



南京大學
研究生畢業論文
(申請博士學位)

論文題目: 一維光子晶體中拓撲量及其
界面態的研究

作者: 王強

專業: 物理學

研究方向: 光電科學

指導教師: 劉輝 教授

2017 年 3 月 20 日

学 号：DG1422055

论文答辩日期：2017 年 月 日

指导教师：

(签字)

一维光子晶体中拓扑量及其界面态的研究

作者：王强

专业：物理学

导师：刘辉教授

南京大学物理学院

2017年6月

**Studies on the topological invariants and
interface states in one-dimensional photonic
crystals**

Author: Qiang Wang

Major: Physics

Supervisor: Prof. Hui Liu

Physics School of Nanjing University

June, 2017

南京大学学位论文原创性声明和使用授权说明

原创性声明

本人郑重声明：所呈交的学位论文，是本人在导师的指导下，独立进行研究工作所取得的成果。除文中已经注明引用的内容外，本论文不含任何其他个人或集体已经发表或撰写过的作品或成果。对本文的研究做出重要贡献的个人和集体，均已在文中以明确方式标明。本声明的法律结果由本人承担。

论文作者签名：_____ 日期：_____

学位论文使用授权说明

本人完全了解南京大学关于收集、保存、使用学位论文的规定，即：

按照学校要求提交学位论文的印刷本和电子版本；

学校有权保留学位论文的印刷本和电子版，并提供目录检索与阅览服务，在校园网上提供服务；

学校可以采用影印、缩印、数字化或其它复制手段保存论文；

根据《中华人民共和国学位条例暂行实施办法》，向国家图书馆报送可以公开的学位论文。

(保密论文在解密后遵守此规定)

论文作者签名：_____

导师签名：_____

日 期：_____

日 期：_____

一维光子晶体中拓扑量及其界面态的研究

南京大学研究生毕业论文中文摘要首页用纸

毕业论文题目： 一维光子晶体中拓扑量及其界面态的研究

物理学 专业 2014 级博士生姓名： 王强

指导教师（姓名、职称）： 刘辉教授

摘要

拓扑绝缘体和拓扑半金属等是凝聚态物理中非常热门的研究方向，其许多新奇的性质，包括单向传输，手征反常等，并在实际应用中具有很好的前景。最近，拓扑的概念也被引入到光子体系，来实现许多新奇的光学现象，例如光学量子霍尔效应，光学量子自旋霍尔效应，光学量子谷效应等。此外，光学拓扑半金属等也陆续在理论和实验中被发现。本论文的研究工作基于一维光子晶体体系，来探索其拓扑量以及界面态等性质。主要内容包括以下几个方面：

1、介绍了光学体系中的拓扑量，包括一维体系中的 Zak 相位，二维体系中的拓扑绝缘体（包括拓扑 Chern 绝缘体，拓扑 Z_2 绝缘体，拓扑晶体绝缘体），以及三维体系中的“拓扑半金属”（包括 Dirac 半金属，Weyl 半金属和 Nodal Line 半金属）。由拓扑量所保护的界面态具有许多新奇的性质，使得其具有广泛的应用前景。

2、从理论方面利用转移矩阵推导了一维光子晶体的色散方程以及本征函数。通过建立体块-边界联系，将一维光子晶体体块的 Zak 相位与其表面反射相位联系在一起。通过引入金属-光子晶体界面态，成功地实现了对一维光子晶体的拓扑量的测量。引入超构表面-光子晶体复合结构之后，可以对其界面态进行多维度调控。

3、研究一维光子晶体在三维广义空间中的拓扑性质。通过引入光子晶体几

一维光子晶体中拓扑量及其界面态的研究

何结构的两个维度, 结合其布洛赫动量维度构造了三维广义空间, 并观测到 Weyl 点。受 Weyl 点的保护, 光子晶体在参数空间的反射相位形成涡旋, 其“拓扑电荷”与 Weyl 点相同。由于相位涡旋的存在, 使得界面态的存在十分稳定。即无论反射衬底的性质, 均可以在参数空间构造出界面态。

4、研究了一维光子晶体在四维空间的拓扑性质。由于人造维度不受实空间的约束, 因此可以引入三个几何参数, 结合布洛赫动量维度构造四维广义空间。在该空间中, 可以观测到光子晶体的拓扑相变。而相变点对应的色散具有类似 Nodal Line 半金属的性质。通过理论计算, 可以证明在 Nodal line 色散条件下可以实现光子晶体的完美透射。

关键词: 光子晶体、拓扑量、界面态、超构表面

一维光子晶体中拓扑量及其界面态的研究

南京大学研究生毕业论文英文摘要首页用纸

THESIS: Studies on the topological invariants and interface states in one-dimensional photonic crystals

SPECIALIZATION: Physics

POSTGRADUATE: Qiang Wang

MENTOR: Prof. Hui Liu

Abstract

Topological insulators and topological semimetals are one of the hot topics in condense matter, the associated phenomenon, such as one-way robust transport, chiral anomaly and so on, have a grate application potential. Recently, the concept is also introduced into photonic systems, to realize some novel effects, including photonic quantum Hall effect, photonic quantum spin Hall effect, photonic valley Hall effect and so on. The Weyl points which defined in three dimensional space have also been proposed both in theories and experiments in last several years. In this thesis, we probe the topological invariants in one-dimensional photonic crystals. Furthermore, the interface states protected by topological invariants of photonic crystals have also been studied. The main content include:

1. A brief introduction is taken on the topological invariants in various photonic systems, including Zak phase in one-dimensional systems, the topological insulators in two-dimensional systems (topological Chern insulators, topological Z₂ insulators and topological crystalline insulators), and “topological semimetal” in three-dimensional systems (Dirac semimetals, Weyl semimetals and Nodal Line semimetals). The interface states, which were protected the topological invariants, have many novel phenomenon, and hence have great application potentials.

2. The dispersion and eigenfunction were deduced by transformation matrix. According to the bulk-edge correspondence, the reflection phase of the truncated photonic crystals was determined by the Zak phase of the photonic crystals. By introducing the interface states between metal films and photonic crystals, the Zak phases were measured in experiment. if replacing the metal films with metasurface, the interface states can be flexibly manipulated.
3. We studied the dispersion of one-dimensional photonic crystals in a generalized three-dimensional space. Combining two geometric parameters of the photonic crystals with the Bloch momentum, a three-dimensional space can be constructed, and the Weyl points were observed there. The reflection phase of the truncated photonic crystals exhibits vortex in parameter space, which is protected by the Weyl points, and carries the same charge as the Weyl points. The vortex of reflection phase guarantee the existence of interface states between photonic crystals and any arbitrary reflecting medium.
4. Topological phase transition has been observed in the one-dimensional photonic crystals in a four-dimensional space. Due to the dimension of a parameter space is not limited in three-dimensional, we introduce three geometric parameter, and construct a four-dimensional space together with the Bloch momentum. In the generalized space, the topological phase transition has been observed, while at the transition point, the dispersion behaves like the Nodal Line Semimetals in electric system. At these transition point, the photonic crystals will give a perfect transmission.

Key Words: Photonic crystal; Interface state; Topological invariant; Metasurface

一维光子晶体中拓扑量及其界面态的研究

目录

摘要.....	I
Abstract.....	III
第一章绪论.....	1
1.1 几何相位与 Berry 相位.....	1
1.2 一维光学体系中的 Zak 相位及其界面态.....	5
1.2.1 Zak 相位简介.....	5
1.2.2 一维体系中界面态.....	7
1.2.3 Zak 相位的测量.....	11
1.3 二维光学体系中的“拓扑绝缘体”.....	12
1.3.1 打破时间反演对称性的光学“拓扑 Chern 绝缘体”.....	12
1.3.2 时间反演对称性保护的“ Z_2 拓扑绝缘体”.....	17
1.3.3 拓扑晶体绝缘体.....	22
1.4 三维光学体系中的“拓扑半金属”.....	23
1.4.1 拓扑半金属.....	23
1.4.2 光学体系中的“拓扑半金属”.....	26
1.5 本论文研究思路和论文结构.....	29
参考文献.....	30
第二章 一维光子晶体中 Zak 相位的测量及其界面态.....	33
2.1 引言.....	33
2.2 一维光子晶体中的 Zak 相位及其反射相位.....	35
2.3 界面态实现一维光子晶体 Zak 相位的测量.....	45
2.4 超构表面对界面态的调控.....	48
2.5 本章小结.....	51
参考文献.....	52
第三章 参数空间的广义“外尔点”与“费米弧型界面态”.....	54
3.1 引言.....	54
3.2 一维光子晶体实现广义空间外尔点.....	56

一维光子晶体中拓扑量及其界面态的研究

3.3 一维光子晶体中广义外尔点及其禁带反射相位	63
3.3 外尔点反射相位的测量	68
3.4 广义空间中的“费米弧型界面态”	72
3.5 斜入射与外尔点	75
3.6 本章小结	78
参考文献.....	79
第四章 广义空间拓扑相变与“Nodal Line”相	81
4.1 引言	81
4.2 光子晶体色散的拓扑相变	82
4.3 广义空间中光子晶体的“Nodal Line”相	84
4.4 全透射与 Nodal Line 相	91
4.5 本章小结	94
参考文献.....	95
第五章 总结与展望.....	96
攻博期间发表论文.....	97
致谢.....	98

第一章绪论

1.1 几何相位与 Berry 相位

几何相位这个概念最早由 S Pancharatnam 在 1956 年提出[1]，但该工作当时并未引起人们的关注。直到 1984 年，Michael Berry 爵士再次提出了该概念[2]，因此几何相位也被称之为 Pancharatnam-Berry 相位，简称 Berry 相位。当考虑一个系统缓慢绝热地沿着参数空间的一个回路回到原点，将会获得除动力学相位之外的额外一个相位，该相位决定于系统哈密顿量所在参数空间的几何性质，因此我们用 Berry phase 来描述，并且可以应用在量子和经典的系统中。

我们先以傅科摆为例来解释 Berry 相位。考虑用线将一个重球搞搞悬挂，并且球被限制在平面内运动。由于重球受到的力只有重力和绳子的拉力（此处忽略重球与空气的摩擦力），因此没有额外的力使重球的摆动方向改变。如果考虑地球是

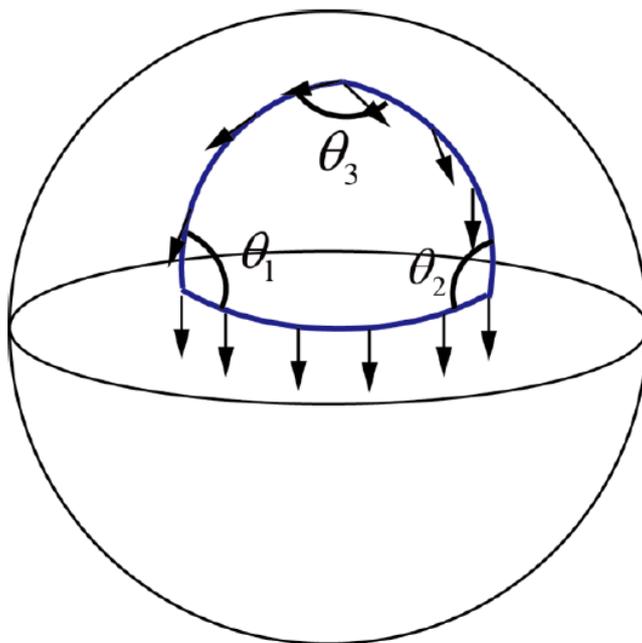


图 1.1 在球面上的三角形，其三条边均在球面的大圆上。其箭头表示球沿着三角形逆时针移动时的摆动方向。

一维光子晶体中拓扑量及其界面态的研究

平的，我们沿着直线缓慢移动绳子的上端，则球的摆动方向不会改变。但在球面上，则无法找到一条直线使得摆动方向不变，但是如果沿着球面的测地线或大圆移动，由于受到的力始终指向圆心，因此摆动方向可以保持不变。

如图 1.1 所示，我们在球面上选出一三角形，使得球摆从上顶点沿着这一回路逆时针移动回到原点。这三条边均落在球面的大圆上，三个顶角分别为 θ_1 ， θ_2 和 θ_3 。因为三条边均处在大圆上，因此球的摆动方向在这三条边上均保持不变，如图 1.1 中箭头所示。但经过顶点时，其摆动方向会改变，因此回到原点时，其方向改变为

$$\alpha = \theta_1 + \theta_2 + \theta_3 - \pi \quad (1.1)$$

在上述表达式中，我们忽略了 2π 。如果三角形在平面上，则 α 为 0；若三角形在球面上，则 α 值则为三角形所对应的立体角。

我们用钟摆的例子大致描述了几何相位的由来，现在我们回到严格的物理系统中，其哈密顿量用 $H(\mathbf{R})$ 表示，其中 $\mathbf{R} = (R_1, R_2, R_3, \dots)$ 代表其参数空间，并且 $R_i = R_i(t)$ ，即其为时间的函数。现在考虑让这个系统随着时间缓慢绝热演化，并且 $\mathbf{R}(t)$ 在参数空间沿着回路 C 而回到初始状态。由于演化过程极其缓慢，因此可以认为每个时间点上系统均达到稳态，因此

$$H(\mathbf{R})|n(\mathbf{R})\rangle = E_n(\mathbf{R})|n(\mathbf{R})\rangle \quad (1.2)$$

其中 $|n(\mathbf{R})\rangle$ 为相应的波函数。但是， $|n(\mathbf{R})\rangle$ 还有一个规范的自由度，因此 $e^{i\theta(t)}|n(\mathbf{R})\rangle$ 也是公式 1.2 的解，这里的 $\theta(t)$ 可以是与 \mathbf{R} 无关的一个相位，当然也可以是和 \mathbf{R} 相关，只要 $H(\mathbf{R})$ 与其互易。我们可以选取一个确定的相位来移除这个任意性，亦即选取一个规范。一般我们要求 $|n(\mathbf{R})\rangle$ 在整个回路 C 上是缓慢变化的，并且有唯一确定的取值。

现在我们考虑波函数从初态 $|n(\mathbf{R}(0))\rangle$ 沿着回路 C 绝热演化而累积的相位因子。

一维光子晶体中拓扑量及其界面态的研究

我们定义 $|\psi(t)\rangle = e^{-i\theta(t)} |n(\mathbf{R}(t))\rangle$ ，将其带入薛定谔方程，我们可以得到：

$$\mathbf{H}(\mathbf{R}(t))|\psi(t)\rangle = i\hbar \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle \quad (1.3)$$

将公式 1.2 带入可以得到

$$E_n(\mathbf{R}(t))|n(\mathbf{R}(t))\rangle = \hbar \left(\frac{d}{dt} \theta(t) \right) |n(\mathbf{R}(t))\rangle + i\hbar \frac{d}{dt} |n(\mathbf{R}(t))\rangle \quad (1.4)$$

在公式 1.4 左右分别乘上 $\langle n(\mathbf{R}(t))|$ ，并且假定波函数已经归一化即

$\langle n(\mathbf{R}(t))|n(\mathbf{R}(t))\rangle = 1$ ，则可以得到

$$E_n(\mathbf{R}(t)) = \hbar \left(\frac{d}{dt} \theta(t) \right) + i\hbar \langle n(\mathbf{R}(t)) | \frac{d}{dt} |n(\mathbf{R}(t))\rangle \quad (1.5)$$

因此我们可以求解得到

$$\theta(t) = \frac{1}{\hbar} \oint_C E_n(\mathbf{R}(t')) dt' - \oint_C i \langle n(\mathbf{R}(t)) | \frac{d}{dt'} |n(\mathbf{R}(t))\rangle dt' \quad (1.6)$$

上式左边第一项为传统动力学相位，而第二项中的回路积分的负数部分则为 Berry 相位，其定义为：

$$\gamma_n = i \oint_C \langle n(\mathbf{R}(t)) | \frac{d}{dt'} |n(\mathbf{R}(t))\rangle dt' \quad (1.7)$$

从公式 1.7 中可以看到，Berry 相位来源于演化过程中不同时刻态的差异。而我们可以将时间从上式中移除，使得 Berry 相位只依赖于在参数空间 \mathbf{R} 的本征态，因此可以表示成：

$$\begin{aligned} \gamma_n &= i \oint_C \langle n(\mathbf{R}(t)) | \nabla_{\mathbf{R}} |n(\mathbf{R}(t))\rangle \frac{d\mathbf{R}(t)}{dt'} dt' \\ &= i \oint_C \langle n(\mathbf{R}) | \nabla_{\mathbf{R}} |n(\mathbf{R})\rangle d\mathbf{R} \end{aligned} \quad (1.8)$$

根据上式，我们可以定义一个矢量函数，称之为 Berry 连接，其定义为：

$$\mathbf{A}_n(\mathbf{R}) = i \langle n(\mathbf{R}) | \nabla_{\mathbf{R}} |n(\mathbf{R})\rangle \quad (1.9)$$

那么 Berry 相位可以表示成：

$$\gamma_n = \oint_C \mathbf{A}_n(\mathbf{R}) d\mathbf{R} \quad (1.10)$$

由于 $\langle n(\mathbf{R}) | n(\mathbf{R})\rangle = 1$ ，因此我们可以得到

一维光子晶体中拓扑量及其界面态的研究

$$\langle n(\mathbf{R}) | \nabla_{\mathbf{R}} | n(\mathbf{R}) \rangle = -\langle n(\mathbf{R}) | \nabla_{\mathbf{R}} | n(\mathbf{R}) \rangle^* \quad (1.11)$$

因此 $\langle n(\mathbf{R}) | \nabla_{\mathbf{R}} | n(\mathbf{R}) \rangle$ 为一纯虚数，Berry 相位则肯定为一实数。

如果我们选择一个规范，即对波函数做变换 $|n(\mathbf{R})\rangle \rightarrow e^{i\zeta(\mathbf{R})} |n(\mathbf{R})\rangle$ ，根据公式 1.9，Berry 连接则相应的变换为：

$$\mathbf{A}_n(\mathbf{R}) \rightarrow \mathbf{A}_n(\mathbf{R}) - \frac{\partial}{\partial \mathbf{R}} \zeta(\mathbf{R}) \quad (1.12)$$

而相应的 Berry 相位则为：

$$\gamma_n \rightarrow \gamma_n - \oint_C \zeta(\mathbf{R}) d\mathbf{R} = \gamma_n + \zeta(\mathbf{R}(0)) - \zeta(\mathbf{R}(T)) \quad (1.13)$$

此处 T 代表回到初始状态的时刻。由于选取的规范是单值的，因此初态 $e^{i\zeta(\mathbf{R}(0))} |n(\mathbf{R})\rangle$ 和末态 $e^{i\zeta(\mathbf{R}(T))} |n(\mathbf{R})\rangle$ 表示同一个态，因此 $\zeta(\mathbf{R}(0)) - \zeta(\mathbf{R}(T))$ 取值为 $2m\pi$ ($m \in \mathbb{Z}$)。因此尽管我们选取不同的规范，Berry 相位只会附加 $2m\pi$ 的相位差。为了移除这个不确定度，我们采用斯托克定理，并定义 Berry 曲率：

$$\boldsymbol{\Omega}_n(\mathbf{R}) = \nabla_{\mathbf{R}} \times \mathbf{A}_n(\mathbf{R}) \quad (1.14)$$

而 Berry 相位则可以表示成：

$$\gamma_n = \iint_C \boldsymbol{\Omega}_n(\mathbf{R}) dS \quad (1.15)$$

由于 $\nabla_{\mathbf{R}} \times \nabla_{\mathbf{R}} \cdot \zeta(\mathbf{R}) = 0$ ，因此 $\boldsymbol{\Omega}_n(\mathbf{R})$ 具有规范不变性。

在上述讨论中，我们推倒的 Berry 相位是建立在没有简并能带的前提下，也就是说只用于单独的能带。如果存在简并的能带，我们需要引入 Non-Abelian Berry 相位[3,4]。

1.2 一维光学体系中的 Zak 相位及其界面态

1.2.1 Zak 相位简介

在 1.1 节中，我们推导了 Berry 相位的表达式，其往往表示某系统的态沿回路（定义在 2 维或更高维的布洛赫动量空间）绝热演化至原状态后所累积的相位。但如果考虑一维布洛赫动量空间，我们就如法在找到这么一个回路，也就无法表征能带的拓扑性质。1989 年，J. Zak 在 *physical review letter* 上发表了一篇文章成功地解决了这个问题[5]，下面我们将简要介绍其工作。

考虑一个电子处在一维周期性势场(周期为 a)中，其布里渊区间为 $\left[-\frac{\pi}{a} \quad \frac{\pi}{a}\right]$ ，因此我们可以选取布里渊区间的波矢作为参量，来计算本征态在区间演化而累积的 Berry 相位（除去动力学相位），其表达式为：

$$\gamma_n = i \int_{-\pi/a}^{\pi/a} X_m dk \quad (1.16)$$

其中

$$X_m(k) = \frac{2\pi}{a} \int_0^a i u_{nk}(x) \frac{\partial u_{nk}^*(x)}{\partial k} dx \quad (1.17)$$

其中 $u_{nk}(x)$ 为第 n 阶能带上波矢为 k 的态的本征波函数。通过引入 Wannier 函数 $a_n(x)$ ，我们可以得到：

$$e^{ikx} u_{nk}(x) = \left(\frac{a}{2\pi}\right)^{1/2} \sum_m e^{ikma} a_n(x-ma) \quad , \quad m \in \mathbb{Z} \quad (1.18)$$

因此公式 1.16 可以表示成：

$$\gamma_n = \left(\frac{2\pi}{a}\right) \int_{-\infty}^{+\infty} x |a_n(x)|^2 dx \quad (1.19)$$

而对于第 n 阶能带，其波函数的对称中心位置[6]为：

$$q_n = \int_{-\infty}^{+\infty} x |a_n(x)|^2 dx \quad (1.20)$$

因此 Berry 相位相应为：

一维光子晶体中拓扑量及其界面态的研究

$$\gamma_n = \left(\frac{2\pi}{a} \right) q_n \quad (1.21)$$

如果周期性势场没有对称性, 则 q_n 或者 γ_n 可以为任意数; 如果势场具有对称性, 那么对称中心可以为 $x_c = 0$ 或 $x_c = a/2$ 。因此如果 $x_c = 0$, 则 $a_n(-x) = \pm a_n(x)$, 可以求得 $q_n = 0$, 因此 $\gamma_n = 0$; 如果 $x_c = a/2$, 则 $a_n(-x+a) = \pm a_n(x)$, 可以求得 $q_n = a/2$, 因此 $\gamma_n = \pi$ 。

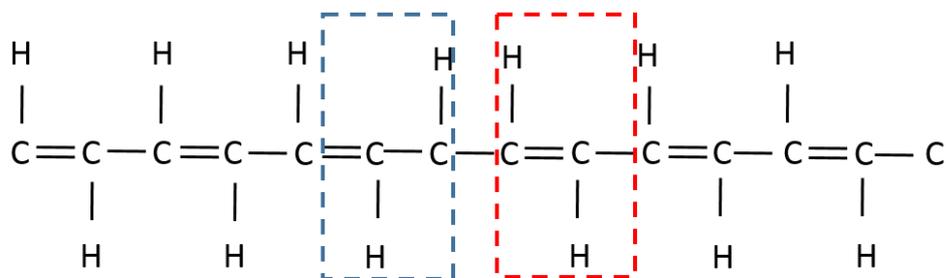
总结上述推导, 我们可以看到: 如果一维体系势场具有对称性, 则 Berry 相位将会被量子化, 其取值为 0 或者 π ; 若体系没有对称性, 则 Berry 相位可以为任意值。鉴于 J. Zak 的工作, 我们也将公式 1.16 称为 Zak 相位。

一维光子晶体中拓扑量及其界面态的研究

1.2.2 一维体系中界面态

一维体系中的界面态可以追溯到 1979 年发表在 *Physical Review Letter* 上的一篇文章[7]。该作者发现，如果将聚乙炔（分子式为 $(CH)_x$ ）的两种相拼接在一起，则会产生孤子态（界面态）。其具体结构如图 1.2a 所示，其中蓝色和红色虚线框分别为左右聚乙炔长链的原胞。理论计算显示这种结构会产生一种孤子态，其波函数的极大值在两种长链的界面上（如图 1.2b 所示），并随着距离的增加快速衰减，因此该态局域模式（孤子态）。该模型则根据作者的姓名被称为 SSH 模型。

a



b

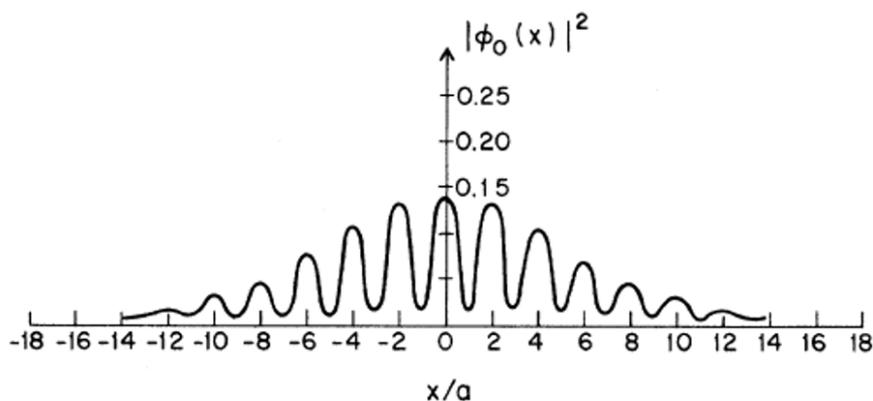


图 1.2a, 两种不同相的聚乙炔拼接在一起。b, 计算得到的界面态的波函数概率分布。

但由于当时几何相位还未引起人们的注意(Berry 相位和 Zak 相位分别在 1984 和 1989 年才被提出)，因此没有将孤子态的出现与能带的拓扑性质 (Zak 相位) 联系起来。2015 年，香港科技大学的 K. H. Fung 课题组分析了由金属等离子共振颗粒构成的一维双原子链中界面态与 Zak 相位的关系[8]。其结构如图 1.3a 所示，原胞由两个相同原子构成，分别用 A 和 B 表示。d 为双原子链的周期，t 为 A 和

