevig B A, Hughes T L, Zhang S C 2006 *Science* **314** 1757
- [5] Hasan M Z, Kane C L 2010 *Rev. Mod. Phys.* **82** 3045
- [6] Qi X L, Zhang S C 2011 *Rev. Mod. Phys.* **83** 1057
- [7] Haldane F D, Raghu S 2008 *Phys. Rev. Lett.* **100** 013904
- [8] Wang Z, Chong Y D, Joannopoulos J D, Soljačić M 2008 *Phys. Rev. Lett.* **100** 013905
- [9] Wang Z, Chong Y, Joannopoulos J D, Soljačić M 2009 *Nature* **461** 772
- [10] Skirlo S A, Lu L, Igarashi Y, Yan Q, Joannopoulos J, Soljačić M 2015 *Phys. Rev. Lett.* **115** 253901
- [11] Skirlo S A, Lu L, Soljačić M 2014 *Phys. Rev. Lett.* **113** 113904
- [12] Minkov M, Savona V 2016 *Optica* **3** 200
- [13] Liu K, Shen L, He S 2012 *Opt. Lett.* **37** 4110
- [14] Khanikaev A B, Mousavi S H, Tse W K, Kargarian M, MacDonald A H, Shvets G 2013 *Nat. Mater.* **12** 233
- [15] Chen W J, Jiang S J, Chen X D, Zhu B, Zhou L, Dong J W, Chan C T 2014 *Nat. Commun.* **5** 5782
- [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] Hafezi M, Demler E A, Lukin M D, Taylor J M 2011 *Nat. Phys.* **7** 907
- [18] Fang K, Yu Z, Fan S 2012 *Nat. Photonics* **6** 782
- [19] Rechtsman M C, Zeuner J M, Plotnik Y, Lumer Y, Podolsky D, Dreisow F, Nolte S, Segev M, Szameit A 2013 *Nature* **496** 196
- [20] Lu L, Gao H, Wang Z 2018 *Nat. Commun.* **9** 5384
- [21] Lu L, Fang C, Fu L, Johnson S G, Joannopoulos J D, Soljačić M 2016 *Nat. Phys.* **12** 337
- [22] Yang Y, Gao Z, Xue H, Zhang L, He M, Yang Z, Singh R, Chong Y, Zhang B, Chen H 2019 *Nature* **565** 622
- [23] Wu L H, Hu X 2015 *Phys. Rev. Lett.* **114** 223901
- [24] Yang Y, Xu Y F, Xu T, Wang H X, Jiang J H, Hu X, Hang Z H 2018 *Phys. Rev. Lett.* **120** 217401
- [25] Zhu X, Wang H X, Xu C, Lai Y, Jiang J H, John S 2018 *Phys. Rev. B* **97** 085148
- [26] Chen Z G, Mei J, Sun X C, Zhang X, Zhao J, Wu Y 2017 *Phys. Rev. A* **95** 043827
- [27] Chen X D, Deng W M, Lu J C, Dong J W 2018 *Phys. Rev. B* **97** 184201
- [28] Kang Y, Ni X, Cheng X, Khanikaev A B, Genack A Z 2018 *Nat. Commun.* **9** 3029
- [29] Khanikaev A B, Fleury R, Mousavi S H, Alù A 2015 *Nat. Commun.* **6** 8260
- [30] Zhang Z, Tian Y, Cheng Y, Wei Q, Liu X, Christensen J 2018 *Phys. Rev. Appl.* **9** 034032
- [31] Wei Q, Tian Y, Zuo S Y, Cheng Y, Liu X J 2017 *Phys. Rev. B* **95** 094305
- [32] He H, Qiu C, Ye L, Cai X, Fan X, Ke M, Zhang F, Liu Z 2018 *Nature* **560** 61
- [33] Zhang Z, Tian Y, Cheng Y, Liu X, Christensen J 2017 *Phys. Rev. B* **96** 241306
- [34] Mei J, Chen Z, Wu Y 2016 *Sci. Rep.* **6** 32752
- [35] Neto A H C, Guinea F, Peres N M R, Novoselov K S, Geim A K 2009 *Rev. Mod. Phys.* **81** 109
- [36] Mei J, Wu Y, Chan C T, Zhang Z Q 2012 *Phys. Rev. B* **86** 035141
- [37] Li Y, Wu Y, Chen X, Mei J 2013 *Opt. Express* **21** 7699
- [38] Shen S Q, Shan W Y, Lu H Z 2011 *Spin* **1** 33

Pseudospin states and topological phase transitions in two-dimensional photonic crystals made of dielectric materials*

Wang Yan-Lan Li Yan[†]*(School of Physics and Physical Engineering, Qufu Normal University, Qufu 273165, China)*

(Received 24 December 2019; revised manuscript received 15 January 2020)

Abstract

Based on the transmission properties of against backscattering and robustness against defects, photonic topological insulators have opened up a novel way to steer the propagation of electromagnetic wave. In order to construct the photonic analogs of the quantum spin Hall effect in an electronic system, we propose a simple two-dimensional photonic crystal made of dielectric materials to realize topologically protected edge states associated with the photonic pseudospin. The photonic crystal comprises a honeycomb array of equilateral-triangle-ring-shaped silicon rods embedded in an air host. By simply rotating the silicon rods around their respective centers by 60° , the band inversion between a twofold degenerated dipolar mode and a twofold degenerated quadrupolar mode is clearly observed in the Brillouin zone center. For the double twofold degenerated states, the chirality of the time-averaged Poynting vector surrounding the unit cell center (i.e., right-hand or left-hand circular polarizations) plays the role of the pseudospin degree of freedom in the present photonic system, and their point group symmetry can be utilized to construct a pseudo-time-reversal symmetry. By utilizing $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ perturbation theory, we develop an effective Hamiltonian for the associated dispersion relation around the Brillouin zone center and calculate the spin Chern number, which indicates that the band inversion leads to a topological phase transition from a trivial to a nontrivial state. With numerical simulations, we unambiguously demonstrate that the unidirectional propagation of pseudospin-dependent edge state along the interface between a topologically nontrivial photonic crystal and a trivial one, and robustness of the edge states against different defects including sharp bend and cavity, regardless of the type of interface. The photonic system proposed by us consists of dielectric materials and the corresponding lattice structure is simple. And without changing the fill ratio or changing the positions of the silicon rods, a simple rotation of the silicon rods can generate the topological phase transition. So the potential applications of the pseudospin-dependent edge states based on our design are expected in more efficient way.

Keywords: photonic crystal, band inversion, topological phase transition, pseudospin**PACS:** 42.70.Qs, 03.65.Vf, 81.05.Xj, 78.67.Pt**DOI:** 10.7498/aps.69.20191962

* Project supported by the Young Scientists Fund of the Natural Science Foundation of Shandong Province, China (Grant No. ZR2016AQ09) and the Young Scientists Fund of the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 11704219).

[†] Corresponding author. E-mail: liyanQFNU@163.com