一维光子晶体中拓扑量及其界面态的研究

B 原子之间的间距。如果 $t = d/2$ ，则一维双原子链则退化成单原子链，其周期为 $d/2$ 。在图 1.3b 中，我们用蓝色虚线画出了其在布里渊区间的色散。由于原胞中只包含一个原子，因此其只包含一条能带；若 $t \neq d/2$ ，则其原胞包含两个原子，相应色散则包含两条能带，如图 1.3b 中蓝色实线。由于周期为 d ，因此其第一布里渊区间为单原子链的一半（黑色虚线）。可以看到，在其布里渊区边界，产生了禁带区域。

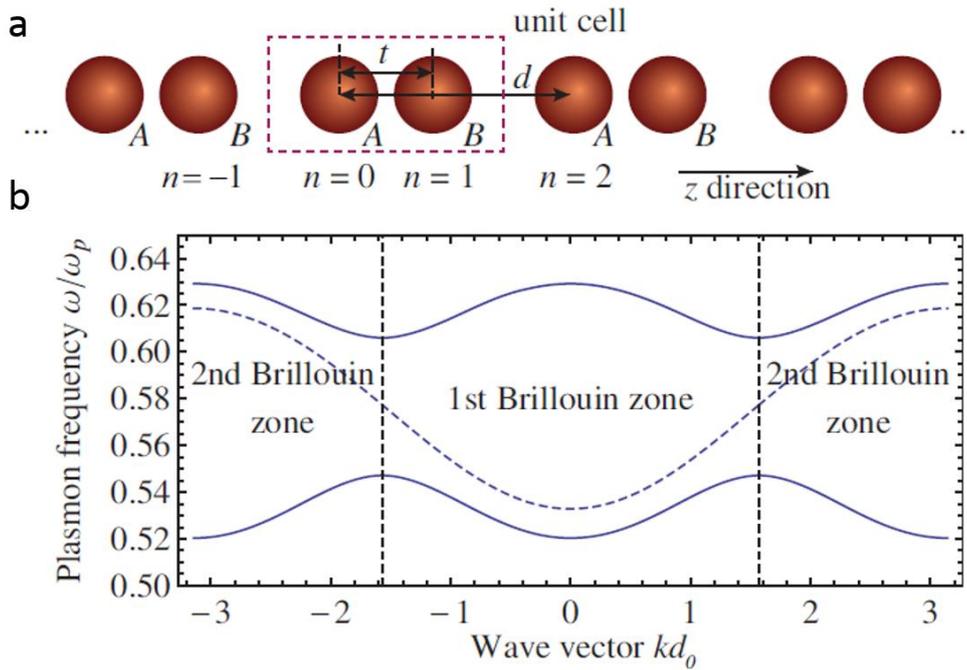


图 1.3a，一维双原子链结构示意图。b，蓝色虚线和实线分别对应单原子链和双原子链的色散。

利用公式 1.16，可以分别计算一维双原子链上下能带的 Zak 相位 γ 。因为该体系存在镜面对称性，因此 γ 的取值为 0 或 π 。通过计算，可以发现，如果 $t < d/2$ ，则上下能带的 Zak 相位均为 0 ；若 $t > d/2$ ，则上下能带的 Zak 相位均为 π 。如果将这两个具有不同拓扑量的双原子链拼接在一起（如图 1.4a 所示），其中左侧双

一维光子晶体中拓扑量及其界面态的研究

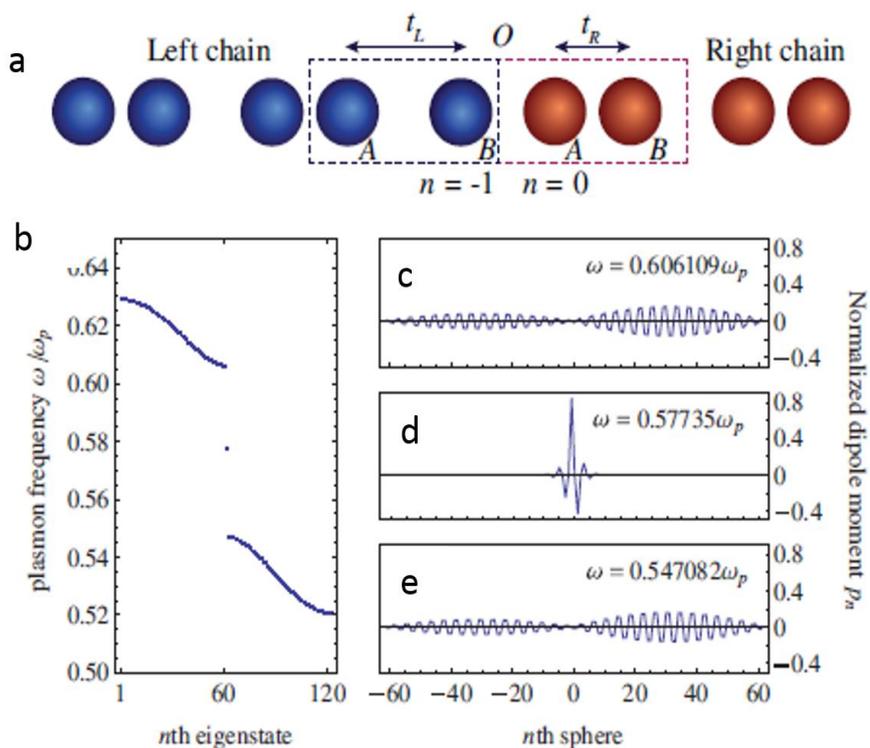


图 1.4a, 界面态结构示意图, 左右双原子链具有不同的 Zak 相位。b, a 图所示结构的本征能量。c-e, 分别对应上能带, 界面态和下能带的模场分布。

原子链 $t_L > d/2$, 共 62 个原胞; 右侧 $t_R < d/2$, 包含 63 个原胞。该体系的本征能量如图 1.4b 所示, 可以看到, 在禁带区域产生了一个孤立的态, 其模场局域在左右两链的界面上 (图 1.4d), 与上下能带的模场 (图 1.4c 和 e) 分布具有本

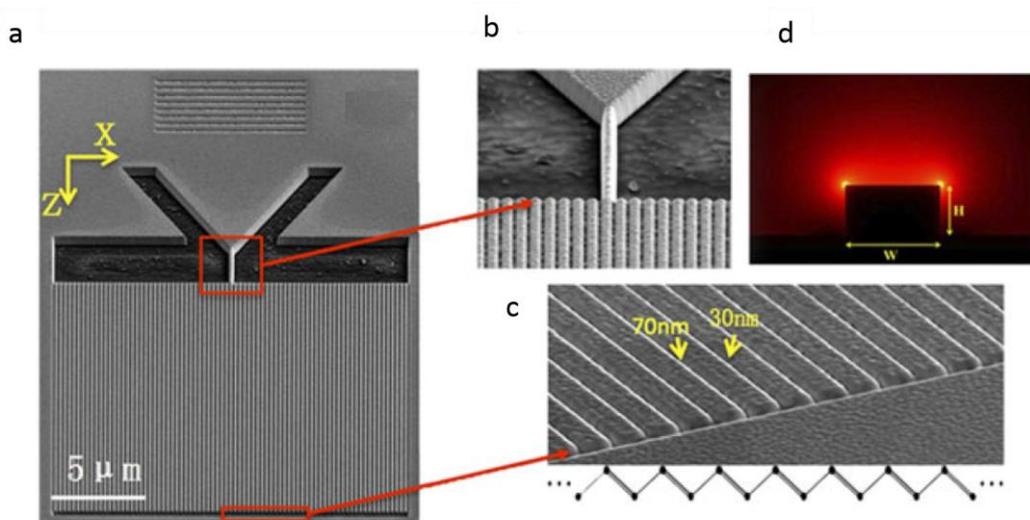


图 1.5a, 样品结构示意图。b, 波导阵列耦合结构。c, 波导阵列耦出结构。d, 单根金属等离激元波导的本征模场分布。

一维光子晶体中拓扑量及其界面态的研究

质的差别。由于界面态具有很强的场增强效应，因此可以用来增强量子点荧光等。

除了双原子颗粒链，SSH 模型同样也适用于波阵列体系。如在 2015 年，Q. Q. Chen 等在金属等离激元波导中也构造了界面态。其结构如图 1.5a 所示，通过聚焦等离离子刻蚀技术在银膜上刻蚀双原子波导阵列。每根波导的几何参数相同，因此具有相同的传播常数，其本征场分布如图 1.5d 所示。通过调整相邻波导的间距，可以构造 SSH 模型中的两个相。图 1.6 中画出了波导阵列的光场演化图，其中 a

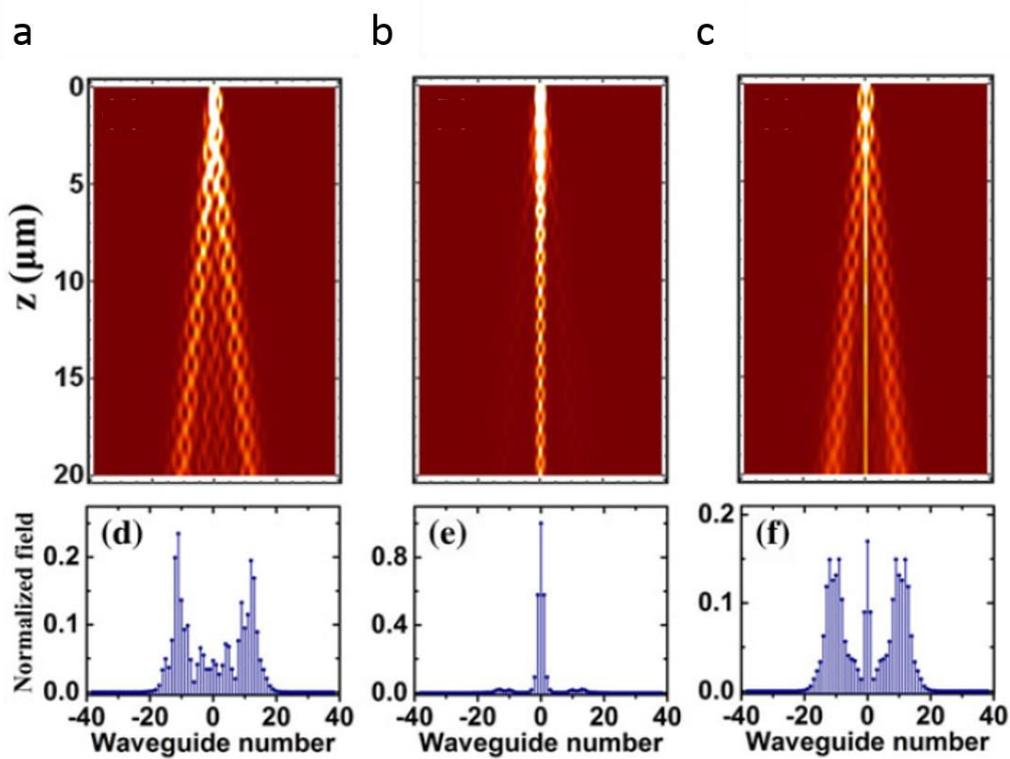


图 1.6, a-c 分别对应 3 种拼接的结构演化图。

为单独双原子波导阵列的演化；b 和 c 均为两种不同拓扑量的波导阵列的拼接结构，可以看到其中明显有局域膜的存在。由于 c 中还激发了传播模式，因此可以看到模场的横向扩散。除了等离激元波导，硅基波导阵列也可以实现相同的界面态[9]。

1.2.3 Zak 相位的测量

通过计算体系的 Zak 相位，我们可以用来构造界面态等。但是对于给定的一个体系，如何去测量 Zak 相位呢？根据公式 1.16 可知，直接测量 Zak 相位需要整条能带上的本征态的信息，这几乎是不可能实现的。因此如何测量 Zak 相位一直是一个挑战。

2013 年，德国 Immanuel. Bloch 课题组率先在实验中测量到了冷原子体系中的 Zak 相位[10]。利用布洛赫振荡和拉姆齐干涉，成功地测得了冷原子在能带上绝热演化所累积的相位，即 Zak 相位。2015 年，香港科技大学陈子亭教授课题组则首次在声学系统中测量得到了 Zak 相位[11]。不同于之前的工作，他们将 Zak 相位与能带带边态的波函数的对称性联系在一起，因此通过测量其场分布的对称性和反射相位，可以反推出能带的 Zak 相位。利用同样的方法，2016 年，Wing. Yim. Tam 课题组用相同的方法测量了一维光子晶体的 Zak 相位[12]。

1.3 二维光学体系中的“拓扑绝缘体”

1.3.1 打破时间反演对称性的光学“拓扑 Chern 绝缘体”

1980 年, Klitzing 等发现[13], 如果在二维自由电子气中施加一个强磁场, 该体系的霍尔电导率将会被严格量化为 e^2/h 的整数倍。1981 年, Laughlin 等使用规范不变性来解释了该量子化[14], 随后研究者们将霍尔电导率的量子化联系至能带的拓扑量, 其表达式为:

$$\sigma_{xy} = \frac{e^2}{h} \iint_{BZ} \frac{dk_x dk_y}{(2\pi)^2} \Omega_{k_x k_y} \quad (1.22)$$

其中 $\Omega_{k_x k_y}$ 为 Berry 曲率。根据公式公式 1.15, 霍尔电导率也可以写成

$$\sigma_{xy} = \frac{e^2}{h} n \quad (1.23)$$

其中 n 为能带的 Chern 数。但由于量子霍尔效应需要引入强磁场, 使得其在实验和应用很难实现。1988 年, Haldane 等发现[15], 如果在原胞中引入不均匀磁流, 但其总磁流为 0, 同样可以实现类似的效应。2008 年, Liu 等[16]提出利用在量子阱中的自旋轨道耦合效应, 同样可以实现量子化的霍尔电导率等, 由于其不需要引入磁场, 因此称之为量子反常霍尔效应。随后 2013 年, 薛其坤课题组在实验中验证了量子反常霍尔效应[17]。无论是量子霍尔效应或是反常量子效应, 均需

Chiral edge states of the QHE/QAHE

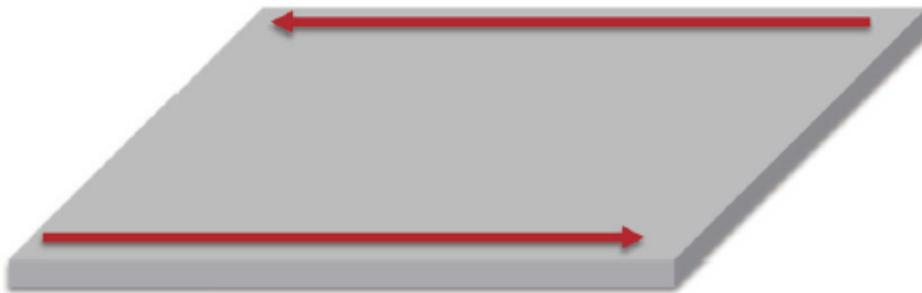


图 1.7, 量子霍尔效应/反常量子霍尔效应的边界态, 填充因子为 1。

一维光子晶体中拓扑量及其界面态的研究

要打破时间反演对称性来获得材料能带的非 0 Chern 数，因此我们将一类材料可以归为打破时间反演对称性的拓扑 Chern 绝缘体。除了电导率的量子化，拓扑绝缘体还具有许多新奇的性质，例如单向无散射传输等，如图 1.7 所示，尽管在其体块中无法传输电子，但在边界上可以进行单向无散射的传输。

基于拓扑绝缘体出色的性质，研究者们迫切地希望在光学体系中实现。但由于光子与磁场无直接相互作用，因此很难构造出拓扑非平庸的能带色散。2008 年，Raghu 和 Haldane 提出利用磁光材料构造的光子晶体可以实现光子的单向传输 [18, 19]。同年，麻省理工学院 Marin 课题组提出利用钇铁石榴石构造的光子晶体可以在微波波段实现单向传输 [18]，随后 2009 年，该课题组在实验中测得了微波的单向无散射传输 [20]。下面我们将简要叙述该工作。

考虑由磁光介质（钇铁石榴石）构成的二维正方晶格的光子晶体，当施加垂直面外的磁场时，其介电常数为标量 ϵ ，而其磁导率则需用用 3*3 的张量表示：

$$\boldsymbol{\mu} = \begin{bmatrix} \mu & i\kappa & 0 \\ -i\kappa & \mu & 0 \\ 0 & 0 & \mu_0 \end{bmatrix} \quad (1.24)$$

其中 μ 和 κ 均为实数。根据麦克斯韦方程组：

$$\begin{aligned} \nabla \cdot \mathbf{D} &= 0 \\ \nabla \cdot \mathbf{B} &= 0 \\ \nabla \times \mathbf{E} &= -\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} \\ \nabla \times \mathbf{H} &= -\frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t} \end{aligned} \quad (1.25)$$

$$\begin{aligned} \mathbf{D} &= \epsilon \mathbf{E} \\ \mathbf{B} &= \boldsymbol{\mu} \mathbf{H} \end{aligned} \quad (1.26)$$

并消去磁场，我们可以得到：

$$\nabla \times [\boldsymbol{\mu}^{-1}(\mathbf{r}) \nabla \times \mathbf{E}] = \epsilon(\mathbf{r}) \omega^2 \mathbf{E} \quad (1.27)$$

根据公式 1.24，可求得

一维光子晶体中拓扑量及其界面态的研究

$$\boldsymbol{\mu}^{-1} = \begin{bmatrix} \mu^{-1} & i\eta & 0 \\ -i\eta & \mu^{-1} & 0 \\ 0 & 0 & \mu_0^{-1} \end{bmatrix} \quad (1.28)$$

其中 $\mu^{-1} = \mu / (\mu^2 - \kappa^2)$, $\eta = -\kappa / (\mu^2 - \kappa^2)$ 。将公式 1.28 带入 1.27 式, 并做展开, 可以发现 (E_x, E_y) 和 E_z 是独立的, 即公式 1.27 可以得到 TE 和 TM 两个模式。对于 TM 模式, 其本征方程为:

$$\left[-\nabla^2 + (\nabla \ln \mu - i\boldsymbol{\mu} \bar{\mathbf{z}} \times \nabla \eta) \cdot \nabla - \mu \varepsilon \omega^2 \right] E_z = 0 \quad (1.29)$$

通过变换 $\psi \equiv E_z \sqrt{\mu}$, 公式 1.29 可以写成:

$$\left[-|\nabla + i\mathbf{A}(r)|^2 + V(r) \right] \psi = 0 \quad (1.30)$$

其中

$$\mathbf{A} = \frac{\boldsymbol{\mu}^{-1}}{2} \bar{\mathbf{z}} \times \nabla \eta \quad (1.31)$$

$$V = \frac{1}{4} \left(|\nabla \ln(\mu)|^2 + |\boldsymbol{\mu} \nabla \eta|^2 \right) - \frac{1}{2} \nabla^2 \ln(\mu) - \mu \varepsilon \omega^2 \quad (1.32)$$

公式 1.30 描述了非相对论粒子在矢量势 \mathbf{A} 和标量势 V 场中的运动方程, 与量子霍尔效应具有相同的性质。

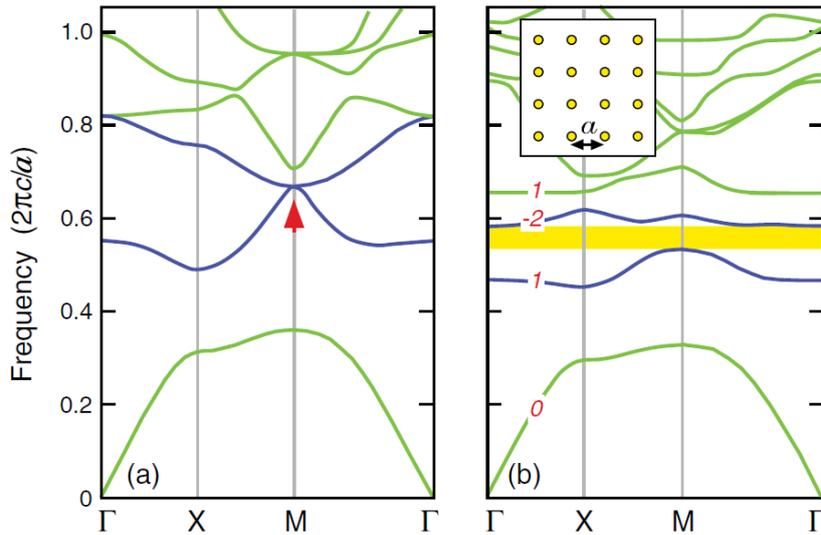


图 1.8 光子晶体能带色散, a, 不加磁场; b, 施加磁场。

一维光子晶体中拓扑量及其界面态的研究

利用公式 1.29，可以计算出光子晶体的能带色散，如图 1.8 所示。其中，a 图对应不加磁场的情况，因此 $\kappa=0$ ；而 b 图对应施加磁场时光子晶体的能带色散，此时 $\kappa \neq 0$ 。可以看到，加入磁场之后，原先简并的两条能带（图 a 箭头所示）打开了一个带隙。利用公式 1.8 和 1.29，可以计算出每条能带的 Chern 数，见图 b 中红色数字。

如果将拓扑非平庸的光子晶体（具有非 0 Chern 数的能带）与拓扑平庸的光子晶体拼接在一起，则在界面上会存在单向无反射的边界态。如图 1.9 所示，上半部分的三角晶格光子晶体为拓扑平庸，而下半部分的正方晶格光子晶体为拓扑非平庸，黑色直线代表 PEC。可以看到使用电偶极子在左侧激发时，光波只会沿着界面往右侧传输，并且会绕过由 PEC 构成的障碍物继续向右传播，a-c 分别对应不同时刻的 E_z 分布。该性质与量子霍尔效应具有相同的本质。2009 年，该课题

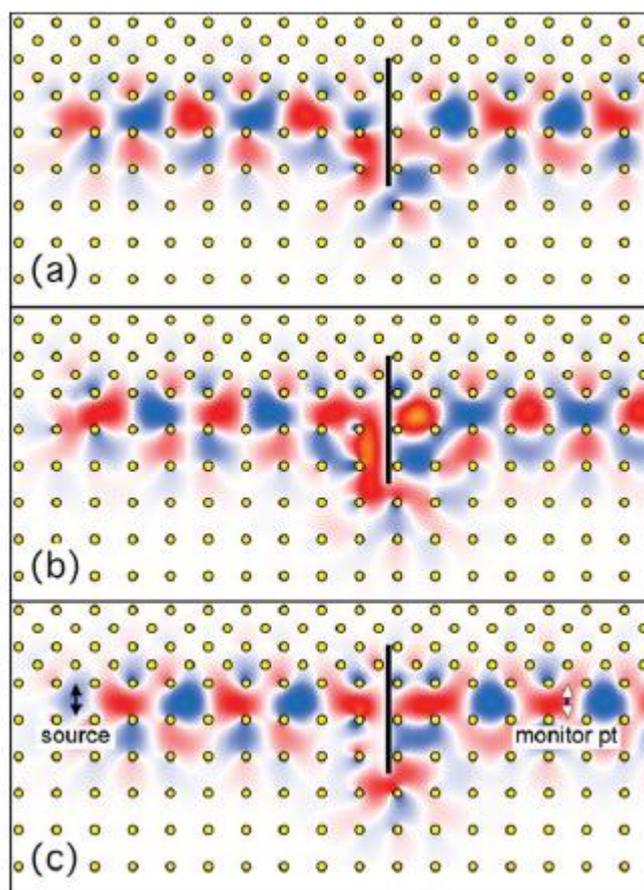


图 1.9 a, b, c 分别对应不同时刻的 E_z 分布。

组在实验中观测到了边界态的无散射传输[20]。

一维光子晶体中拓扑量及其界面态的研究

除了使用磁光介质来打破时间反演对称性，来实现拓扑非平庸的光子晶体能带，研究者发现可以即时调控的光学谐振腔阵列[21]（图 1.10a）以及弯曲的波导阵列[22]（图 1.10b）同样可以打破时间反演对称性，最终构造拓扑非平庸的能带色散，实现单向无散射传输等。

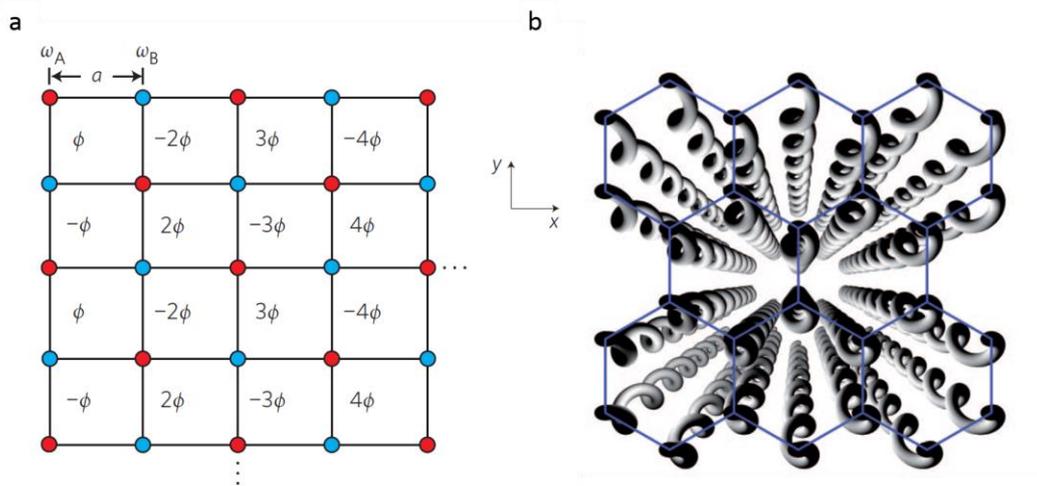


图 1.10, a, 即时调控的光学谐振腔阵列。b, 弯曲波导阵列。

一维光子晶体中拓扑量及其界面态的研究

1.3.2 时间反演对称性保护的光学“ Z_2 拓扑绝缘体”

在上一节中，我们介绍了拓扑 Chern 绝缘体，由于需要打破时间反演对称性，因此需要引入磁场等，这造成其应用困难。2005 年，C. L. Kane 和 E. J. Mele 提出可以在石墨烯中实现量子自旋霍尔效应[23]，并且不需打破时间反演对称性。2006 年，B. Andrei Bernevig 和 Shou-Cheng Zhang 利用场论来描述这一类拓扑绝缘体[24]。同年，Shou-Cheng Zhang 课题组理论上预言在碲汞矿量子阱中具有量子霍尔效应[25]，随后 2007 年，该课题组在实验中证实了该理论[26]。我们将这一类受时间反演对称性保护的拓扑绝缘体称为 Z_2 拓扑绝缘体，其拓扑量不在用 Chern 数来表示，而是奇数或偶数来表示，其中奇数为拓扑非平庸，偶数则为拓扑平庸。

考虑电子体系（包含自旋），由于系统受时间反演对称性保护，因此：

$$T^2 = -1 \quad (1.33)$$

此处 T 为时间反演算符。（对于无自旋的体系， $T^2 = 1$ 。）经过推导，可以将其表示为：

$$T = UK \quad (1.34)$$

其中 U 为反对称酉矩阵， K 为复共轭算符。根据卡玛斯简并原理，能带至少为 2 能级简并，分别对应自旋向上和向下的电子能带。由于存在简并能带，因此不能再用公式 1.7 来计算能带的拓扑量。考虑第 i 个本征态与 j 个本征态的时间反演态的交叠系数：

$$\langle u_i(\mathbf{k}) | T | u_j(\mathbf{k}) \rangle = (u_i(\mathbf{k}))_m^* U_{mn} (u_j(\mathbf{k}))_n \quad (1.35)$$

而

$$\langle u_j(\mathbf{k}) | T | u_i(\mathbf{k}) \rangle = (u_j(\mathbf{k}))_n^* U_{nm} (u_i(\mathbf{k}))_m \quad (1.36)$$

由于 U 为反对称矩阵，因此

$$\langle u_i(\mathbf{k}) | T | u_j(\mathbf{k}) \rangle = -\langle u_j(\mathbf{k}) | T | u_i(\mathbf{k}) \rangle \quad (1.37)$$

如果 $i = j$ ，则 $\langle u_i(\mathbf{k}) | T | u_j(\mathbf{k}) \rangle = 0$ 。如果考虑 2 能带简并，我们定义：

一维光子晶体中拓扑量及其界面态的研究

$$P(\mathbf{k}) = Pf[A] \quad (1.38)$$

其中

$$A_{ij} = \langle u_i(\mathbf{k}) | T | u_j(\mathbf{k}) \rangle \quad (1.39)$$

根据公式 1.37, 可以看到公式 1.38 取值为 A_{12} 。如果选取不同的规范, 即做变换:

$$|u'_i(\mathbf{k})\rangle = \mathbf{R}_{ij} |u_j(\mathbf{k})\rangle \quad (1.40)$$

\mathbf{R}_{ij} 为酉矩阵。可以证明 $|P(\mathbf{k})|$ 的取值不变, 因此其为规范不变量。对于布洛赫空间, 由于其受时间反演对称性保护, 因此我们只需考虑其一半的空间。如果在这区域内, 如果满足 $|P(\mathbf{k})|=0$ 的 \mathbf{k} 值有 I 个, 若 I 为奇数, 则其为拓扑非平庸; 反之若为偶数, 则其为拓扑平庸。为了简化其计算过程, 我们也可以根据:

$$I = \frac{1}{2\pi i} \oint_{C/2} d\mathbf{k} \cdot \nabla \log(P(\mathbf{k})) \quad (1.41)$$

来计算其指数 I 。如果将拓扑非平庸与平庸的绝缘体拼接在一起, 则其在某条边界上会存在两条边界态, 分别对应相反的电子自旋, 并且自旋与其传播方向锁定, 如图 1.11 所示。因此如果不引入磁性散射 (引起自旋翻转), 确定自旋的电子只会沿特定方向传输而不会被缺陷散射。

Helical edge states of the QSHE

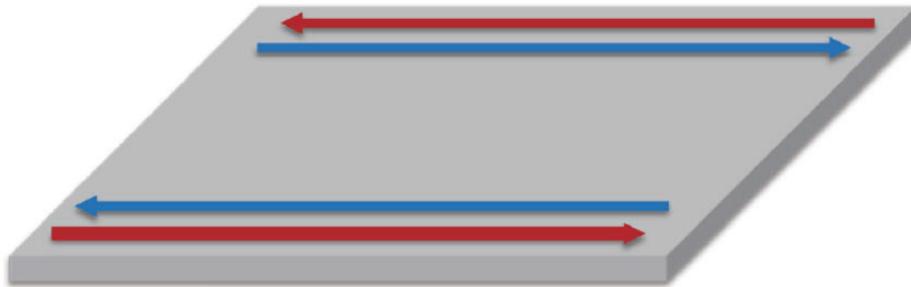


图 1.11 量子自旋霍尔效应。

一维光子晶体中拓扑量及其界面态的研究

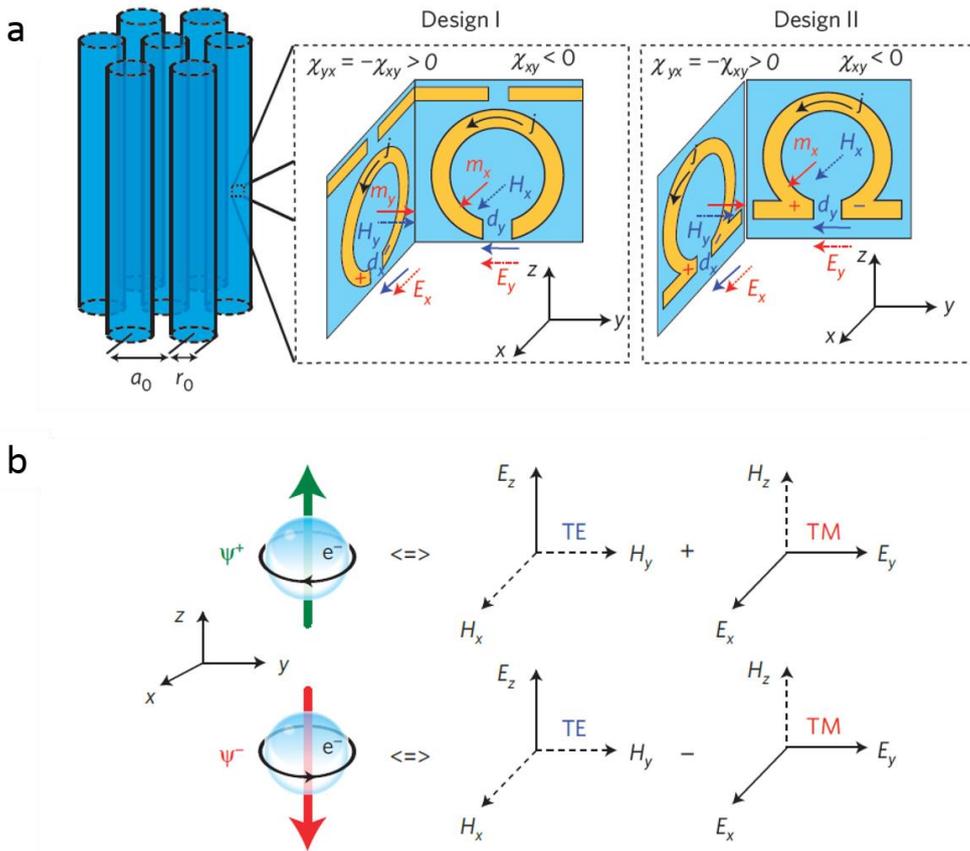


图 1.12, a, 超材料原胞构成的二维光子晶体。b, 赝自旋的表达。

由于真空中光子为玻色子，即 $T^2 = 1$ ，因此光子的量子自旋霍尔效应很长时间都没有被发现。2013 年，德州大学奥斯汀分校的 Gennady Shvets 课题组提出利用光子赝自旋来实现光学 Z_2 拓扑绝缘体[27]。考虑如图 1.12a 所示的三角晶格光子晶体，若其为普通介质材料，则其本征模可以分解成 TE 和 TM 模。考虑双各向异性：

$$\boldsymbol{\varepsilon} = \begin{pmatrix} \varepsilon_{\perp} & 0 & 0 \\ 0 & \varepsilon_{\perp} & 0 \\ 0 & 0 & \varepsilon_{zz} \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{\mu} = \begin{pmatrix} \mu_{\perp} & 0 & 0 \\ 0 & \mu_{\perp} & 0 \\ 0 & 0 & \mu_{zz} \end{pmatrix} \quad (1.42)$$

若满足

$$\varepsilon_{\perp} = \mu_{\perp}, \quad \varepsilon_{zz} = \mu_{zz} \quad (1.43)$$

则 TE 和 TM 模将会简并。此时可以用 TE 和 TM 的线性组合构成两个赝自旋态，

一维光子晶体中拓扑量及其界面态的研究

$\psi^\pm(x; q) = E_z(x; q) \pm H_z(x; q)$, 如图 1.12b 所示, 其满足 $T^2 = -1$ 。此时可以计算

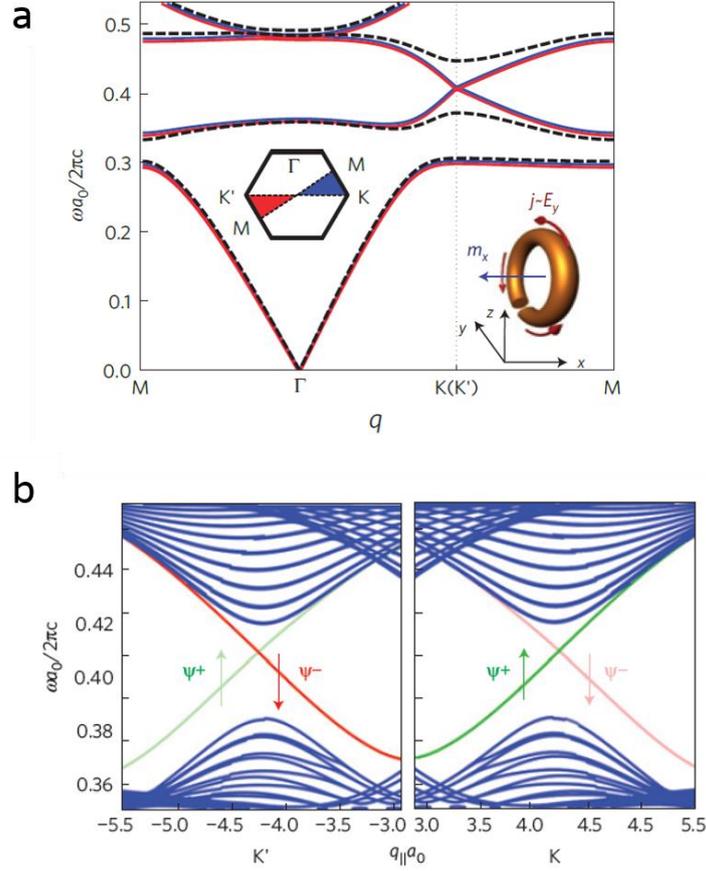


图 1.13, a, 蓝色和红色为 $\chi_{12} = 0$ 光子晶体色散, 黑色虚线为 $\chi_{12} \neq 0$ 时的色散。b, $\chi_{12} \neq 0$ 时, 考虑有限周期数光子晶体的色散。

光子晶体的色散, 其结果如图 1.13a 中蓝色和红线所示, 可以看到, 其色散均为二能带简并。在 $K(K')$ 点受结构对称性保护, 存在四能带简并点, 为双重狄拉克锥。为了在该点打开能隙, 可以引入电磁耦合:

$$\xi = \begin{pmatrix} 0 & i\chi_{xy} & 0 \\ i\chi_{xy} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (1.44)$$

其色散如图 1.13b 所示, 可以看到 $K(K')$ 打开了能隙。为了实现公式 1.43 和 1.44, 研究者设计了如图 1.12a 所示超材料, 来构成光子晶体。若考虑将拓扑非平庸与平庸的光子晶体拼接在一起, 在其带隙内, 会存在两条边界态, 分别对应两种自

一维光子晶体中拓扑量及其界面态的研究

旋状态，其色散如图 1.13b 所示。由于其 $T^2 = -1$ ，因此这两支边界态的自旋与其传播方向相互锁定，因此其具有类似量子自旋霍尔效应的性质，即无散射传输。如图 1.14 所示，尽管存在各种类型的缺陷，确定自旋的边界态均会保持其传播方向，并且无任何反射。

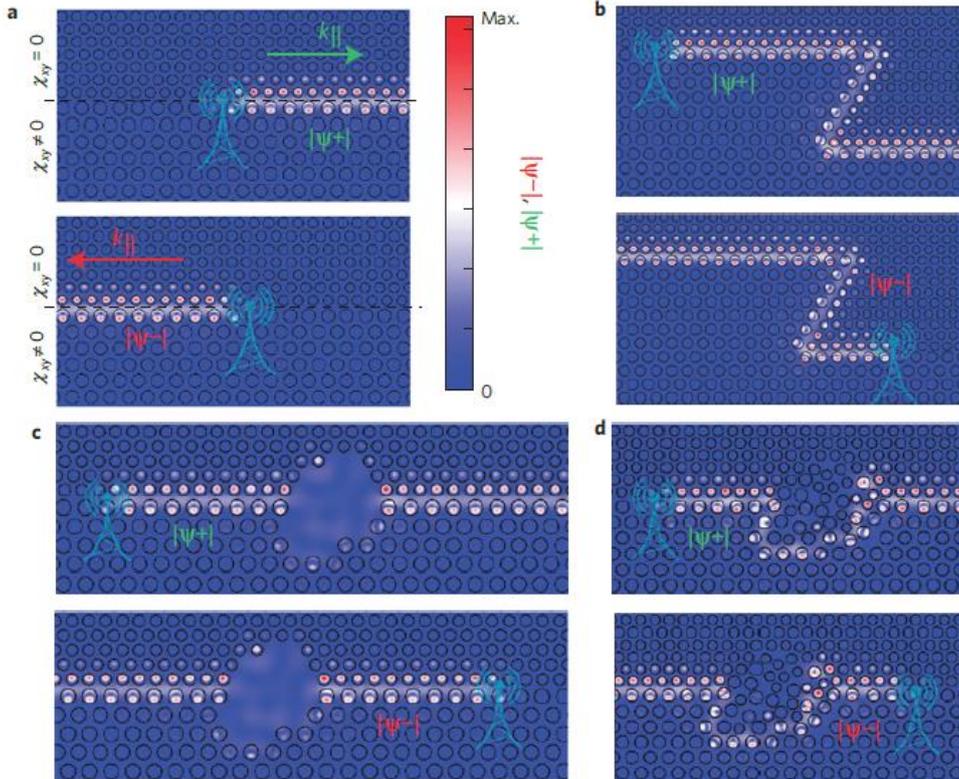


图 1.14, a-d 边界态在不同边界的传播。

除了使用光子晶体，马里兰大学 Hafezi 等利用光学环形谐振腔阵列也实现了 Z_2 拓扑绝缘体[28]。

1.3.3 拓扑晶体绝缘体

除了上述两类拓扑绝缘体，研究者们又提出了拓扑晶体绝缘体[29]，其利用空间的反演对称性，旋转对称性等。由于其主要依赖于结构的对称性，而不需要打破时间反演对称性，引入自旋等，因此很容易在光学体系中实现[30]。由于其具有很多构型，因此我们这边不再详述。

1.4 三维光学体系中的“拓扑半金属”

1.4.1 拓扑半金属

在凝聚态物理中,我们根据费米能附近带隙的大小来定义金属,半导体和绝缘体。日常生活中,我们近乎无时无刻都能遇到金属(金,银等),因此非常熟悉。但最近,拓扑半金属这个名词不时出现在我们视野中。不同于普通金属,研究者们根据其能带色散分为 Dirac 半金属, Weyl 半金属和 Nodal Line 半金属。尽管这三种均称为半金属,可是由于其各自特殊的能带色散,其性质却有很大的差别。

在介绍 Dirac 半金属之前,我们不得不先提一下非常著名的 Dirac 方程:

$$H = \sum ck_i\alpha_i + mc^2\beta \quad (1.45)$$

考虑三维空间, k_i 为动量, $i=1,2,3$, c 为真空中光速, m 为粒子静止质量。其中

$$\alpha_i = \begin{pmatrix} 0 & \sigma_i \\ \sigma_i & 0 \end{pmatrix}, \quad \beta = \begin{pmatrix} \sigma_0 & 0 \\ 0 & \sigma_0 \end{pmatrix} \quad (1.46)$$

σ_i 为泡利矩阵, σ_0 为 2×2 单位矩阵。满足该方程粒子,如电子等,被称之为 Dirac 费米子。1929 年[31], Weyl. Hermann 将无质量 ($m=0$) Dirac 方程 (4×4) 分离成两个独立的方程 (2×2), 分别描述了具有不同手性的粒子,我们称之为 Weyl 费米子。其满足的方程形式为:

$$H = \sum ck_i\sigma_i \quad (1.47)$$

我们用其电荷来表示 Weyl 费米子的手性,其定义为 $C = \text{sgn}(\prod k_i)$ 。

尽管 Dirac 方程和 Weyl 方程最早用来描述基本粒子,研究者们发现它们也可以用来描述凝聚态中的准粒子,即固体中电子群体的能带色散。我们将色散方程满足无质量 Dirac 方程和 Weyl 方程(费米能在简并能附近)的固体材料称为 Dirac 半金属[32-42]和 Weyl 半金属[34,39,43-61]。

一维光子晶体中拓扑量及其界面态的研究

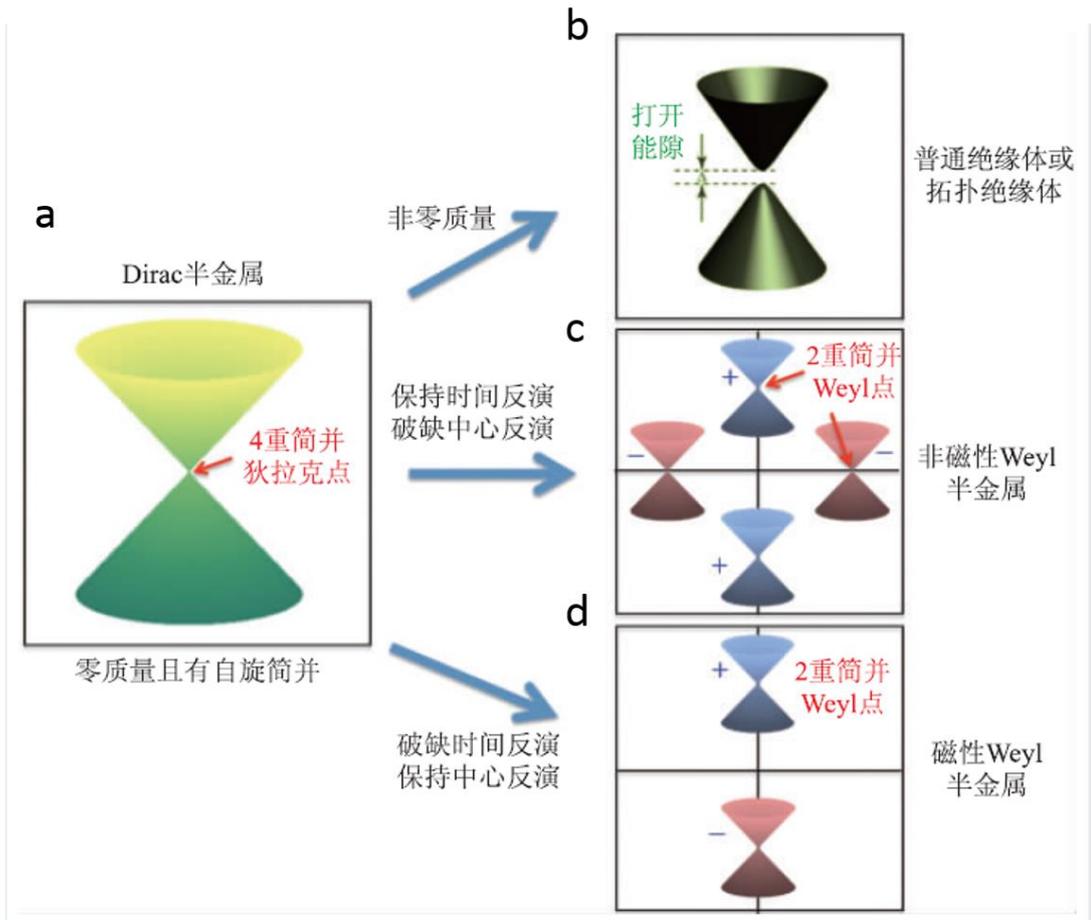


图 1.15, a, Dirac 半金属色散。b, 引入非零质量的色散。c, 保持时间反演对称性而破坏中心反演对称性的 Weyl 半金属色散。d, 保持中心反演对称性而破坏时间反演对称性的 Weyl 半金属色散。

在图 1.15 为 Dirac 半金属与 Weyl 半金属的色散[62]。Dirac 半金属是受时间反演对称性和中心反演对称性所保护。如果引入非零质量，将会打开带隙，形成拓扑绝缘体或普通绝缘体（取决于 m 的符号）。如果打破中心反演对称性，则在布洛赫空间形成两对手性相反的 Weyl 色散；如果打破时间反演对称性，则会形成一对 Weyl 色散。

除了 Dirac 和 Weyl 半金属，研究者们还发现了一类新的半金属。不同于前两类半金属，其导带和价带在 3 维动量空间存在一孤立的简并点，这类新的半金属的导带和价带的简并点形成一回路，在这回路上任取一点，其能带色散均形成 2 维

一维光子晶体中拓扑量及其界面态的研究

Dirac 锥，如图 1.16 所示。由于其简并位置构成一轨迹，因此称之为 Nodal Line 半金属。由于 Nodal Line 具有许多新奇的物理性质，因此吸引了许多研究者的兴趣[63-70]。

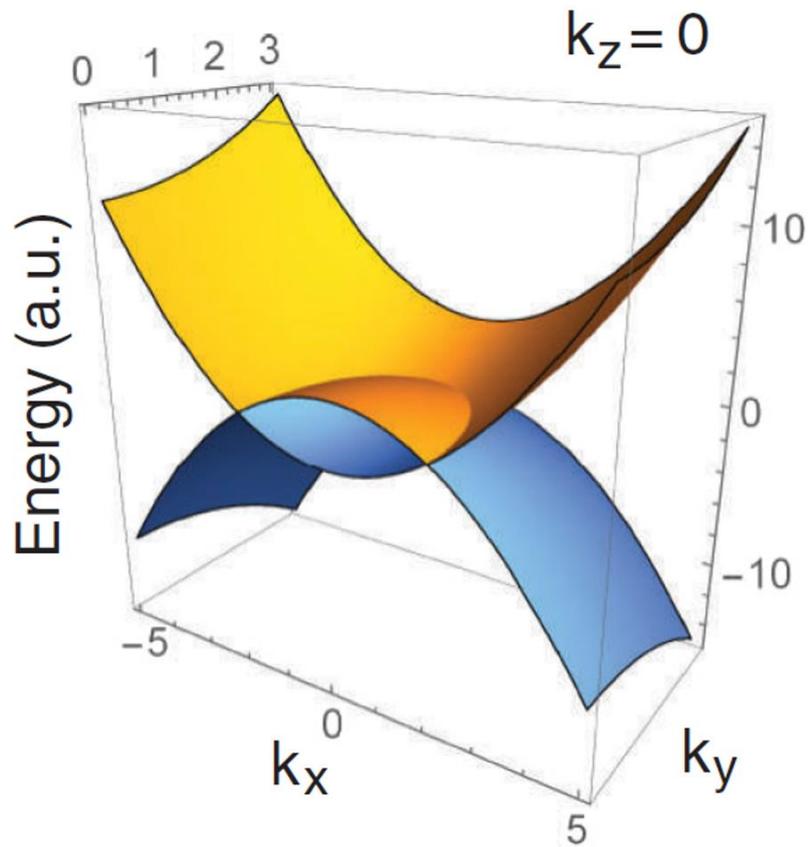


图 1.16, Nodal Line 半金属色散。

一维光子晶体中拓扑量及其界面态的研究

1.4.2 光学体系中的“拓扑半金属”

由于拓扑半金属具有许多新奇的性质，因此研究者们也将其引进光学体系，来构造出光学“拓扑半金属”。2013年，麻省理工学院 Marin 课题组首先在理论上提出利用螺旋二十四面体构成的光子晶体，可以实现 Weyl 色散和 Nodal Line 色散 [71]。其结构如图 1.17a 所示，其原胞包含两组相互嵌套的螺旋二十四面体（蓝色和红色区域），b 图则为相应的第一布里渊区间。如果该光子晶体同时具有时

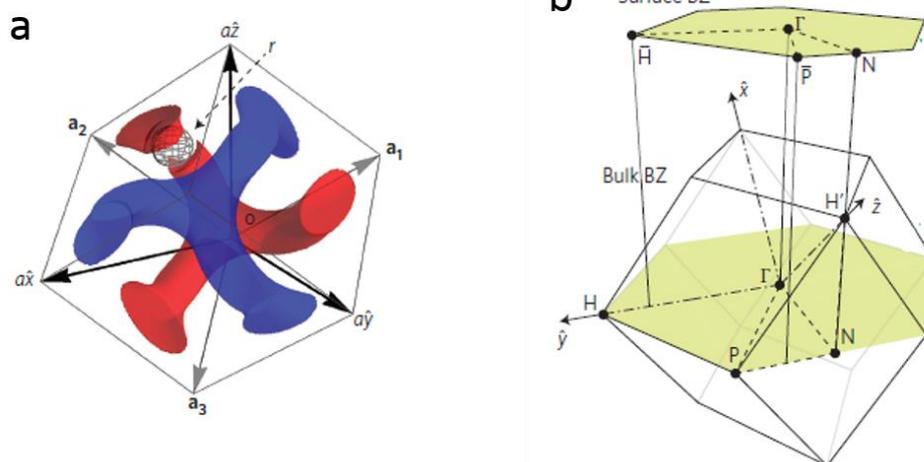


图 1.17, a, 光子晶体原胞。b, 光子晶体第一布里渊区间。

间反演对称性和空间反演对称性，其第一布里渊区边界色散如图 1.18a 所示，可以看到其在 Γ 点附近存在两条能带的简并回路，即 Nodal Line 色散。通过改变结构打破光子晶体的空间反演对称性，Nodal Line 将会演化成 2 对具有相反“电荷”的 Weyl 点，如图 1.17b 所示。若保持结构的空间反演对称性，而引入磁性材料来打破时间反演对称性，则 Nodal Line 将会演化成 1 对具有相反“电荷”的 Weyl 点，如图 1.17c 所示。2015 年，该课题成功的在实验中验证了 Weyl 点的存在 [72]，几乎在同时与电子体系的两篇实验证实 Weyl 点存在的工作 [46,48] 发表在《Science》上。这一系列的工作引起了研究者的极大兴趣。

除了使用螺旋二十四面体结构，香港科技大学陈子亭教授课题组提出利用超材料

一维光子晶体中拓扑量及其界面态的研究

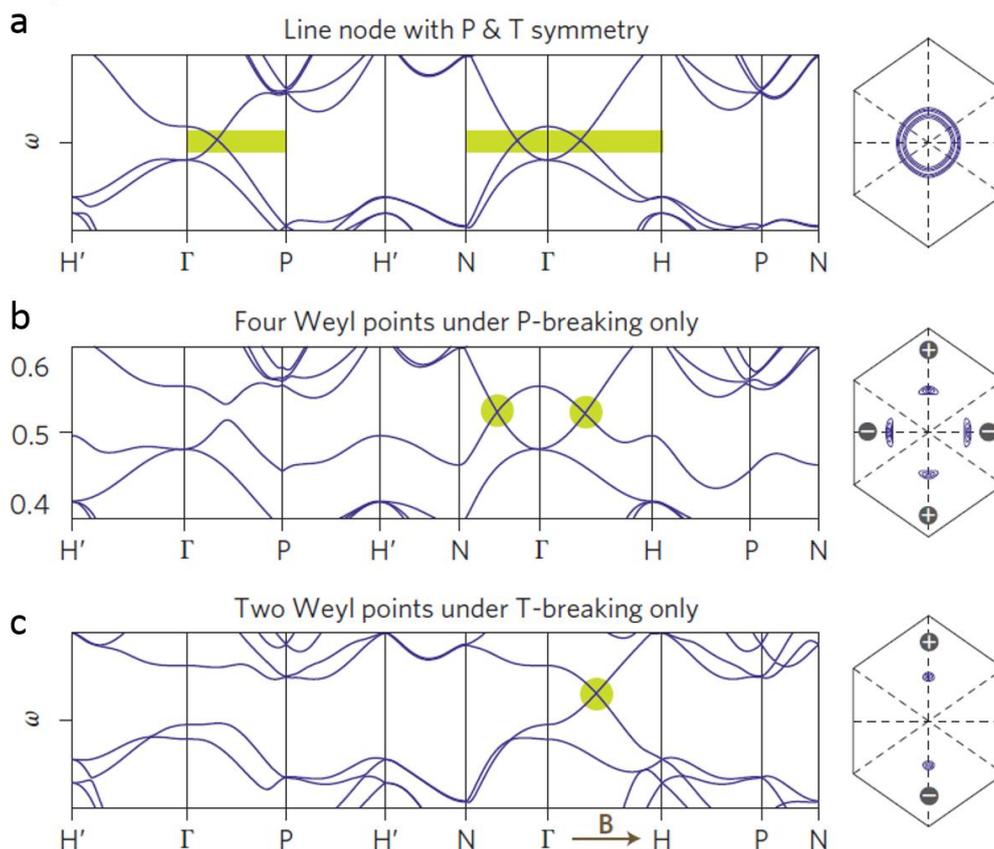


图 1.18, a, 受时间反演和中心反演对称性保护的光子晶体 Nodal Line 色散。b, 打破中心反演对称性保护的光子晶体 Weyl 色散。c, 打破时间反演对称性保护的光子晶体 Weyl 色散。

来实现微波波段的 Weyl 点[73]。不同于普通光子晶体求解色散时需要用平面波展开法，由于其原胞由超材料构成，因此每个原胞可以视为一个谐振子，因此其色散可以用紧束缚模型求解。由于引入了超材料，该系统中还可以实现具有高“电荷”的 Weyl 点。同时，他们也成功地在实验中测量了边界态的传输谱，从而证明了其单向无散射这一新奇的物理现象。由于超材料的灵活性，斯坦福大学的范汕辉课题组提出了利用超材料构成的光子晶体来实现第二类型的 Weyl 点[74]。此外，许多方案也纷纷被提出[75,76]，来实现光学 Weyl 点。

根据 Weyl 方程（公式 1.47）的定义，Weyl 点存在于三维的动量空间。最近，斯坦福大学范汕辉课题组提出，利用人造维度来实现广义的 Weyl 点。所谓人造维度，顾名思义就是人为的定义一个维度，可以是几何尺寸，频率，相位等等，因

一维光子晶体中拓扑量及其界面态的研究

此具有极大的灵活性。通过引入人造维度，可以代替动量空间的某个维度，来实现 Weyl 色散。如图 1.19a 所示的二维环形谐振腔阵列，其布洛赫动量空间为 2 维。通过引入人造维度，即频率，则可以构成一个三维空间，如图 b 所示。因此，人造维度可以极大地简化结构的复杂性来实现 Weyl 点。其次，由于人造维度的

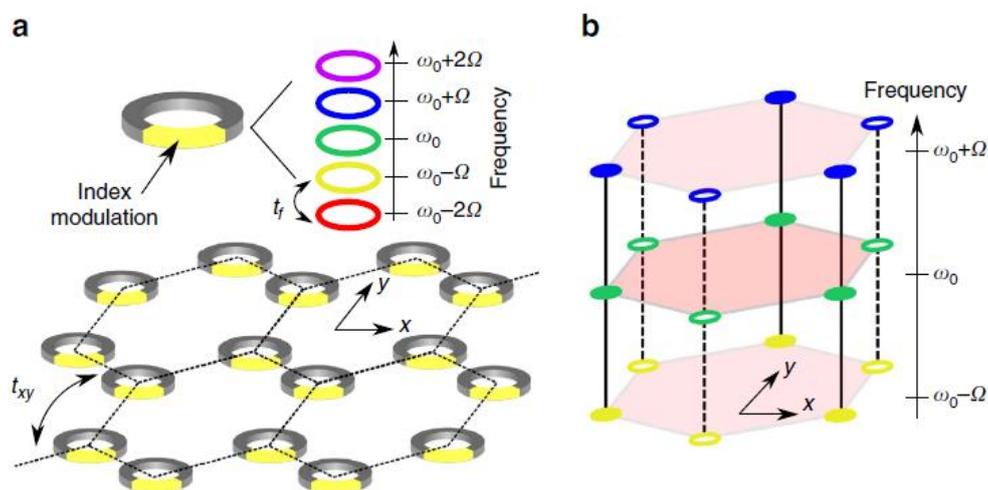


图 1.19 a, 二维环形谐振腔阵列。b, 二维布洛赫动量空间与频率维度构成的三维空间。

可调性，使得其具有跟广泛的应用前景。

对于 Dirac 半金属，由于其受时间反演对称性保护（卡玛斯简并原理），因此其导带和价带均为 2 重简并，即上下自旋。由于光子为玻色子，因此不存在自旋简并，这使得在光学体系实现“Dirac 半金属”存在较大的困难。同样在光学体系实现“Nodal line 半金属”也是比较困难。最近也有一些工作理论上提出方案来实现这两类“拓扑半金属”[77]，但依旧还需实验的证实。

1.5 本论文研究思路和论文结构

第一章中，我们首先介绍了几何相位的产生，并且详细推导了 Berry 相位的表达式，其被广泛地用于各个体系来表示系统的拓扑性质。随后我们简略地介绍一维，二维以及三维光学体系的拓扑性质，以及相应的拓扑边界态（界面态）。

第二章中，我们详细地推导了具有中心对称的一维光子晶体的色散以及本征波函数，并且计算了其能带拓扑量（Zak 相位）。通过建立体块—界面的联系，我们将能带的 Zak 相位与光子晶体的反射相位联系在一起。由于光学波段的反射相位测量需要引入复杂的干涉光路，我们提出利用界面态来测量光子晶体的 Zak 相位，并且在实验中得以证实。而确定能带的拓扑性质，也相应的帮助我们设计超构表面来调控界面态，使其具有广泛的应用前景。

第三章中，我们将动量空间的 Weyl 点推广到了广义空间。我们将一维光子晶体的原胞设计成四层平板堆叠，从而引入两个几何参数，与光子晶体的动量构建了一个三维空间，并且成功的构造出了广义 Weyl 点。由于 Weyl 点的存在，光子晶体能隙中反射相位在参数空间将会形成涡旋。而这些相位涡旋将保证界面态的存在，即无论反射面的性质，光子晶体与其界面均会存在界面态。这些界面态的存在与 Weyl 半金属中的费米弧具有相同的物理。

第四章中，由于我们构造的是广义空间，因此空间维度不再被限制为三维，我们引入第三个几何参数，将三维空间拓展到四维。在调节第三个参数时，我们观测到了光子晶体色散的拓扑相变。而对应拓扑相变的位置，Weyl 相不再存在，取而代之的为 Nodal line 相。我们通过转移矩阵详细地推导了 Nodal line 相的产生原因。虽然 Nodal line 相不存在反射相位涡旋，但我们发现其具有完美透射的性质，同样具有很好的应用前景。

第五章中，我们简单地总结了所做的工作，并对今后的工作提出展望。

参考文献

- [1] S. Pancharatnam, Proc. Indian Acad. Sci. **A44**, 16 (1956).
- [2] M. V. Berry, Proceedings of the Royal Society of London. A. Mathematical and Physical Sciences **392**, 45 (1984).
- [3] R. Resta, Rev. Mod. Phys. **66**, 899 (1994).
- [4] S. W. Lovesey, Contemporary Physics **55**, 353 (2014).
- [5] J. Zak, Physical Review Letters **62**, 2747 (1989).
- [6] J. Zak, Physical Review Letters **48**, 359 (1982).
- [7] W. P. Su, J. R. Schrieffer, and A. J. Heeger, Physical Review Letters **42**, 1698 (1979).
- [8] C. W. Ling, M. Xiao, C. T. Chan, S. F. Yu, and K. H. Fung, Opt. Express **23**, 2021 (2015).
- [9] A. Blanco-Redondo, I. Andonegui, M. J. Collins, G. Harari, Y. Lumer, M. C. Rechtsman, B. J. Eggleton, and M. Segev, Physical Review Letters **116**, 163901 (2016).
- [10] M. Atala, M. Aidelsburger, J. T. Barreiro, D. Abanin, T. Kitagawa, E. Demler, and I. Bloch, Nat Phys **9**, 795 (2013).
- [11] M. Xiao, G. Ma, Z. Yang, P. Sheng, Z. Q. Zhang, and C. T. Chan, Nat Phys **11**, 240 (2015).
- [12] Q. Wang, M. Xiao, H. Liu, S. Zhu, and C. T. Chan, Phys. Rev. B **93**, 041415 (2016).
- [13] K. v. Klitzing, G. Dorda, and M. Pepper, Physical Review Letters **45**, 494 (1980).
- [14] R. B. Laughlin, Physical Review B **23**, 5632 (1981).
- [15] F. D. M. Haldane, Physical Review Letters **61**, 2015 (1988).
- [16] C.-X. Liu, X.-L. Qi, X. Dai, Z. Fang, and S.-C. Zhang, Physical Review Letters **101**, 146802 (2008).
- [17] C.-Z. Chang *et al.*, Science **340**, 167 (2013).
- [18] F. D. M. Haldane and S. Raghu, Physical Review Letters **100**, 013904 (2008).
- [19] S. Raghu and F. D. M. Haldane, Physical Review A **78**, 033834 (2008).
- [20] Z. Wang, Y. Chong, J. D. Joannopoulos, and M. Soljacic, Nature **461**, 772 (2009).
- [21] K. Fang, Z. Yu, and S. Fan, Nat Photon **6**, 782 (2012).
- [22] M. C. Rechtsman, J. M. Zeuner, Y. Plotnik, Y. Lumer, D. Podolsky, F. Dreisow, S. Nolte, M. Segev, and A. Szameit, Nature **496**, 196 (2013).
- [23] C. L. Kane and E. J. Mele, Physical Review Letters **95**, 146802 (2005).
- [24] B. A. Bernevig and S.-C. Zhang, Physical Review Letters **96**, 106802 (2006).
- [25] B. A. Bernevig, T. L. Hughes, and S.-C. Zhang, Science **314**, 1757 (2006).
- [26] M. König, S. Wiedmann, C. Brüne, A. Roth, H. Buhmann, L. W. Molenkamp, X.-L. Qi, and S.-C. Zhang, Science **318**, 766 (2007).
- [27] A. B. Khanikaev, S. Hossein Mousavi, W.-K. Tse, M. Kargarian, A. H. MacDonald, and G. Shvets, Nat Mater **12**, 233 (2013).
- [28] M. Hafezi, E. A. Demler, M. D. Lukin, and J. M. Taylor, Nat Phys **7**, 907 (2011).
- [29] L. Fu, Physical Review Letters **106**, 106802 (2011).
- [30] L.-H. Wu and X. Hu, Physical Review Letters **114**, 223901 (2015).

一维光子晶体中拓扑量及其界面态的研究

- [31] H. Weyl, *Zeitschr. Phys.* **56**, 330 (1929).
- [32] S. M. Young, S. Zaheer, J. C. Y. Teo, C. L. Kane, E. J. Mele, and A. M. Rappe, *Physical Review Letters* **108**, 140405 (2012).
- [33] Z. J. Wang, Y. Sun, X. Q. Chen, C. Franchini, G. Xu, H. M. Weng, X. Dai, and Z. Fang, *Physical Review B* **85**, 195320 (2012).
- [34] A. C. Potter, I. Kimchi, and A. Vishwanath, *Nature Communications* **5**, 5161 (2014).
- [35] Z. K. Liu *et al.*, *Nat Mater* **13**, 677 (2014).
- [36] M. Neupane *et al.*, *Nature Communications* **5**, 3786 (2014).
- [37] S. Borisenko, Q. Gibson, D. Evtushinsky, V. Zabolotnyy, B. Büchner, and R. J. Cava, *Physical Review Letters* **113**, 027603 (2014).
- [38] Z. K. Liu *et al.*, *Science* **343**, 864 (2014).
- [39] J. Xiong, S. K. Kushwaha, T. Liang, J. W. Krizan, M. Hirschberger, W. Wang, R. J. Cava, and N. P. Ong, *Science* **350**, 413 (2015).
- [40] P. Tang, Q. Zhou, G. Xu, and S.-C. Zhang, *Nat Phys* **12**, 1100 (2016).
- [41] B. J. Wieder, Y. Kim, A. M. Rappe, and C. L. Kane, *Physical Review Letters* **116**, 186402 (2016).
- [42] C. Zhang *et al.*, *Nature Communications* **8**, 13741 (2017).
- [43] A. A. Burkov and L. Balents, *Phys. Rev. Lett.* **107**, 127205 (2011).
- [44] C. Fang, M. J. Gilbert, X. Dai, and B. A. Bernevig, *Phys. Rev. Lett.* **108**, 266802 (2012).
- [45] P. Hosur and X. Qi, *Comp. Rend. Phys.* **14**, 857 (2013).
- [46] S.-Y. Xu *et al.*, *Science* **349**, 613 (2015).
- [47] S.-Y. Xu *et al.*, *Science Advances* **1** (2015).
- [48] B. Q. Lv *et al.*, *Phys. Rev. X* **5**, 031013 (2015).
- [49] A. A. Soluyanov, D. Gresch, Z. Wang, Q. Wu, M. Troyer, X. Dai, and B. A. Bernevig, *Nature* **527**, 495 (2015).
- [50] S.-Y. Xu *et al.*, *Nat. Phys.* **11**, 748 (2015).
- [51] B. Q. Lv *et al.*, *Nat Phys* **11**, 724 (2015).
- [52] L. X. Yang *et al.*, *Nat Phys* **11**, 728 (2015).
- [53] C. Shekhar *et al.*, *Nat Phys* **11**, 645 (2015).
- [54] L. Huang *et al.*, *Nat. Mater* **advance online publication** (2016).
- [55] T.-R. Chang *et al.*, *Nat. Commun.* **7**, 10639 (2016).
- [56] K. Deng *et al.*, *Nat. Phys.* <http://dx.doi.org/10.1038/nphys3871> (2016).
- [57] J. Ruan, S.-K. Jian, H. Yao, H. Zhang, S.-C. Zhang, and D. Xing, *Nature Communications* **7**, 11136 (2016).
- [58] N. Xu *et al.*, *Nature Communications* **7**, 11006 (2016).
- [59] F. Arnold *et al.*, *Nature Communications* **7**, 11615 (2016).
- [60] J. Hu *et al.*, *Scientific Reports* **6**, 18674 (2016).
- [61] C. Bai, Y. Yang, and K. Chang, *Scientific Reports* **6**, 21283 (2016).
- [62] 翁. 戴希, 方忠, *物理* **44**, 253 (2015).
- [63] W. M. H. Natori, E. C. Andrade, E. Miranda, and R. G. Pereira, *Physical Review Letters* **117**,

一维光子晶体中拓扑量及其界面态的研究

017204 (2016).

[64] Z. Yan, P.-W. Huang, and Z. Wang, *Physical Review B* **93**, 085138 (2016).

[65] T. Micklitz and M. R. Norman, *Physical Review B* **95**, 024508 (2017).

[66] L.-K. Lim and R. Moessner, *Physical Review Letters* **118**, 016401 (2017).

[67] Q. Xu, R. Yu, Z. Fang, X. Dai, and H. Weng, *Physical Review B* **95**, 045136 (2017).

[68] C. Fang, Y. Chen, H.-Y. Kee, and L. Fu, *Phys. Rev. B* **92**, 081201 (2015).

[69] G. Bian *et al.*, *Nature Communications* **7**, 10556 (2016).

[70] C. Fang, L. Lu, J. Liu, and L. Fu, *Nat. Phys.* **12**, 936 (2016).

[71] L. Lu, L. Fu, J. D. Joannopoulos, and M. Soljacic, *Nat. Photon* **7**, 294 (2013).

[72] L. Lu, Z. Wang, D. Ye, L. Ran, L. Fu, J. D. Joannopoulos, and M. Soljačić, *Science* **349**, 622 (2015).

[73] W.-J. Chen, M. Xiao, and C. T. Chan, *Nat. Commun.* **7**, 13038 (2016).

[74] M. Xiao, Q. Lin, and S. Fan, *Phys. Rev. Lett.* **117**, 057401 (2016).

[75] M.-L. Chang, M. Xiao, W.-J. Chen, and C. T. Chan, in *Preprint at <https://arxiv.org/abs/1607.02918>* (2016).

[76] L. Wang, S.-K. Jian, and H. Yao, *Phys Rev A* **93**, 061801 (2016).

[77] A. Slobozhanyuk, S. H. Mousavi, X. Ni, D. Smirnova, Y. S. Kivshar, and A. B. Khanikaev, *Nat Photon* **11**, 130 (2017).

第二章 一维光子晶体中 Zak 相位的测量及其界面态

2.1 引言

伴随着拓扑绝缘体[1,2]的发现, 拓扑量在现代物理学中扮演着越来越重要的角色, 帮助研究者们去深入了解材料的性质。拓扑概念的应用在凝聚态物理中取得了前所未有的成功, 包括完美地解释了霍尔效应, 量子霍尔效应[3,4], 和量子自旋霍尔效应等, 研究者们也将拓扑概念逐步引入到经典波体系中, 包括光学[5-18]和声学[19]等, 成功的实现了许多新奇的现象, 例如光子自旋霍尔效应, 无反射单向传输以及克莱因隧穿等, 具有广阔的应用前景。

Berry 相位[20]则被用来表征体系中的的拓扑量, 它被定义为:

$$\gamma_n = i \oint_C d\mathbf{R} \cdot \langle n(\mathbf{R}) | \frac{\partial}{\partial \mathbf{R}} | n(\mathbf{R}) \rangle \quad (2.1)$$

其中 C 是参数空间 R 中取得一个回路, 所以 Berry 相位是在回路上演化所累积的相位, 我们也称之为几何相位。由于拓扑量是一个抽象的量, 因此在实验上测量比较困难。为了解决这个问题, 研究者提出了许多解决方案, 包括冷原子体系[21-23], 声学体系[19]以及光学体系 [24-30]。

而在一维体系中, Zak 相位[31]则被用来计算体系的拓扑量。Zak 相位是由 J. Zak 在 1988 年提出, 用来计算一维布洛赫体系中能带的拓扑量, 并且指出, 如果体系具有对称性, Zak 相位将会被量子化, 其取值为 0 或 π 。由于 Zak 相位是基于本征波函数在参数空间的积分, 因此很难在实验中测量。直到 2013 年, 德国的研究组第一次在冷原子体系[21] 测量到了 Zak 相位。利用光学超晶格对冷原子的影响, 成功构造了一维双原子链的哈密顿量(SSH 模型)。然后利用布洛赫振荡以及拉姆齐干涉, 成功测得该体系下 Zak 相位的取值为 0 或 π 。2015 年, 香港陈子亭教授研究组则在声学体系测得了 Zak 相位[19]。通过设计声学谐振腔, 并且将其排列成声学双原子链, 来构建 SSH 模型。由于声波的波长为毫米量级, 故在实

一维光子晶体中拓扑量及其界面态的研究

验上可以测量其本征波函数,从而得到该体系的 Zak 相位。除此之外,该研究组也通过测量声子晶体的反射相位测得了 Zak 相位。而对于光学体系,由于光子波长在秘密良机,因此很难在实验中测量得到 Zak 相位。

在本章节中,我们在实验上利用界面态测量了一维光子晶体的 Zak 相位。通过引入超构表面,我们成功地对界面态进行调控,包括激发波长,界面态偏振态等。

一维光子晶体中拓扑量及其界面态的研究

2.2 一维光子晶体中的 Zak 相位及其反射相位

一维光子晶体通常是由不同的材料周期性的堆栈形成的，因此最简单的形式为两种材料的堆栈，其结构如图 2.1 所示。为了计算光子晶体色散，我们采用转移矩阵的方式。

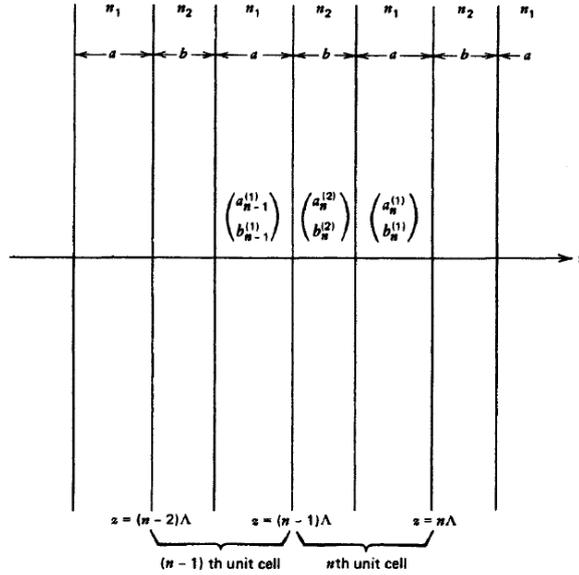


图 2.1 一维光子晶体结构示意图

在每一层介质中，电场可以表示成向前传播的波和向后传播的波的叠加，而这两个波前面系数，包括振幅与相位可以构成一个列向量，因此，在某一层介质中的电场可以用一个列向量来表示：

$$\begin{pmatrix} a_n^\alpha \\ b_n^\alpha \end{pmatrix}, \quad \alpha = 1, 2. \quad (2.2)$$

那么，在该层中电场可以表示成

$$E(y, z) = \left[a_n^\alpha e^{-ik_\alpha(z-n\Lambda)} + b_n^\alpha e^{ik_\alpha(z-n\Lambda)} \right] e^{-ik_y y} \quad (2.3)$$

其中

$$k_\alpha = \left[\left(\frac{n_\alpha \omega}{c} \right)^2 - k_y^2 \right]^{1/2} \quad (2.4)$$

这些列向量并非是相互独立的，他们通过边界条件而耦合在一起。现在如果我们

一维光子晶体中拓扑量及其界面态的研究

考虑 TE 模式（电场垂直于 yz 平面），由于在界面上必须满足 E_x 和 H_y 连续，例如在 $z = (n-1)\Lambda$ 和 $z = (n-1)\Lambda + b$ 这两个界面，我们可以得到：

$$\begin{aligned}
 a_{n-1} + b_{n-1} &= e^{ik_{2z}\Lambda} c_n + e^{-ik_{2z}\Lambda} d_n \\
 ik_{1z}(a_{n-1} - b_{n-1}) &= ik_{2z}(e^{ik_{2z}\Lambda} c_n - e^{-ik_{2z}\Lambda} d_n) \\
 e^{ik_{2z}a} c_n + e^{-ik_{2z}a} d_n &= e^{ik_{1z}a} a_n + e^{-ik_{1z}a} b_n \\
 ik_{2z}(e^{ik_{2z}a} c_n - e^{-ik_{2z}a} d_n) &= ik_{1z}(e^{ik_{1z}a} a_n + e^{-ik_{1z}a} b_n)
 \end{aligned} \tag{2.5}$$

通过简化我们可以得到如下的矩阵形式：

$$\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_{n-1} \\ b_{n-1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{ik_{2z}\Lambda} & e^{-ik_{2z}\Lambda} \\ \frac{k_{1z}}{k_{2z}} e^{ik_{2z}\Lambda} & -\frac{k_{1z}}{k_{2z}} e^{-ik_{2z}\Lambda} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_n \\ d_n \end{pmatrix} \tag{2.6}$$

$$\begin{pmatrix} e^{ik_{2z}a} & e^{-ik_{2z}a} \\ e^{ik_{2z}a} & -e^{-ik_{2z}a} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_n \\ d_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{ik_{1z}a} & e^{-ik_{1z}a} \\ \frac{k_{1z}}{k_{2z}} e^{ik_{1z}a} & -\frac{k_{1z}}{k_{2z}} e^{-ik_{1z}a} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_n \\ b_n \end{pmatrix} \tag{2.7}$$

其中

$$\begin{aligned}
 a_n &= a_n^1 \\
 b_n &= b_n^1 \\
 c_n &= a_n^2 \\
 d_n &= b_n^2
 \end{aligned} \tag{2.8}$$

将公式 2.7 带入 2.6，消除 c_n 和 d_n 之后，我们可以得到：

$$\begin{pmatrix} a_{n-1} \\ b_{n-1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A & B \\ C & D \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_n \\ b_n \end{pmatrix} \tag{2.9}$$

其中，

$$\begin{aligned}
 A &= e^{ik_{1z}a} \left[\cos(k_{2z}b) + \frac{i}{2} \left(\frac{k_{2z}}{k_{1z}} + \frac{k_{1z}}{k_{2z}} \right) \sin(k_{2z}b) \right] \\
 B &= e^{-ik_{1z}a} \left[\frac{i}{2} \left(\frac{k_{2z}}{k_{1z}} - \frac{k_{1z}}{k_{2z}} \right) \sin(k_{2z}b) \right] \\
 C &= e^{ik_{1z}a} \left[\frac{-i}{2} \left(\frac{k_{2z}}{k_{1z}} - \frac{k_{1z}}{k_{2z}} \right) \sin(k_{2z}b) \right] \\
 D &= e^{-ik_{1z}a} \left[\cos(k_{2z}b) - \frac{i}{2} \left(\frac{k_{2z}}{k_{1z}} + \frac{k_{1z}}{k_{2z}} \right) \sin(k_{2z}b) \right]
 \end{aligned} \tag{2.10}$$

一维光子晶体中拓扑量及其界面态的研究

公式 2.9 中的转移矩阵将第 $n-1$ 个原胞中第一层中的列向量联系到第 n 个原胞中第一层中的列向量，因此该矩阵为幺模矩阵，即满足

$$AD - BC = 1 \quad (2.11)$$

对于 TM 模式，我们可以得到

$$\begin{aligned} A_{TM} &= e^{ik_1 a} \left[\cos(k_2 b) + \frac{i}{2} \left(\frac{n_1^2 k_{2z}}{n_2^2 k_{1z}} + \frac{n_2^2 k_{1z}}{n_1^2 k_{2z}} \right) \sin(k_2 b) \right] \\ B_{TM} &= e^{-ik_1 a} \left[\frac{i}{2} \left(\frac{n_2^2 k_{1z}}{n_1^2 k_{2z}} - \frac{n_1^2 k_{2z}}{n_2^2 k_{1z}} \right) \sin(k_2 b) \right] \\ C_{TM} &= e^{ik_1 a} \left[\frac{-i}{2} \left(\frac{n_2^2 k_{1z}}{n_1^2 k_{2z}} - \frac{n_1^2 k_{2z}}{n_2^2 k_{1z}} \right) \sin(k_2 b) \right] \\ D_{TM} &= e^{-ik_1 a} \left[\cos(k_2 b) - \frac{i}{2} \left(\frac{n_2^2 k_{1z}}{n_1^2 k_{2z}} + \frac{n_1^2 k_{2z}}{n_2^2 k_{1z}} \right) \sin(k_2 b) \right] \end{aligned} \quad (2.12)$$

当我们考虑光子晶体时，由于周期数是无穷大，因此在第 $n-1$ 个原胞中的场分布与第 n 个原胞中的波函数只会相差一个系数（相位项），即：

$$\begin{pmatrix} a_n \\ b_n \end{pmatrix} = e^{-ik\Lambda} \begin{pmatrix} a_{n-1} \\ b_{n-1} \end{pmatrix} \quad (2.13)$$

将公式 2.9 带入 2.13 式，我们可以得到

$$\begin{pmatrix} A & B \\ C & D \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_n \\ b_n \end{pmatrix} = e^{ik\Lambda} \begin{pmatrix} a_n \\ b_n \end{pmatrix} \quad (2.14)$$

其中 k 为布洛赫波矢，通过求解公式 2.14，

$$\begin{vmatrix} A - e^{ik\Lambda} & B \\ C & D - e^{ik\Lambda} \end{vmatrix} = 0 \quad (2.15)$$

最终可以得到解的形式为

$$e^{ik\Lambda} = \frac{1}{2}(A+D) \pm \left\{ \frac{1}{2}(A+D)^2 - 1 \right\}^{-1/2} \quad (2.16)$$

进一步化解可以得到

$$\cos(k\Lambda) = \cos(k_1 a) \cos(k_2 b) - \frac{1}{2} \left(\frac{n_2}{n_1} + \frac{n_1}{n_2} \right) \sin(k_1 a) \sin(k_2 b) \quad (2.17)$$

而公式 2.14 的本征矢为

一维光子晶体中拓扑量及其界面态的研究

$$\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} B \\ e^{ik\Lambda} - A \end{pmatrix} \quad (2.18)$$

因此原胞中的电场分布为：

$$E(z) = Be^{ik_a(z+d_a/2)} + (e^{ik\Lambda} - A)e^{-ik_a(z+d_a/2)} \quad (2.19)$$

相应的磁场分布为：

$$H(z) = \frac{k_a}{w\mu_a} \left[Be^{ik_a(z+d_a/2)} - (e^{ik\Lambda} - A)e^{-ik_a(z+d_a/2)} \right] \quad (2.20)$$

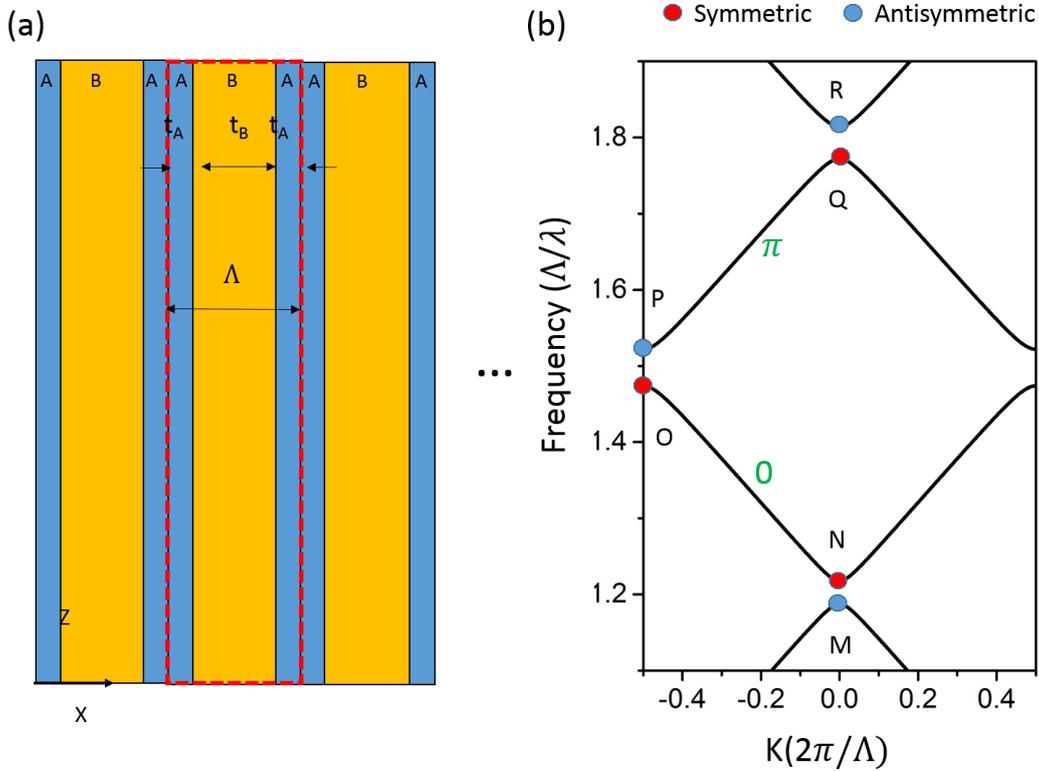


图 2.2a，光子晶体结构示意图，红色虚线框内为原胞。图 2.2b，一维光子晶体色散，红色和蓝色圆圈代表 6 个带边态本征函数的对称性和反对称性。

正如 2.1 节中所说，如果一维光子晶体体系具有镜面对称性，则该体系的 Zak 相位的取值将会被量子化，即 0 或 π ，因此我们选取了如图 2.2a 所示的原胞，使一维光子晶体具有对称性。其中蓝色代表二氧化铪，其折射率在工作频率波段 $n_{HfO_2} = 2$ ；黄色代表二氧化硅，其折射率为 $n_{SiO_2} = 1.46$ ，其中结构参数 $t_A = 177.6nm$

一维光子晶体中拓扑量及其界面态的研究

和 $t_B = 579.8\text{nm}$ 。通过公式 1.17，我们可以计算出该光子晶体的色散如图 2.2b 所示，在本节，我们只考虑正入射情况，即 $k_y=0$ 。

对于一维光子晶体，其 Zak 相位定义为：

$$\theta_n^{\text{Zak}} = \int_{-\pi/\Lambda}^{\pi/\Lambda} \left[i \int_{\text{unit cell}} dz \varepsilon(z) u_{n,q}^*(z) \partial_q u_{n,q}(z) \right] dq \quad (2.21)$$

其中 $\varepsilon(z)$ 为介电常数函数， $u_{n,q}$ 为第 n 阶能带上布洛赫动量为 q 的本征函数。利

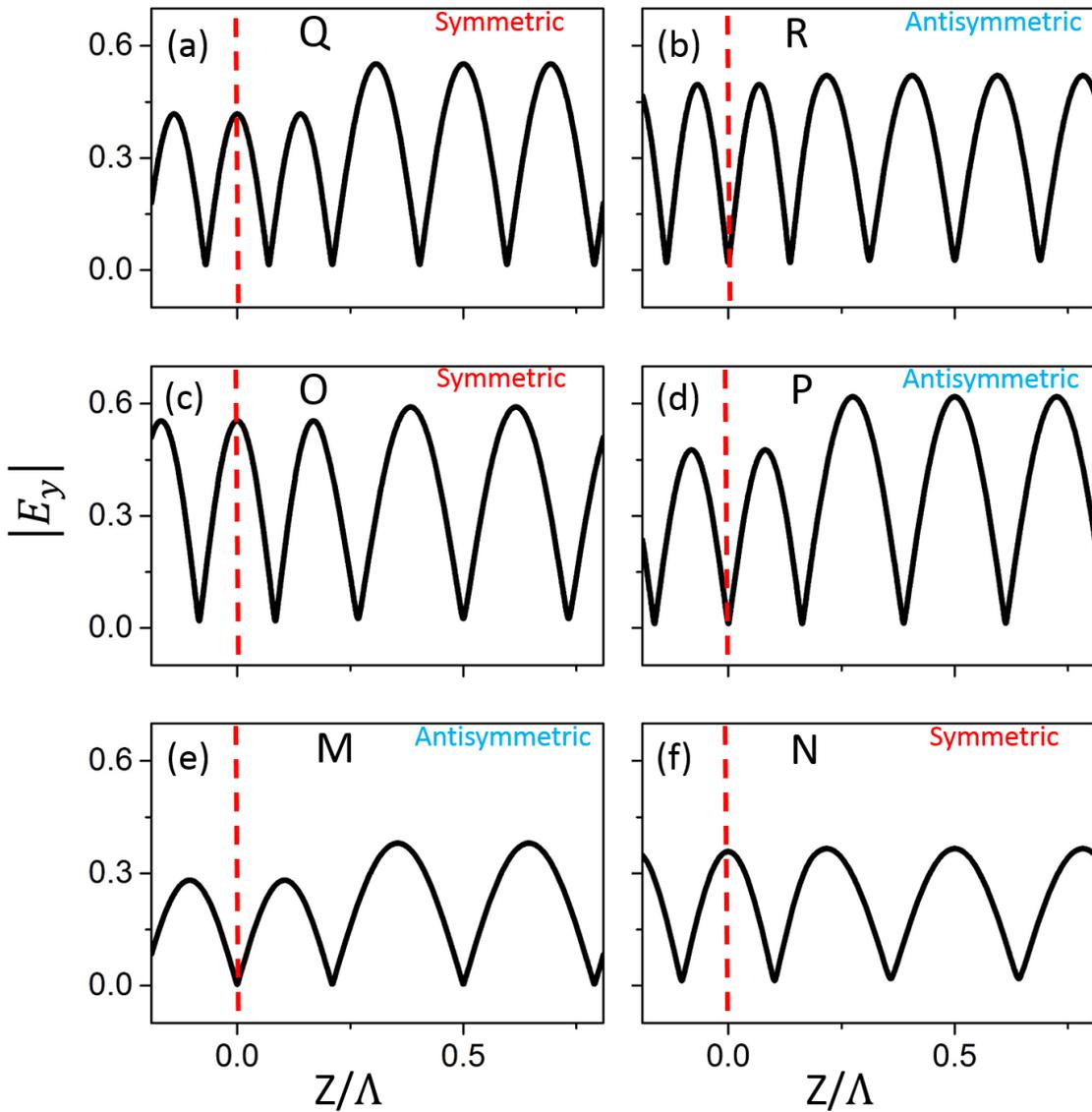


图 2.3，a-f 分别对应图 2.2b 中 M,N,O,P,Q,R 这六个带边态的本征电场分布，虚线为两个原胞之间的界面。

一维光子晶体中拓扑量及其界面态的研究

用公式 2.19 式，我们可以求解出每条能带对应的 Zak 相位，图 2.2b 中绿色数字为对应能带的 Zak 相位。

尽管利用公式 1.19 可以计算一维光子晶体的 Zak 相位，但它需要求解整条能带上每个态对应的本征波函数，而这在实验上是几乎不可能测量得到的，因此我们需要寻求另一种方案来测量 Zak 相位。2014 年，香港科技大学陈子亭教授课题组在 *Phys. Rev. X* 上发表了一篇理论工作，探讨了一维光子晶体中 Zak 相位与禁带反射相位的关系，这给予我们实验测量 Zak 相位以可能。

众所周知，一维光子晶体除了支持传播的能带之外，还存在一些禁带，对于处在禁带中的光是无法传播的，因此当光从空气（或介质）入射到光子晶体界面时，将会被全反射，这个性质被广泛的用于构造激光谐振腔。这些禁带与能带的交点我们成为带边态，在图 2.2b 中用 M, N, O, P, Q, R 来表示，根据公式 1.18，我们可以求解出能带上的本征电场分布。图 2.3 中画出了 M, N, O, P, Q, R 这六个带边态的本征电场分布。由于光子晶体的原胞具有对称性，因此其本征电场相应的也会存在对称性，因此我们用红色（蓝色）标注了其对称（反对称）[32]。如果仅考虑某一条能带，它必然存在两个带边态，比如 M-O 或 P-Q。进一步的理论分析表明，某一条能带上的 Zak 相位与其带边态的对称性具有直接的关系。简而言之，如果该能带上两个带边态具有相同的对称性，则其 Zak 相位为 0，例如 N-O，其本征电场分布均为对称分布，故 Zak 相位为 0；反之，如果两个带边态具有相反的对称性，则 Zak 相位为 π ，这与直接利用公式 1.19 直接计算的结果相同。当 Zak 相位为非 0 值时，往往是在参数空间存在一个或多个奇点；而在一维光子晶体中，如果能带上本征函数的对称性由对称（反对称）变化至反对称（对称），则在能带中必定存在一个相变点，这时能带的 Zak 相位必为 π ，这也就是我们常称它为几何相位的原因，它往往联系着体系本征函数的某种对称性。

对于禁带而言，则是处于上下两条能带的带边态之间，如图 2.2b 中 M-N, O-P 和 Q-R。由于上下能带的本征波函数需要满足相互正交的关系，因此禁带两边的带边态必然具有不同的对称性，对应的禁带类型则分为两种类型，即奇-偶组合（低能

一维光子晶体中拓扑量及其界面态的研究

带边态本征波函数为奇函数，高能带边态本征波函数为偶函数）和偶-奇组合（低能带边态本征波函数为偶函数，高能带边态本征波函数为奇函数）。而这两种组合将决定光子晶体禁带中反射相位。

由于处在禁带中的光波无法在光子晶体中传播，因此当考虑空气中的光入射到半无穷大的光子晶体表面时，将会被全反射，因此反射系数可以写成 $r = e^{i\phi}$ ，其中 ϕ 为反射相位。由于光子晶体为两种材料交替堆叠的复合结构，无法利用折射率来计算反射系数，因此我们采用表面阻抗来计算禁带中的反射相位，其表达式如下所示：

$$r = \frac{Z_{PC} - Z_0}{Z_{PC} + Z_0} \quad (2.22)$$

其中 Z_{PC} 为光子晶体表面阻抗，而 Z_0 则为真空阻抗，为一常数值 $Z_0 = \sqrt{\frac{\mu_0}{\epsilon_0}}$ ， ϵ_0 和 μ_0 分别为真空介电常数和磁导率。而光子晶体的表面阻抗则有如下定义：

$$Z_{PC} = \frac{E_{(z=0)}}{H_{(z=0)}} \quad (2.23)$$

此处 $E_{(z=0)}$ 和 $H_{(z=0)}$ 表示光子晶体内与空气交界面位置的电场和磁场。

一维光子晶体中拓扑量及其界面态的研究

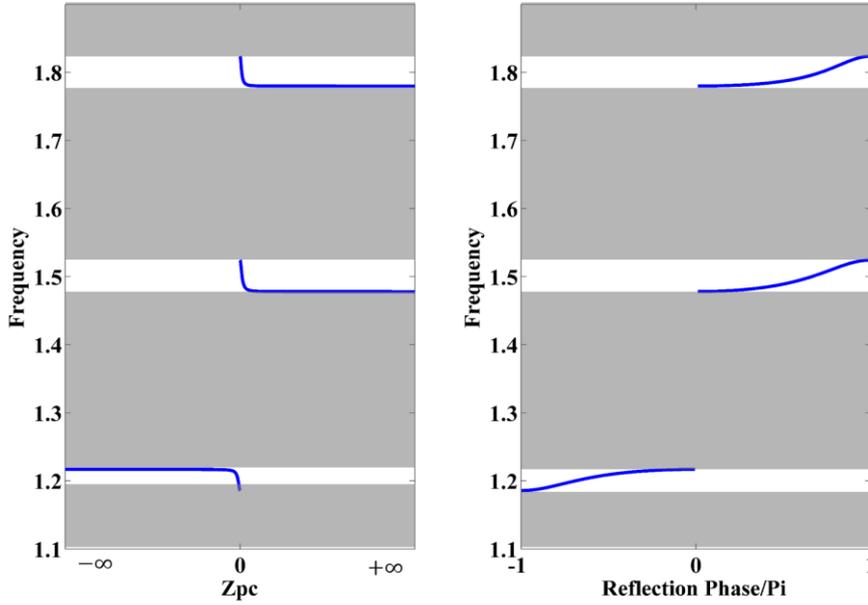


图 2.4a, 蓝线为光子晶体禁带中的阻抗的虚部。b, 蓝线为光子晶体禁带中的反射相位, 灰色区域为导带区域。

根据公式 2.3 和公式 2.18, 我们可以得到光子晶体的表面阻抗为:

$$Z_{PC} = \frac{w\mu_a}{k_a} \frac{Be^{ik_a(z+d_a/2)} + (e^{ik\Lambda} - A)e^{-ik_a(z+d_a/2)}}{Be^{ik_a(z+d_a/2)} - (e^{ik\Lambda} - A)e^{-ik_a(z+d_a/2)}} \quad (2.24)$$

如图 2.24a 所示, 我们画出了禁带中阻抗的虚部 (蓝线), 为频率的单调递减函数, 灰色区域则为光子晶体导带。对于禁带两边的带边态, 当其本征电场为奇对称分布时, $E_{(z=0)} = 0$, $H_{(z=0)}$ 此时取极大值, 因此 $|Z_{PC}| = 0$; 当其本征电场为偶对称分布时, $E_{(z=0)}$ 取极大值, $H_{(z=0)} = 0$, 因此 $|Z_{PC}| \rightarrow +\infty$ 。

一维光子晶体中拓扑量及其界面态的研究

根据公式 1.23，我们可以求解光子晶体禁带中的反射相位，如图 2.4b 所示。当带边态为奇对称时， $|Z_{PC}|=0$ ，此时反射相位对应 $\phi = \pm\pi$ ；当带边态为偶对称时， $|Z_{PC}| \rightarrow +\infty$ ，此时反射相位对应 $\phi = 0$ 。由于禁带中阻抗为频率的单调递减函数，所以反射相位为频率的单调递增函数。若禁带为奇-偶组合，则反射相位区间为 $[0, \pi)$ ，即在禁带中反射相位符号始终为正；如近代组合为偶-奇组合，则反射相位区间为 $(-\pi, 0]$ ，即反射相位符号始终为负，如图 2.5 所示。

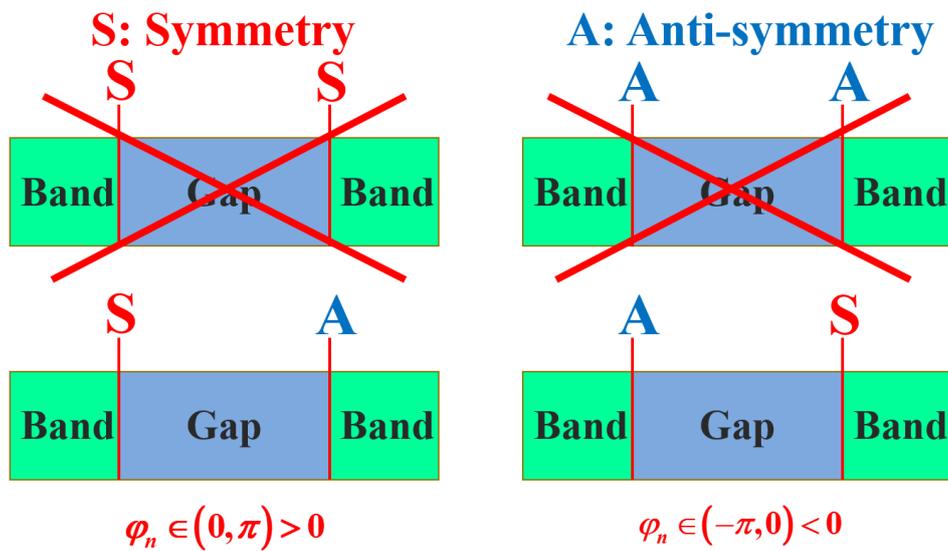


图 2.5 禁带的组合类型及其反射相位。偶-偶和奇-奇组合由于不满足正交条件，因此实际结构中不存在；而奇-偶和偶-奇组合分别对应反射符号为负和正。

尽管单个禁带的反射相位无法直接决定能带的 Zak 相位，但如果我们同时考虑第 n 阶能带相邻的第 $n-1$ 阶禁带和第 n 阶禁带，则可以确定能带的 Zak 相位。以图 2.2b 为例，如果考虑处在 N, O 这两个带边态之间的能带，由于该能带的 Zak 相位为 0，因此 N, O 这两个带边态的本征函数均为偶对称。考虑到在禁带两边的带边态具有相反的对称性，因此 M 和 P 这两个带边态的本征函数均为反对性，所以这条能带上下的两个禁带组合 M-N 和 O-P 分别为奇-偶和偶-奇组合，其反射相位区间分别为 $(-\pi, 0]$ 和 $[0, \pi)$ ，亦即这两个禁带的反射相位具有不同的符号；而对于处在 P, Q 这两个带边态之间的能带，其 Zak 相位为 π ，因此 P 和 Q 的本

一维光子晶体中拓扑量及其界面态的研究

征函数具有相反的对称性，而与之相邻的两个禁带组合 O-P 和 Q-R 均为偶-奇组合，所以其反射相位区间为 $[0, \pi)$ 。如图 2.6 所示，我们列举了所有的组合情况，如果对于第 n 阶能带，如果其相邻的第 $n-1$ 阶禁带和第 n 阶禁带的反射相位具有不同的符号，则该能带的 Zak 相位为 0 ；反之若相邻的禁带的反射相位具有相同的符号，则该能带的 Zak 相位为 π ，因此我们可以用如下公式求解 Zak 相位：

$$\exp(i\theta_n^{Zak}) = -\frac{\text{sgn}(\phi_n)}{\text{sgn}(\phi_{n-1})} \quad (2.25)$$

其中 θ_n^{Zak} 为第 n 阶能带的 Zak 相位， ϕ_n 和 ϕ_{n-1} 分别为第 n 和 $n-1$ 阶禁带的反射相位。

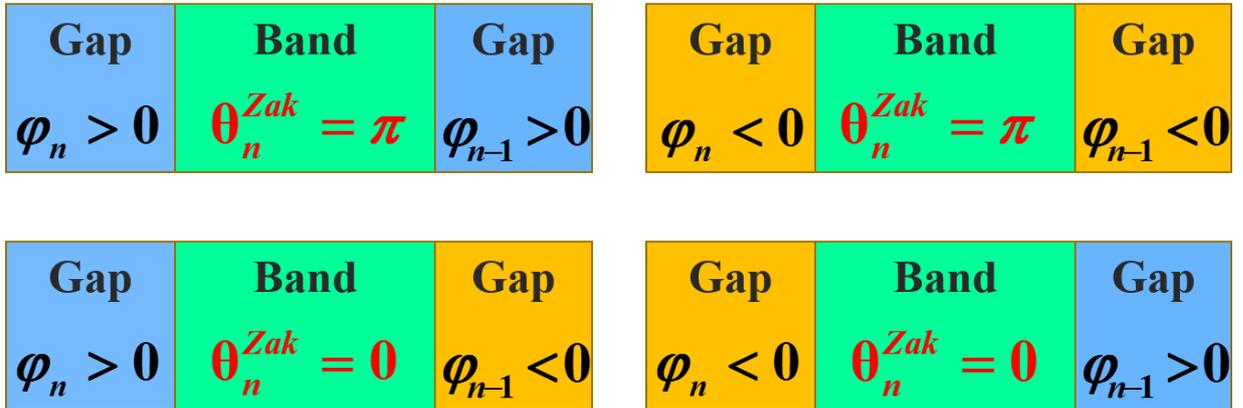


图 2.6，能带 Zak 相位与带边态的对称性以及禁带反射相位之间的关系。

一维光子晶体中拓扑量及其界面态的研究

2.3 界面态实现一维光子晶体 Zak 相位的测量

在 2.2 节中，我们理论上分析了一维光子晶体的 Zak 相位，带边态本征函数的对称性以及禁带中的反射相位等性质，并且推导了禁带的反射相位与 Zak 相位的关系。但考虑到实验上测量光波的反射相位，尤其是可见光波段，需要较为复杂的干涉装置[33].，因此我们采用构造界面态来测量光子晶体的 Zak 相位。

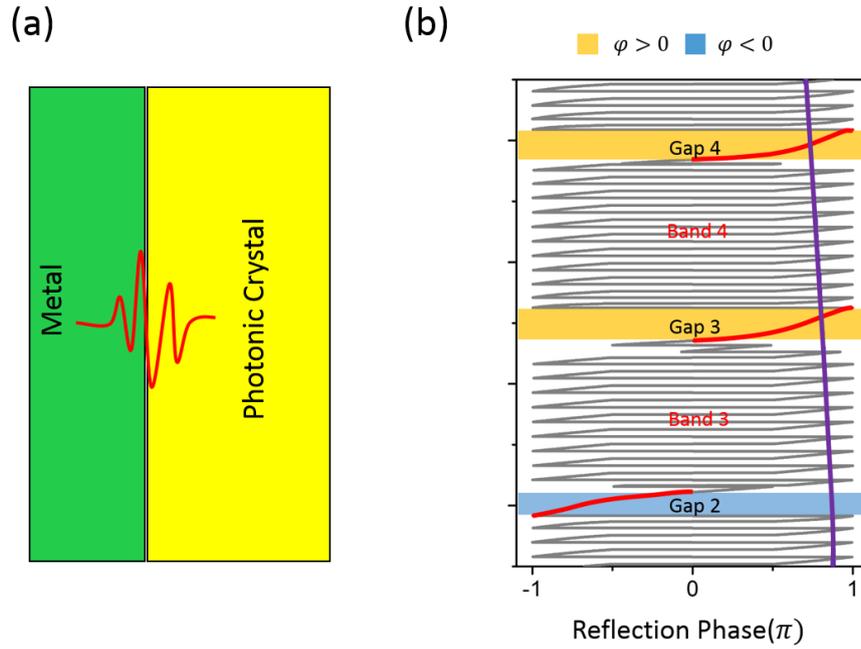


图 2.7,a 界面态图示，其能量局域在光子晶体与金属的界面处。b，灰色为光子晶体（10 个周期）的反射相位，红色标注了禁带区域的反射相位，而紫色实线为银膜的负的反射相位。

对于半无穷大的一维光子晶体，如果我们在光子晶体表面镀上一层金属银膜，则有可能在光子晶体禁带内形成界面态[34,35]。而界面态所需要满足的条件为：

$$\phi_{PC} + \phi_{Ag} = 0 \quad (2.26)$$

其中 ϕ_{PC} 为光子晶体的反射相位，而 ϕ_{Ag} 为银膜的反射相位。在图 2.7b 中，我们计算了有限周期数光子晶体的反射相位（银色实线），其结构参数与图 2.2 中光子晶体的参数相同，其周期数为 10。我们用红色标注了光子晶体禁带区域内的反射相位。而对于金属薄膜，因为其介电常数为负值，因此反射相位始终为负值。

一维光子晶体中拓扑量及其界面态的研究

由于实验中所用的金属膜为银膜，厚度为 50 纳米，我们也理论计算其反射相位，并在图 2.7b 中用紫色实线表示其负值。因此红色实线与紫色实线的交点也就是满足公式 1.26，即界面态存在的条件。

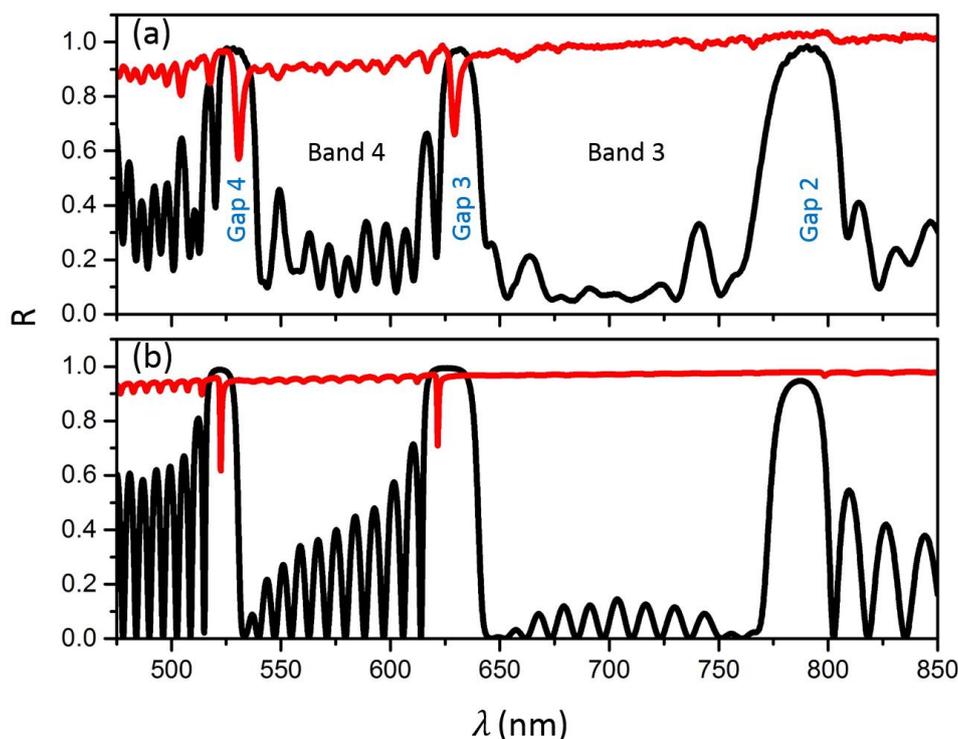


图 2.8, a 黑色实线为实验测量的光子晶体反射谱, 红线为镀上银膜之后的反射谱; b, 黑色和红色实线为相应的模拟结果。

由于银膜的反射相位 $\phi_{Ag} < 0$ ，因此若在禁带区域内存在界面态，我们可以反推出光子禁带的反射相位为正，反之若在禁带区域无边界态，则禁带的反射相位符号为负。根据 2.3 节的讨论，我们知道禁带的反射相位区间为 $(-\pi, 0]$ 或 $[0, \pi)$ ，因此对于反射相位符号为负的禁带，始终不存在界面态；而对于反射相位符号为正的禁带，总会找到某个频率，是的反射相位满足公式 2.26，即禁带中存在界面态。因此，光子晶体能带的 Zak 相位可以用界面态的有无来表示，即公式 2.25 可以改写成：

一维光子晶体中拓扑量及其界面态的研究

$$\theta_n^{\text{Zak}} = \begin{cases} 0 & V_{n-1} \neq V_n \\ \pi & V_{n-1} = V_n \end{cases} \quad (2.27)$$

其中 θ_n^{Zak} 为第 n 阶能带的 Zak 相位, V_{n-1} 和 V_n 分别为第 $n-1$ 和 n 阶禁带中界面态的有无, 若存在界面态, 则 $V_n = 1$, 反之 $V_n = 0$ 。如果相邻的两个禁带区域内同时存在界面态或都没有界面态, 则该能带的 Zak 相位为 π , 反之则为 0 。实验上, 我们用通过测量反射谱来确定界面态的存在。如图 2.8a 所示, 黑色实线为测量得到的光子晶体的反射谱, 由于禁带区域内光波无法传播, 因此会有很高的反射率; 对于导带区域, 由于光子晶体厚度有限, 因此会有许多法布里佩罗共振。当在光子晶体表面镀 50 纳米银膜之后, 测量得到的反射谱为图 2.8a 中的红色实线。我们可以清楚的看到在禁带区域, 出现了反射谷。这是由于界面态的存在, 在界面态位置具有很强的吸收, 因此表现在反射谱上为谷。图 2.8b 为相应结构的模拟得到的反射谱, 两者可以很好地吻合。根据公式 1.27, 我们可以直接得到第 3 阶能带的 Zak 相位为 0 , 第 4 能带的 Zak 相位为 π 。

一维光子晶体中拓扑量及其界面态的研究

2.4 超构表面对界面态的调控

由于界面态的存在取决于反射相位, 如果我们可以将银膜替换为超构表面[36-53], 则可以对界面态进行调控。在实验中, 我们采用亚波长的光栅阵列形成的超构表

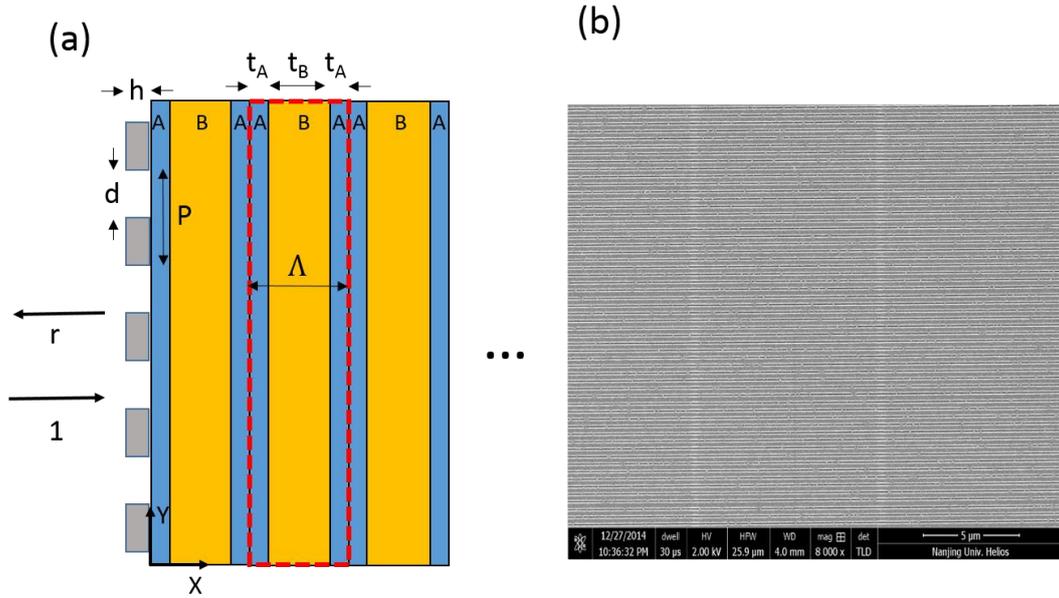


图 2.9, a, 超构表面/光子晶体复合结构示意图。b, 实验中使用 FIB 加工的超构表面形貌图。

面实现对界面态的偏振态和激发波长进行了调控。超构表面/光子晶体复合结构如图 2.9a 所示, 其中蓝色代表二氧化铪, 其折射率在工作频率波段 $n_{HfO_2} = 2$; 黄色代表二氧化硅, 其折射率为 $n_{SiO_2} = 1.46$, 其中结构参数 $t_A = 97.5nm$ 和 $t_B = 260nm$ 。光栅厚度 $h = 50nm$, 周期 $P = 300nm$, 宽度 d 为变量, 在实验中我们使用聚焦离子束加工了 5 个样品, 宽度 d 分别为 0,50,100,150 和 200 纳米, 其中一个样品的 SEM 图如图 2.9b。

由于超构表面具有各向异性, 因此我们分别计算了 Y 和 Z 偏振的反射相位, 结果如图 2.10 所示, a 图中, 黑色、红色、绿色、蓝色和青色分别为 $d=0,50,100,150$, 和 200nm 超构表面的 Z 偏振的负的反射相位, 分别与光子晶体反射相位 (橙色实线) 有交点, 因此存在边界态; 而对于 Z 偏振, 除了 $d=0$ 和 5nm 时, 与光子

一维光子晶体中拓扑量及其界面态的研究

晶体禁带的反射相位有交点，而随着 d 增加，则没有交点，亦即没有边界态。

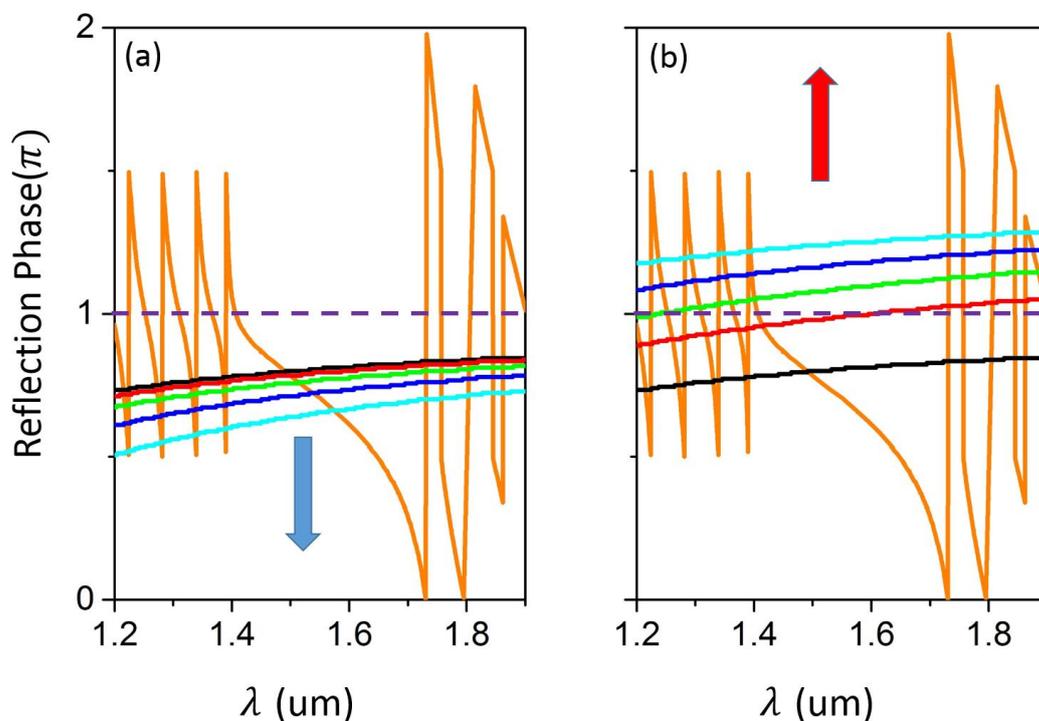


图 2.10, a, 橙色实线为光子晶体反射相位, 黑色、红色、绿色、蓝色和青色分别为 $d=0, 50, 100, 150,$ 和 200 纳米超构表面的 Z 偏振的负的反射相位。b, 为相应结构的 Y 偏振的反射相位。

在实验中，我们同样采用反射测量来确定边界态的存在，其实验结果如图 2.11a 和 b 所示，橙色实线为光子晶体的反射谱，其高反区域为禁带，黑色、红色、绿色、蓝色和青色分别为 $d=0, 50, 100, 150,$ 和 200 纳米时，超构表面/光子晶体测量得到的 Z (a) 偏振和 Y (b) 偏振反射谱。对于 Z 偏振，在禁带区域，均存在反射谷，代表边界态的存在，并且对应不同的波长；而对于 Y 偏振，只有在 $d=0$ 纳米，即银膜时存在边界态，对于其他结构，则不存在边界态。图 2.11c 和 d 分别为对应结构的模拟结果，均与实验符合的很好。那么，我们在实验中实现了利用超构表面对界面态进行调控，包括偏振态和激发波长等。

一维光子晶体中拓扑量及其界面态的研究

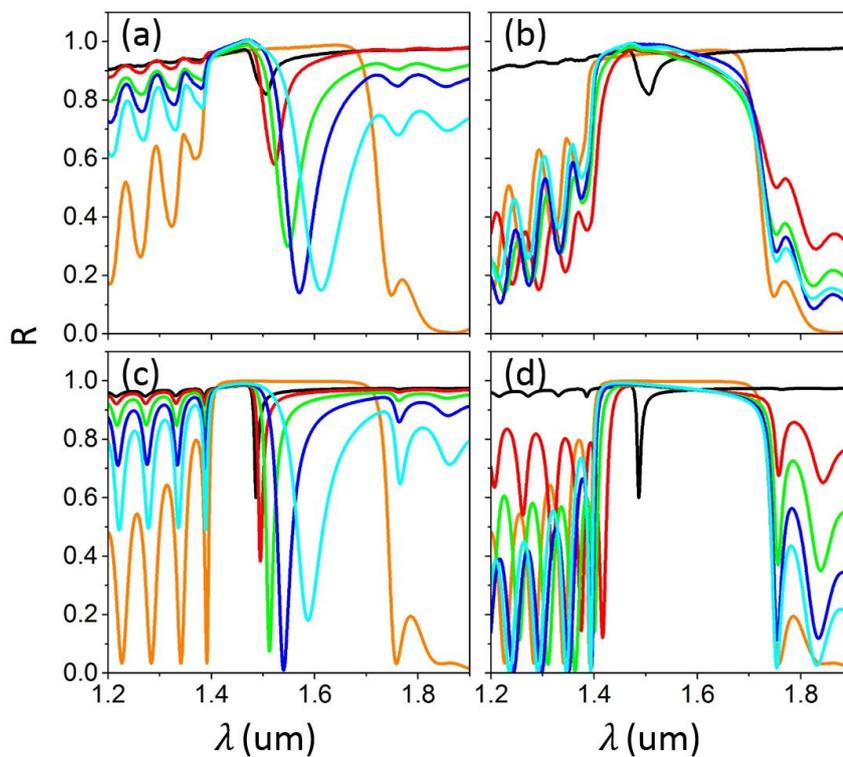


图 2.11, a 黑色、红色、绿色、蓝色和青色分别为 $d=0, 50, 100, 150,$ 和 200 纳米超构表面/光子晶体测量得到的 Z 偏振 (a) 和 Y 偏振 (b) 反射谱, 橙色实线为光子晶体的反射谱。c 和 d 分别为对应的模拟结果。

2.5 本章小结

本章节中，我们采用转移矩阵讨论了一维光子晶体的 Zak 相位，带边态本征函数的对称性以及禁带的反射相位等性质，并且建立了禁带反射相位与 Zak 相位之间的联系。为了测量 Zak 相位，我们引入边界态来实现在实验上测量 Zak 相位，并且顺利地测得了光子晶体的 Zak 相位。同时，我们引入了超构表面，来实现对界面态的调控，包括偏振态，激发波长等，使得界面态具有更广泛的应用。

一维光子晶体中拓扑量及其界面态的研究

参考文献

- [1] M. Z. Hasan and C. L. Kane, *Rev. Mod. Phys.* **82**, 3045 (2010).
- [2] D. Xiao, M. C. Chang, and Q. Niu, *Rev. Mod. Phys.* **82**, 1959 (2010).
- [3] F. D. M. Haldane, *Phys Rev Lett* **61**, 2015 (1988).
- [4] Y. Zhang, Y.-W. Tan, H. L. Stormer, and P. Kim, *Nature* **438**, 201 (2005).
- [5] F. D. M. Haldane and S. Raghu, *Phys. Rev. Lett.* **100**, 013904 (2008).
- [6] Z. Wang, Y. D. Chong, J. D. Joannopoulos, and M. Soljacic, *Phys. Rev. Lett.* **100**, 013905 (2008).
- [7] Z. Wang, Y. D. Chong, J. D. Joannopoulos, and M. Soljacic, *Nature (London)* **461**, 772 (2009).
- [8] Y. E. Kraus, Y. Lahini, Z. Ringel, M. Verbin, and O. Zilberberg, *Phys. Rev. Lett.* **109**, 106402 (2012).
- [9] M. Hafezi, E. A. Demler, M. D. Lukin, and J. M. Taylor, *Nat. Phys.* **7**, 907 (2011).
- [10] K. J. Fang, Z. F. Yu, and S. H. Fan, *Nat. Photonics* **6**, 782 (2012).
- [11] M. C. Rechtsman, J. M. Zeuner, Y. Plotnik, Y. Lumer, D. Podolsky, F. Dreisow, S. Nolte, M. Segev, and A. Szameit, *Nature (London)* **496**, 196 (2013).
- [12] A. B. Khanikaev, S. H. Mousavi, W. K. Tse, M. Kargarian, A. H. MacDonald, and G. Shvets, *Nat. Mater.* **12**, 233 (2013).
- [13] M. C. Rechtsman, J. M. Zeuner, A. Tunnermann, S. Nolte, M. Segev, and A. Szameit, *Nat. Photonics* **7**, 153 (2013).
- [14] L. Lu, L. Fu, J. D. Joannopoulos, and M. Soljacic, *Nat. Photonics* **7**, 294 (2013).
- [15] M. Hafezi, S. Mittal, J. Fan, A. Migdall, and J. M. Taylor, *Nat Photonics* **7**, 1001 (2013).
- [16] L. Lu, J. D. Joannopoulos, and M. Soljacic, *Nat. Photonics* **8**, 821 (2014).
- [17] W. J. Chen, S. J. Jiang, X. D. Chen, B. C. Zhu, L. Zhou, J. W. Dong, and C. T. Chan, *Nat. Commun.* **5**, 5782 (2014).
- [18] W. Tan, Y. Sun, H. Chen, and S. Q. Shen, *Sci. Rep.* **4**, 580 (2014).
- [19] M. Xiao, G. C. Ma, Z. Y. Yang, P. Sheng, Z. Q. Zhang, and C. T. Chan, *Nat. Phys.* **11**, 240 (2015).
- [20] M. V. Berry, *Proc. R. Soc. A* **392**, 45 (1984).
- [21] M. Atala, M. Aidelsburger, J. T. Barreiro, D. Abanin, T. Kitagawa, E. Demler, and I. Bloch, *Nat. Phys.* **9**, 795 (2013).
- [22] M. Aidelsburger, M. Lohse, C. Schweizer, M. Atala, J. T. Barreiro, S. Nascimbene, N. R. Cooper, I. Bloch, and N. Goldman, *Nat. Phys.* **11**, 162 (2015).
- [23] L. Duca, T. Li, M. Reitter, I. Bloch, M. Schleier-Smith, and U. Schneider, *Science* **347**, 288 (2015).
- [24] S. Longhi, *Opt. Lett.* **38**, 3716 (2013).
- [25] J. M. Zeuner, M. C. Rechtsman, Y. Plotnik, Y. Lumer, M. S. Rudner, M. Segev, and A. Szameit, *arXiv:1408.2191* (2014).
- [26] M. Hafezi, *Phys. Rev. Lett.* **112**, 210405 (2014).
- [27] C. E. Bardyn, S. D. Huber, and O. Zilberberg, *New J. Phys.* **16**, 123013 (2014).
- [28] W. C. Hu, J. C. Pillay, K. Wu, M. Pasek, P. P. Shum, and Y. D. Chong, *Phys. Rev. X* **5**, 011012 (2015).

一维光子晶体中拓扑量及其界面态的研究

- [29] A. V. Poshakinskiy, A. N. Poddubny, and M. Hafezi, *Phys. Rev. A* **91**, 043830 (2015).
- [30] W. S. Gao, M. Xiao, C. T. Chan, and W. Y. Tam, *Opt. Lett.* **40**, 5259 (2015).
- [31] J. Zak, *Phys. Rev. Lett.* **62**, 2747 (1989).
- [32] M. Xiao, Z. Q. Zhang, and C. T. Chan, *Phys. Rev. X* **4**, 130 (2014).
- [33] B. J. Vakoc, S. H. Yun, J. F. de Boer, G. J. Tearney, and B. E. Bouma, *Opt. Express* **13**, 5483 (2005).
- [34] M. Kaliteevski, I. Iorsh, S. Brand, R. A. Abram, J. M. Chamberlain, A. V. Kavokin, and I. A. Shelykh, *Phys. Rev. B* **76**, 165415 (2007).
- [35] K. Leosson *et al.*, *Opt. Lett.* **37**, 4026 (2012).
- [36] N. F. Yu, P. Genevet, M. A. Kats, F. Aieta, J. P. Tetienne, F. Capasso, and Z. Gaburro, *Science* **334**, 333 (2011).
- [37] X. Ni, N. K. Emani, A. V. Kildishev, A. Boltasseva, and V. M. Shalaev, *Science* **335**, 427 (2012).
- [38] A. Pors, O. Albrektsen, I. P. Radko, and S. I. Bozhevolnyi, *Sci Rep-Uk* **3**, 2155 (2013).
- [39] Y. Zhao and A. Alù, *Phys. Rev. B* **84**, 205428 (2011).
- [40] X. B. Yin, Z. L. Ye, J. Rho, Y. Wang, and X. Zhang, *Science* **339**, 1405 (2013).
- [41] G. Li, M. Kang, S. Chen, S. Zhang, E. Y.-B. Pun, K. W. Cheah, and J. Li, *Nano Lett.* **13**, 4148 (2013).
- [42] N. K. Grady, J. E. Heyes, D. R. Chowdhury, Y. Zeng, M. T. Reiten, A. K. Azad, A. J. Taylor, D. A. R. Dalvit, and H.-T. Chen, *Science* **340**, 1304 (2013).
- [43] C. Pfeiffer, C. Zhang, V. Ray, L. J. Guo, and A. Grbic, *Phys. Rev. Lett.* **113**, 023902 (2014).
- [44] X. Cai, J. Wang, M. J. Strain, B. Johnson-Morris, J. Zhu, M. Sorel, J. L. O'Brien, M. G. Thompson, and S. Yu, *Science* **338**, 363 (2012).
- [45] S. Sun, Q. He, S. Xiao, Q. Xu, X. Li, and L. Zhou, *Nat. Mater.* **11**, 426 (2012).
- [46] N. Shitrit, I. Yulevich, E. Maguid, D. Ozeri, D. Veksler, V. Kleiner, and E. Hasman, *Science* **340**, 724 (2013).
- [47] O. Yermakov, A. Ovcharenko, A. Bogdanov, I. Iorsh, and Y. S. Kivshar, in *ArXiv*2015), p. 07468v1.
- [48] L. L. Huang *et al.*, *Nat. Commun.* **4**, 2808 (2013).
- [49] W. T. Chen *et al.*, *Nano Lett.* **14**, 225 (2014).
- [50] M. Esfandyarpour, E. C. Garnett, Y. Cui, M. D. McGehee, and M. L. Brongersma, *Nat. Nanotechnol.* **9**, 542 (2014).
- [51] V. S. Asadchy, Y. Ra'di, J. Vehmas, and S. A. Tretyakov, *Phys. Rev. Lett.* **114**, 095503 (2015).
- [52] L. Zhang, T. Koschny, and C. M. Soukoulis, *Phys. Rev. B* **87**, 045101 (2013).
- [53] M. Decker, C. Kremers, A. Minovich, I. Staude, A. E. Miroshnichenko, D. Chigrin, D. N. Neshev, C. Jagadish, and Y. S. Kivshar, *Opt. Express* **21**, 8879 (2013).

第三章 参数空间的广义“外尔点”与“费米弧型界面态”

3.1 引言

在相对论量子场论中，存在三类基本费米子，分别为狄拉克费米子、马约拉纳费米子以及外尔费米子，其中后两者还未在自然界中观测到，吸引了物理学家们极大地兴趣。尽管这三类费米子作为基本粒子还未全被发现，但在凝聚态物理中，研究者在某些材料中发现了类似的三类准粒子，并且具有相同的描述。这些发现极大的推进了我们对于基本粒子的理解，并且由于其特殊的性质，使得其具有广泛的应用前景。在本章节中，我们主要讨论外尔费米子。

1929年，也就是狄拉克方程提出的第二年，Hermann Weyl[1]指出，如果考虑无质量粒子，狄拉克方程可以被分解为两个独立的方程，而这两个方程的解具有不同的手性。这些无质量，并且带有 $1/2$ 自旋的粒子我们称之为外尔费米子。然而80多年过去了，外尔费米子仍然还未在自然界中被发现。但理论分析指出，外尔费米子可以以低能量激子或准粒子的形式存在于晶体之中，这些晶体被称之为外尔半金属。2011年，南京大学万贤纲教授[2]和中科院物理研究所方忠教授课题组[3]分别在理论上指出烧绿石结构的铋氧化物和铁磁尖晶石有可能为外尔半金属。2015年年初，普林斯顿大学Hasan课题组[3]和中科院物理研究所丁洪教授课题组[4]率先分别独立利用角分辨光电子能谱在砷化铟中表面探测到外尔费米子的存在特征，即费米弧。在随后的这一两年间，许多相关的工作如雨后春笋般不断地涌现去探索外尔半金属的各类性质，包括费米弧[5-8]，手征输运[9]以及负磁阻[10, 11]等[12, 13]。同年，普林斯顿大学Andrei Bernevig课题组提出了第二类型外尔半金属[14]，并且预言了其特殊的性质，随后被实验所证实[15, 16]。

除了电子体系存在外尔费米子，在经典波体系依然可以构建出“外尔费米子”，我们也称之为外尔点。2013年，麻省理工学院Marin课题组率先在理论上提出利用光子晶体构造外尔点[17]。2015年，该课题成功的在实验上[18]测量到了外尔点存在的证据，该成果与Hasan课题组的成果同期发表在《science》上，引起了

一维光子晶体中拓扑量及其界面态的研究

极大地轰动。除了光波体系[19-24]，香港科技大学陈子亭课题组[25]和德克萨斯州立大学Alu课题组[26]分别提出了方案在理论上实现声学外尔点。

对于外尔点，其色散方程可以写成 $H = \sum_{i,j} k_i v_{i,j} \sigma_j$ [27]，其中 $v_{i,j}$ ， k_i 和 σ_i 分别为群速度、波矢和泡利矩阵。尽管外尔点是定义在动量空间，但我们依旧可以在广义空间构建外尔点，也就是用其他维度来代替波矢，例如2016年斯坦福大学Shanhui Fan课题组用谐振腔的频率代替其中一个波矢，理论上实现了在广义空间的外尔点[28]。与波矢空间局限在三维空间相比，广义空间由于可以引入人造维度构造[29-31]，因此可以拓展到高维度来研究更高维度系统的拓扑性质[32]等，最近引起了许多研究者的兴趣。

在本章节中我们将利用一维光子晶体在广义空间中实现外尔点，并且探究了光子晶体禁带中反射相位与外尔点之间的关系；其次考虑到存在于光子晶体与金属之间的界面态，可以得到类似于外尔半金属中的费米弧型边界态。

3.2 一维光子晶体实现广义空间外尔点

常见的一维光子晶体是由两种不同折射率的材料周期性的堆栈而成（如图 3.1a 所示），其原胞包含两层平板，由于其在—个维度具有周期平移不变性，因此布

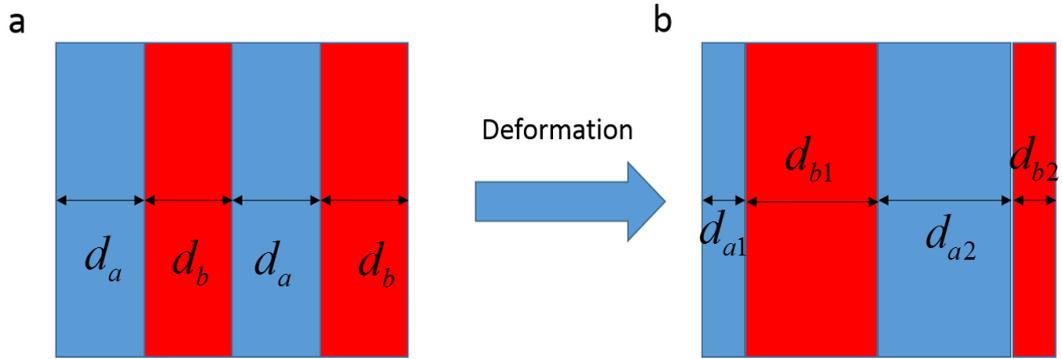


图 3.1，—维光子晶体结构示意图，(a) 原胞包含两层平板，(b) 原胞包含四层平板。

洛赫波矢空间为—维，其拓扑量可以由 Zak 相位表示。为了构造广义空间的外尔点，我们将光子晶体原胞设计成由四层平板构成，并且每层的厚度满足如下的关系式：

$$\begin{aligned}
 d_{a1} &= (1+p)d_a \\
 d_{b1} &= (1+q)d_b \\
 d_{a2} &= (1-p)d_a \\
 d_{b2} &= (1-q)d_b
 \end{aligned} \tag{3.1}$$

其中平板 A1 和 A2 为氧化铪，其折射率 $n_a=2.00$ ，厚度分别为 d_{a1} 和 d_{a2} ；而平板 B1 和 B2 为二氧化硅，其折射率 $n_b=1.45$ ，厚度分别为 d_{b1} 和 d_{b2} 。而 p 和 q 取值区间均为 $[-1,1]$ 。由于引入了 p 和 q 这两个结构参数，结合光子晶体的布洛赫波矢 k ，我们构造了 p - q - k 三维广义空间，如图 3.2a 所示，每一个 (p, q) 均可以确定—个光子晶体的具体参数。由于四层平板的厚度满足关系式 3.1，因此原胞的总厚度 $D=2(d_a + d_b)$ 和总光程 $L=2(n_a d_a + n_b d_b)$ 均为常数。

对于原胞包含两层平板的—维光子晶体 PC1，我们可以利用转移矩阵计算出其色散。在图 3.2b 中，我们计算了对应 $d_a = 97nm$ ， $d_b = 72nm$ 的色散（红色虚线）。如

一维光子晶体中拓扑量及其界面态的研究

果考虑四层平板的光子晶体 PC2，在 $(p, q) = (0,0)$ 位置，相当于包含了两个 PC1 的原胞，因此其色散（蓝色实线）将在 $k=0.25K$ ($K = 2\pi/(d_a + d_b)$) 出折叠而产生简并点。一旦 (p, q) 偏离 $(0,0)$ 位置，上下能带不再简并而产生带隙。由于一维光子晶体的简并点只能出现在 $k=0$ 或 $k=0.5k_0$ ($k_0 = \pi/(d_a + d_b)$) [33]，因此我们固定 $k=0$ ，在图 3.2c 中，我们画出了在该简并点附近的色散，其形状类似狄拉克锥，上下两条能带在 $(p, q) = (0,0)$ 位置简并，即外尔点。

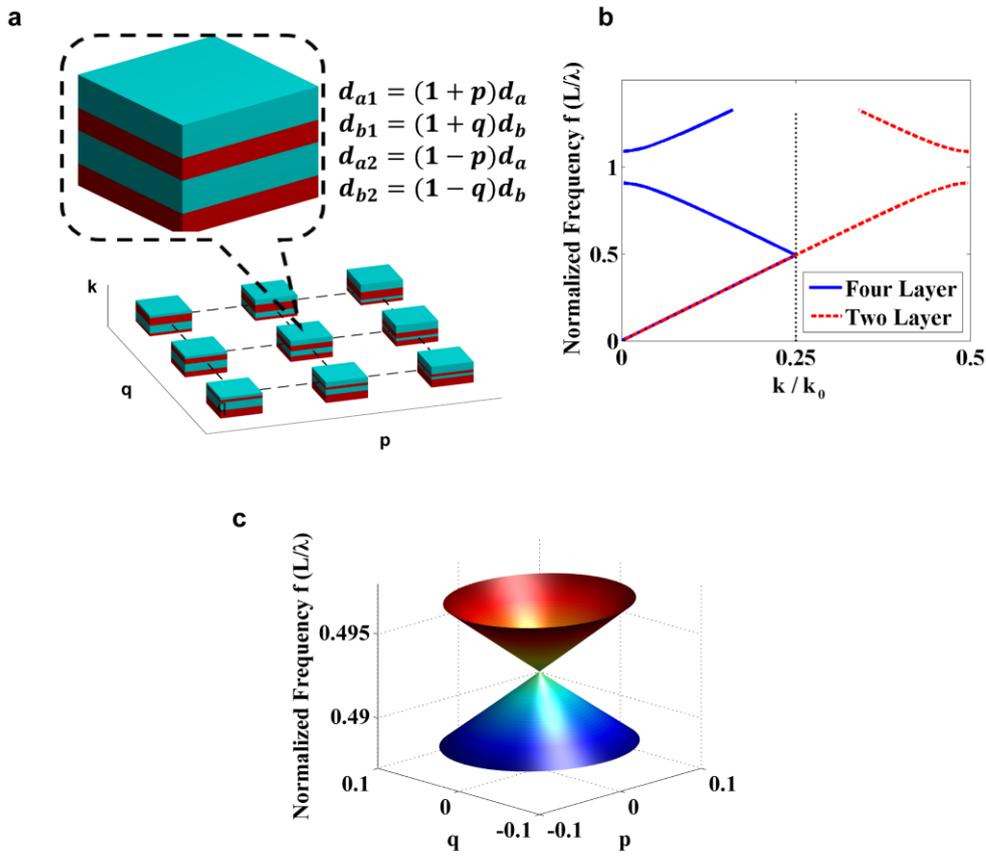


图 3.2a，一维光子晶体构成的三维广义空间。b，红色虚线为原胞为两层平板构成的光子晶体色散，蓝色实线为原胞包含四层平板的色散。c，在广义空间固定 $k=0$ ，得到的光子晶体色散，即外尔点。

为了证明该简并点为外尔点，我们尝试使用转移矩阵来求解在外尔点附近的哈密顿量。对于原胞包含四层平板的光子晶体，其转移矩阵如下：

$$\mathbf{T} = \begin{pmatrix} C & D \\ D^* & C^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A & B \\ B^* & A^* \end{pmatrix} \quad (3.2)$$

其中

一维光子晶体中拓扑量及其界面态的研究

$$A = e^{ik_a d_{a1}} \left[\cos(k_b d_{b1}) + \frac{i}{2} \left(\frac{n_b}{n_a} + \frac{n_a}{n_b} \right) \sin(k_b d_{b1}) \right] \quad (3.3)$$

$$B = e^{-ik_a d_{a1}} \left[\frac{i}{2} \left(\frac{n_b}{n_a} - \frac{n_a}{n_b} \right) \sin(k_b d_{b1}) \right] \quad (3.4)$$

$$C = e^{ik_a d_{a2}} \left[\cos(k_b d_{b2}) + \frac{i}{2} \left(\frac{n_b}{n_a} + \frac{n_a}{n_b} \right) \sin(k_b d_{b2}) \right] \quad (3.5)$$

$$D = e^{-ik_a d_{a2}} \left[\frac{i}{2} \left(\frac{n_b}{n_a} - \frac{n_a}{n_b} \right) \sin(k_b d_{b2}) \right] \quad (3.6)$$

考虑周期性边界条件，我们可以得到：

$$\left[\mathbf{T} - e^{i2k(d_a+d_b)} \right] \begin{pmatrix} c^+ \\ c^- \end{pmatrix} = 0 \quad (3.7)$$

其中 c^+ 和 c^- 分别为向前和向后传播的波的系数，即在平板A1中的电场可以写成：

$$E = c^+ e^{ik_a x} + c^- e^{-ik_a x} \quad (3.8)$$

为了在外尔点附近对转移矩阵做小量展开，我们定义了四个无量纲参数：

$$\begin{aligned} \xi_f &= (f - f_w) / f_w \\ \xi_p &= (p - p_w) \\ \xi_q &= (q - q_w) \\ \xi_k &= (k - k_w) / k_0 \end{aligned} \quad (3.9)$$

(p_w, q_w, k_w) 为外尔点的位置，而 f_w 则为外尔点对应的频率。由于外尔点只能处在一维光子晶体的带边或带中，因此 $k_w = 0$ 或 $k_w = 0.5k_0$ 。对公式3.2展开，我们可以得到：

$$\mathbf{T} = \begin{pmatrix} \pm 1 + ic_1 \xi_p + ic_2 \xi_q + ic_3 \xi_f & d_1 \xi_p + d_2 \xi_q + d_3 \xi_f \\ d_1^* \xi_p + d_2^* \xi_q + d_3^* \xi_f & \pm 1 - (ic_1 \xi_p + ic_2 \xi_q + ic_3 \xi_f) \end{pmatrix} + O(\xi_p^2, \xi_q^2, \xi_f^2) \quad (3.10)$$

如果保留零级近似，则 $\mathbf{T} = \pm 1$ ，其符号取决于 $k_w = 0$ 或 $k_w = 0.5k_0$ 。如果保留一级近似，公式3.7可以写成：

$$\begin{pmatrix} -(c_1 \xi_p + c_2 \xi_q - c_4 \xi_k) & -i(d_1 \xi_p + d_2 \xi_q) \\ i(d_1^* \xi_p + d_2^* \xi_q) & -(c_1 \xi_p + c_2 \xi_q + c_4 \xi_k) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -ic^+ \\ ic^- \end{pmatrix} = \xi_f \begin{pmatrix} c_3 & id_3 \\ -id_3^* & c_3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -ic^+ \\ ic^- \end{pmatrix} \quad (3.11)$$

其中 $\{c_1, c_2, c_3, c_4\} \in \mathbb{R}$ ， $\{d_1, d_2, d_3\} \in \mathbb{C}$ 。现在公式3.11两边均为厄米矩阵。公式3.11

一维光子晶体中拓扑量及其界面态的研究

右侧可以写成:

$$\begin{pmatrix} c_3 & id_3 \\ -id_3^* & c_3 \end{pmatrix} = U \begin{pmatrix} c_3 - |d_3| & 0 \\ 0 & c_3 + |d_3| \end{pmatrix} U^\dagger \quad (3.12)$$

其中

$$U = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} -id_3/|d_3| & id_3/|d_3| \\ 1 & 1 \end{pmatrix} \quad (3.13)$$

通过一些简单的数学简化, 公式3.11可以写成:

$$\begin{pmatrix} c_3 - |d_3| & 0 \\ 0 & c_3 + |d_3| \end{pmatrix}^{-\frac{1}{2}} U^\dagger M U \begin{pmatrix} c_3 - |d_3| & 0 \\ 0 & c_3 + |d_3| \end{pmatrix}^{-\frac{1}{2}} \begin{pmatrix} -i\tilde{c}^+ \\ i\tilde{c}^- \end{pmatrix} = \xi_f \begin{pmatrix} -i\tilde{c}^+ \\ i\tilde{c}^- \end{pmatrix} \quad (3.14)$$

其中

$$M = \begin{pmatrix} -(c_1\xi_p + c_2\xi_q - c_4\xi_k) & -i(d_1\xi_p + d_2\xi_q) \\ i(d_1^*\xi_p + d_2^*\xi_q) & -(c_1\xi_p + c_2\xi_q + c_4\xi_k) \end{pmatrix} \quad (3.15)$$

$$\begin{pmatrix} -i\tilde{c}^+ \\ i\tilde{c}^- \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} c_3 - |d_3| & 0 \\ 0 & c_3 + |d_3| \end{pmatrix}^{-\frac{1}{2}} U^\dagger \begin{pmatrix} -ic^+ \\ ic^- \end{pmatrix} \quad (3.16)$$

公式3.14可以用泡利矩阵展开, 最终得到:

$$\begin{pmatrix} \xi_p & \xi_q & \xi_k \end{pmatrix} \mathbf{v} \begin{pmatrix} \sigma_0 \\ \sigma_x \\ \sigma_y \\ \sigma_z \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -i\tilde{c}^+ \\ i\tilde{c}^- \end{pmatrix} = \xi_f \begin{pmatrix} -i\tilde{c}^+ \\ i\tilde{c}^- \end{pmatrix} \quad (3.17)$$

其中 σ_i ($i=x, y, z$) 为泡利矩阵, σ_0 为 2×2 的单位矩阵, \mathbf{v} 为 3×4 实数矩阵。最终我们可以得到外尔哈密顿量的形式:

$$H \equiv \begin{pmatrix} \xi_p & \xi_q & \xi_k \end{pmatrix} \mathbf{v} \begin{pmatrix} \sigma_x \\ \sigma_y \\ \sigma_z \\ \sigma_0 \end{pmatrix} \quad (3.18)$$

针对第一条和第二条能带之间的外尔点, 即图 3.1c 中的简并点 $(p_w, q_w, k_w) = (0, 0, 0.5k_0)$, 我们可以得到:

$$\mathbf{v} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0.1073 & 0 \\ 0 & -0.0946 & 0 & 0 \\ -1.985 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (3.19)$$

一维光子晶体中拓扑量及其界面态的研究

根据常用的定义，我们可以确认外尔点的‘电荷’为-1. 我们比较了直接用公式 3.17计算的色散（蓝色圆圈）和利用得到的哈密顿量计算的结果（红色虚线），

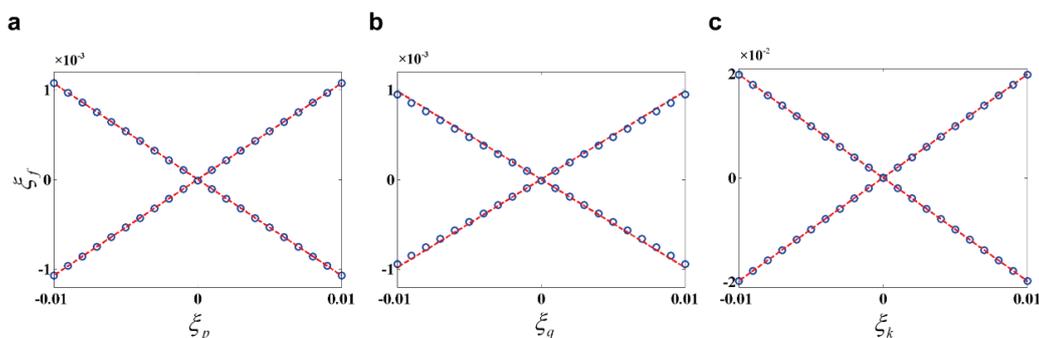


图 3.3, a,b,c 中比较了数值计算结果（蓝色圆圈）与求解的哈密顿量计算的结果（红色虚线）。

两者符合的比较好。

除了利用哈密顿量求解外尔点的“电荷”，我们也采用了文献[14]中离散数值方法来计算Chern数。如果我们选取一个球面包含一个外尔点，那么穿过球面的Berry流必然为 2π 的整数倍。如图3.4a所示，针对某个 θ_i 值，可以在球面定义一

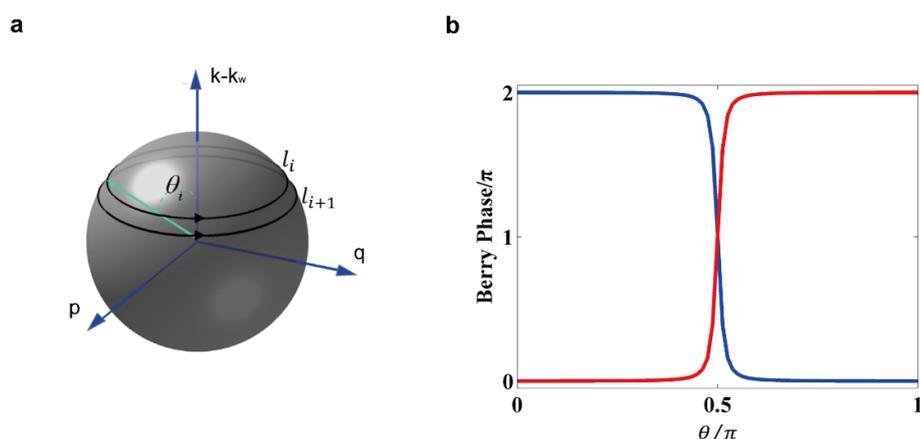


图 3.4, a,计算外尔点“电荷”的示意图，球半径为 0.01. b,计算不同 θ 所对应的回路的Berry相位，其中蓝线为低能带计算的结果，红线为高能带。

个回路 l_i ，那么我们可以利用公式：

一维光子晶体中拓扑量及其界面态的研究

$$\gamma_{n,i} = -\text{Im} \sum_{j=1}^N \ln \left(\int_0^L \varepsilon(x) u_{n,p_j,q_j,k}^*(x) u_{n,p_{j+1},q_{j+1},k}(x) dx \right) \quad (3.20)$$

其中 $\varepsilon(x)$ 是光子晶体原胞的介电函数， $u_{n,p_j,q_j,k}$ 为第 n 阶能带上对应 p_i ， q_i 和 k 时的本征电场分布函数， $p_i = r \sin(\theta) \cos(i2\pi / N)$ ， $q_i = r \sin(\theta) \sin(i2\pi / N)$ ，在计算过程中，我们选取 N 值足够大，使得 $\gamma_{n,i}$ 收敛。而 $\gamma_{n,i}$ 则对应穿过回路 l_i 所对应球冠面的 Berry 流（会有 2π 的整数倍的不确定性）。如果我们再计算回路 l_{i+1} 的 Berry 相位 $\gamma_{n,i+1}$ ，则得到其对应球冠面的 Berry 流。那么 $\gamma_{n,i+1} - \gamma_{n,i}$ 则是穿过 l_{i+1} 和 l_i 两个回路之间面积的 Berry 流，由于我们选取的步长足够小，使得这个差值小于 2π ，也就是一个确定的值，所以我们只要计算 Berry 相位随 θ 从 0 变化到 π 的变化就可确定穿过整个球面的 Berry 流，即 Chern 数。如图 3.4b 中，我们计算了图 3.3 中对应的外尔点的 Berry 相位，其中蓝色实线为低能带，而红色实线对应高能带，可以清晰地看到低能带的 Berry 相位变化为 -2π ，而高能带则为 2π ，亦即该外尔点的“电荷”为 -1，与用公式 3.19 所计算的结果吻合。

在图 3.5 中，我们分别计算了低五阶能带的色散，其中 a 为 $k = 0.5k_0$ 时，第一阶和第二阶能带色散（第一阶禁带）；b 为 $k = 0$ 时，第二阶和第三阶能带色散（第二阶禁带）；c 为 $k = 0.5k_0$ 时，第三阶和第四阶能带色散（第三阶禁带）；d 为 $k = 0$ 时，第四阶和第五阶能带色散（第四阶禁带）。在第一阶禁带中可以找到一个外尔点，其“电荷”为 -1；而在第二阶禁带中可以找到两个“电荷”为 -1 的外尔点；在第三阶禁带中，我们找到四个“电荷”为 -1 的外尔点以及以一个“电荷”为 +1 的外尔点；在第四阶禁带中，可以找到六个“电荷”为 -1 的外尔点以及以两个“电荷”为 +1 的外尔点。由于我们定义的空间不是闭合的，因此能带中的外尔点的“电荷”之和不为 0，但我们可以发现第 n 阶禁带中，外尔点的“电荷”之和为 $-n$ 。

一维光子晶体中拓扑量及其界面态的研究

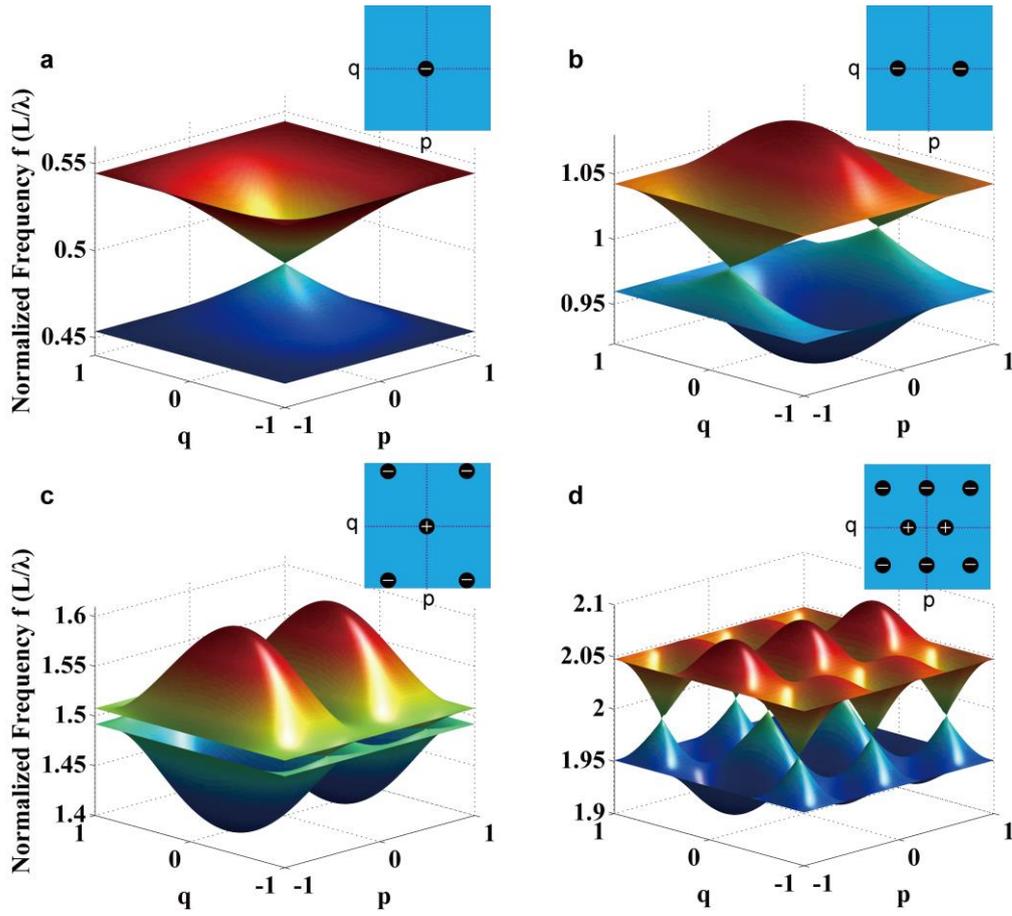


图 3.5, a, $k = 0.5k_0$ 时, 第一阶和第二阶能带色散。b, $k = 0$ 时, 第二阶和第三阶能带色散。c, $k = 0.5k_0$ 时, 第三阶和第四阶能带色散。d, $k = 0$ 时, 第四阶和第五阶能带色散。

3.3 一维光子晶体中广义外尔点及其禁带反射相位

对于一维光子晶体，我们在第二章中讨论了其禁带反射相位与能带 Zak 相位之间的关系；而在 3.2 节中，我们将一维空间拓展到了三维广义空间，并且找到了外尔点，但其与反射相位之间关系还未探究清楚。

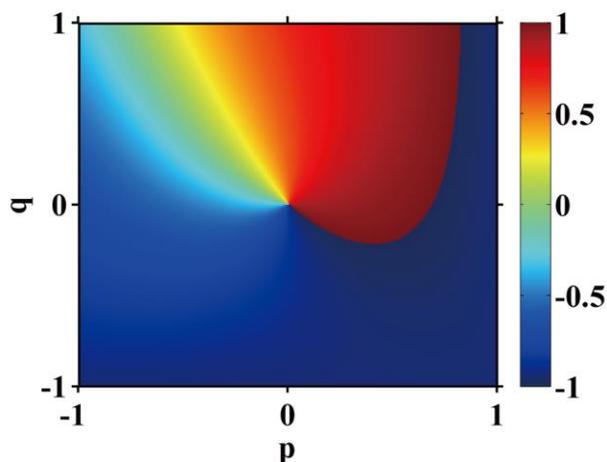


图 3.6, p - q 空间的反射相位，光子晶体参数 $d_a = 97nm$, $d_b = 72nm$ 。此时，外尔点的位置为 $(p, q) = (0,0)$ ，而对应的频率为 $f = 247.6THz$ 。

正如第二章所讲，当光从空气中入射到半无穷大光子晶体界面，将被全反射回去，其反射相位将依赖于频率。在图 3.6 中，我们计算了光子晶体在 p - q 空间中时的反射相位（ π 为单位），相应的频率 $f = 247.6THz$ ，即外尔点对应的频率，光子晶体的切面为平板 A1 的起始位置。我们可以清楚地看到反射相位在 p - q 空间形成一个涡旋，其相位奇点正好对应外尔点的位置 $(p, q) = (0,0)$ 。而根据涡旋光束 [34] 的定义，我们发现反射相位涡旋的“电荷”正好与外尔点的“电荷”相同。但这是偶然还是必然对我们而言是一个问题。

为了解决这个问题，我们尝试从外尔点附近的哈密顿量入手。根据公式 3.1 中的定义，在 p - q 空间每个点都对应一个光子晶体，因此光子晶体禁带中反射相位均依赖于 p , q 的取值。在这边我们选取了公式 3.19 所对应的外尔点作为代表，其哈密顿量具有如下的形式：

一维光子晶体中拓扑量及其界面态的研究

$$H = \xi_p v_{pz} \sigma_z + \xi_q v_{qy} \sigma_y + \xi_k v_{kx} \sigma_x \quad (3.21)$$

其中 $v_{pz} = 0.1073$, $v_{qy} = -0.0946$ 和 $v_{kx} = -1.985$ 。现在我们考虑在 p - q 空间选取一个围绕外尔点的回路，其定义如下：

$$\begin{aligned} \xi_p |v_{pz}| &= r \cos(\varphi') \\ \xi_q |v_{qy}| &= r \sin(\varphi') \end{aligned} \quad (3.22)$$

其中 $\varphi' \in [0, 2\pi)$, φ' 与 p - q 空间中的极角 φ 具有一一对应关系，并且满足：

$$\tan(\varphi') |v_{pz}| = |v_{qy}| \tan(\varphi) \quad (3.23)$$

之所以选取公式 3.22 来定义这个回路，主要是为了简化推导过程。由于考虑的是光子晶体禁带中的反射相位，我们选取的频率 ξ_f 必然落在禁带之中，因此 $\xi_f < r$ 。

其次我们新定义 $\cos c = (x_f/r)$ ，而 $c \in (0, \rho)$ 。将公式 3.22 代入公式 3.21 中，我们可以求解得到 ξ_k ：

$$\xi_k v_{kx} = \pm ir \sin \chi \quad (3.24)$$

因为处在禁带之中，因此 ξ_k 必然为一纯虚数。在这边，我们假设波矢方向沿正方向，因此要求 $\text{Im}(\xi_k) > 0$ 。而公式 3.21 相应的本征矢可求解得：

$$\vec{u} = \begin{pmatrix} 1 \\ -i\beta \end{pmatrix} \quad (3.25)$$

其中

$$\beta = -\frac{\cos(\chi) - \cos(\varphi')}{\sin(\chi) - \sin(\varphi')} = \tan((\varphi' + \chi)/2) \quad (3.26)$$

将公式 3.24 代入公式 3.16，我们可得到向前传播和向后传播的系数，

$$\begin{pmatrix} c^+ \\ c^- \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} e^{i\psi_1} \left[(c_3 - |d_3|)^{-1/2} + i\beta (c_3 + |d_3|)^{-1/2} \right] \\ -i \left[(c_3 - |d_3|)^{-1/2} - i\beta (c_3 + |d_3|)^{-1/2} \right] \end{pmatrix} \quad (3.27)$$

其中 c_3 和 d_3 是在公式 3.11 中定义的系数，而 $\psi_1 = \text{Arg}(d_3)$ 。为了简化表达式，我们定义

一维光子晶体中拓扑量及其界面态的研究

$$\psi_2 \equiv \tan^{-1} \left[\beta \left(\frac{c_3 - |d_3|}{c_3 + |d_3|} \right)^{1/2} \right] \quad (3.28)$$

$$A_0 = \sqrt{\frac{1}{c_3 - |d_3|} + \frac{\beta^2}{(c_3 + |d_3|)}} \quad (3.29)$$

而公式3.27可以简化成

$$\begin{pmatrix} c^+ \\ c^- \end{pmatrix} = A_0 \sqrt{\frac{1}{2}} \begin{pmatrix} e^{i\psi_1} e^{i\psi_2} \\ -e^{i\pi/2} e^{-i\psi_2} \end{pmatrix} \quad (3.30)$$

那么相应的电场分布可以写成

$$E_{1y} = c^+ e^{ik_a x} + c^- e^{-ik_a x} = A_0 \left[(e^{i\psi_1} e^{i\psi_2}) e^{ik_a x} - (e^{i\pi/2} e^{-i\psi_2}) e^{-ik_a x} \right] / \sqrt{2} \quad (3.31)$$

其中下标“1y”代表在第一层平板 A1 中电场矢量方向沿 Y 轴，而 k_a 则为 A1 中的波矢，x 则表示光子晶体切面距离 A1 界面的距离。相应的磁场分布可以得到：

$$H_{1z} = \frac{1}{\sqrt{2}z_a} A_0 \left[(e^{i\psi_1} e^{i\psi_2}) e^{ik_a x} + (e^{i\pi/2} e^{-i\psi_2}) e^{-ik_a x} \right] \quad (3.32)$$

其中 z_a 为平板A1中的阻抗（以真空中阻抗 z_0 为单位）。那么光子晶体的表面阻抗可以表示为：

$$Z_{pc} = iz_a \left(\tan(\psi_1/2 + \psi_2 + k_a x - \pi/4) \right) \quad (3.33)$$

那么相应的反射相位可以求解得到：

$$\phi = \pi + 2 \arctan \left[-z_a \tan(\psi_1/2 + \psi_2 + k_a x - \pi/4) \right] \quad (3.34)$$

为了确认公式3.34的正确性，我们将其计算的反射相位与转移矩阵直接计算的进行比较，具体的结果如图3.7a所示，其中红色圆圈为利用公式3.34计算的结果；而蓝色实线为转移矩阵直接计算的结果，两者符合的非常好，在计算中，我们选取光子晶体切面为平板A1的起始位置。

现在，我们仔细分析反射相位与极角 ϕ 以及频率 ξ_f 的关系。根据公式3.34，反射相位 ϕ 是 $\psi_1/2 + \psi_2 + k_a x - \pi/4$ 的单调递减函数。而 ψ_2 只取决于极角 ϕ 和频率 ξ_f 。在我们所研究的外尔点， $|c_3| > |d_3|$ ，因此根据公式3.28，我可以得到 ψ_2 是 β 的单调递增函数。因为 $\cos c = (x_f/r)$ ，此处 $c \in (0, \rho)$ ，因此 c 是频率 ξ_f 的单调递减函

一维光子晶体中拓扑量及其界面态的研究

数。从公式3.22和3.26推导，可以确认 ψ_2 是极角 φ 的单调递增函数，而是率 ξ_f 的单调递减函数。考虑反射相位 ϕ 与 ψ_2 的关系，我们可以确认， ϕ 是极角 φ 的单调递减函数，而对于频率 ξ_f 则是单调递增函数。结合

公式3.26和3.28，我们可以求得 $j+c$ 从 $-\pi$ 变化到 π ， ψ_2 则相应地有 $-\pi/2$ 变

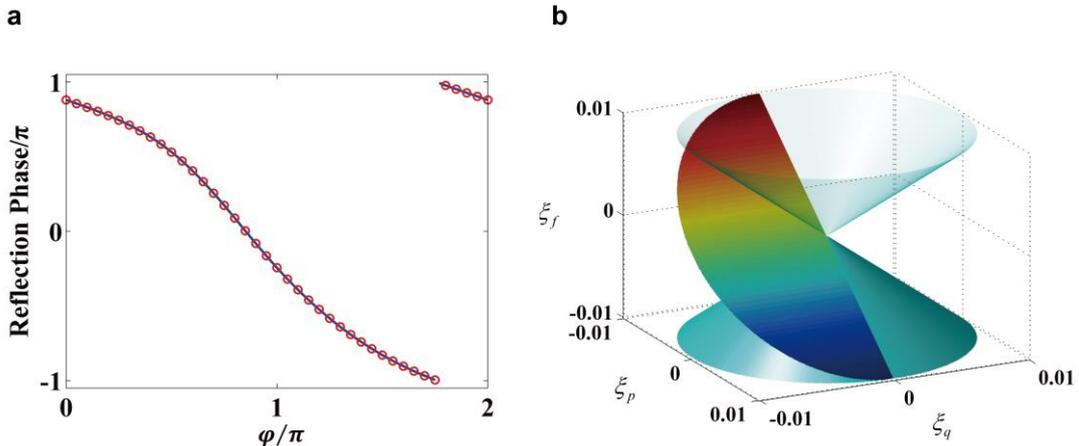


图 3.7 a, 在 p - q 空间选取了一个半径 $r=0.01$ 的圆圈，计算其反射相位与极角 φ 之间的关系。其中蓝色实线为使用转移矩阵计算的结果，而红色圆圈为使用哈密顿量计算的结果。其光子晶体对应的参数与图 3.1 中的相同，即 $d_a=97nm$ ， $d_b=72nm$ ，频率 $f_w=247.6THz$ 。b, 青色圆锥面为光子晶体在 p - q 空间的色散， $k=0$ 。彩色平面则对应反射相位 $\phi=0$ 的位置。

化到 $\pi/2$ 。同时，根据公式3.34可以推得，当 $\psi_1/2+\psi_2+k_ax-\pi/4$ 从 $-\pi/2$ 变化到 $\pi/2$ ，反射相位则从 π 变化到 $-\pi$ 。根据上述分析，我们可以得出结论，如果极角 φ 绕外尔点一周，则反射相位 ϕ 将连续减小 2π 。当我们调整半径大小，都能得出相似的结论，因此，在 p - q 空间将形成一个反射相位涡旋，其“电荷”与外尔点的“电荷”相同。根据公式3.34，我们可以看到，一旦频率 ξ_f 取值确定，半无穷大光子晶体的切面位置 x 只会将 p - q 平面的反射相位整体平移，但不会影响上述讨论的规律。

现在我们讨论反射相位 ϕ 与频率 ξ_f 的关系，如果 $\xi_f=-r$ ，我们可以得到 $c=\rho$ ，

一维光子晶体中拓扑量及其界面态的研究

其值不依赖于 r ，因此当极角 φ 确定时，反射相位为一恒定值；如果 $\xi_f = r$ ，我们可以得到相同的规律，除了 $c = 0$ 。在图3.7b中，我们画出了反射相位 $\phi = 0$ 对应的色散，可以看到频率 ξ_f 从下能带变化到上能带， χ 将减小 π ；为了保持反射相位 $\phi = 0$ ，极角 φ 则需要增加 π ，因此该等相位面将绕外尔点旋转180度。

3.3 外尔点反射相位的测量

为了证明 3.2 节中理论的正确性,我们尝试在实验中去测量光子晶体的反射相位。然而对于可见光波段,由于电子器件的相应频率远低于光波,因此无法直接测量到反射相位。因此,我们采取利用法布里佩罗腔 (FP 腔) 共振来反推光波相位。

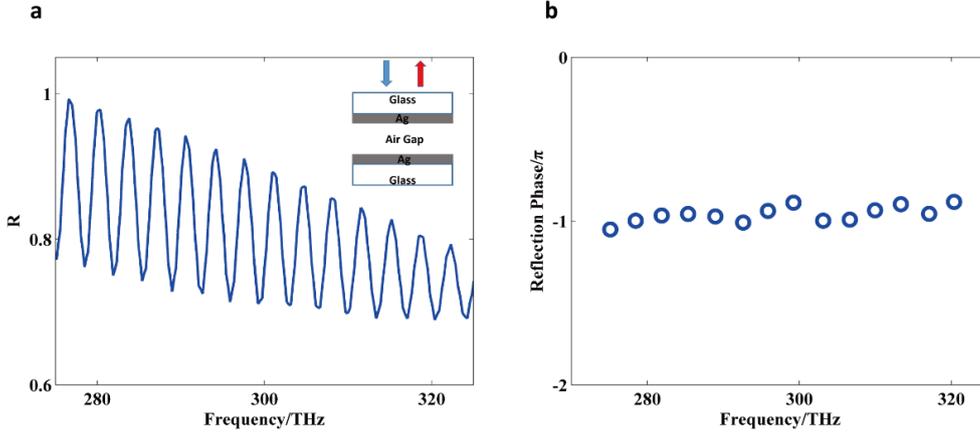


图 3.8 a, 实验测量得到的 FP 腔共振反射谱, 插图为测量示意图。b, 根据 a 图中反射谱反推得到的银膜反射相位。

如图 3.8a 中插图所示, 我们设计由两层相同厚度的银膜构成的 FP 腔。由于两层银膜的衬底 (glass) 厚度为毫米量级, 因此这两个界面的干涉可以忽略不计, 那么满足 FP 共振的条件为:

$$\phi_1 + \phi_2 + 4\pi d \frac{f_m}{c} = 2m\pi, \quad m \in \mathbb{Z} \quad (3.35)$$

其中 ϕ_1 和 ϕ_2 为上下银膜的反射相位 ($\phi_1 = \phi_2$), 而 f_m 为第 m 阶 FP 共振对应的频率, d 为中间空气层的厚度, c 为真空中的光速。如果忽略银膜的色散, 即 ϕ_1 (ϕ_2) 为一常数, 我们可以推得:

$$d = \frac{c}{\Delta f} \quad (3.36)$$

Δf 为相邻两阶 FP 共振的频率差值。根据图 3.8a 中测量得到的反射谱, 我们可以确定出 FP 共振的频率 (反射谷)。根据公式 3.36, 我们反推出空气层的厚度 d ; 再根据公式 3.35, 在 300THz 附近银膜的反射相位即可求解得到 $(-0.95 \pm 0.0471)\pi$,

一维光子晶体中拓扑量及其界面态的研究

其结果如图3. 8b所示。

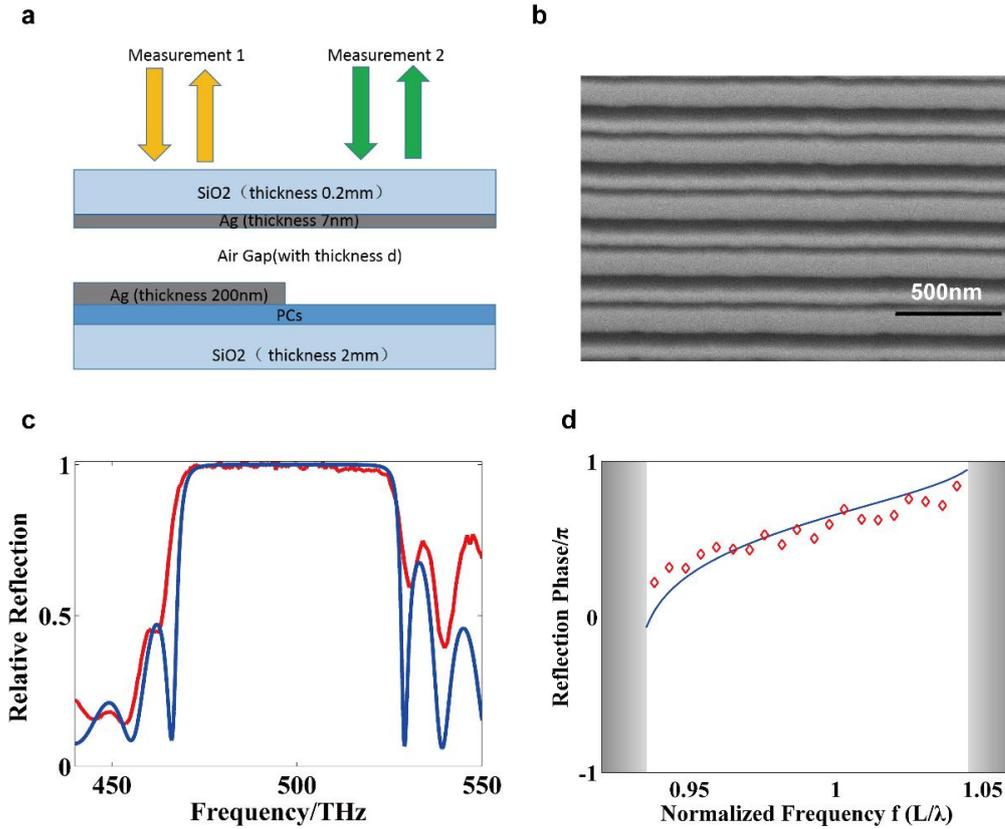


图 3.9a, 测量光子晶体禁带反射相位示意图。b, 光子晶体 SEM 图。c, 红色实线为测量得到的反射谱, 蓝线为理论拟合的反射谱, 对应 $L_f = 964\text{nm}$ 。d, 红色菱形为实现测量得到的反射相位, 蓝色实线为理论计算的反射相位。

我们采用类似的方法来测量光子晶体的反射相位, 其示意图如图3. 9a所示, 我们在光子晶体表面蒸镀 $h = 200\text{nm}$ 银膜, 该厚度足以反射100%的入射光。我们首先测量两层银膜构成的FP腔反射谱, 根据公式3. 36, 我们可以得到两层银膜之间空气间隙的厚度 d_1 。由于下层银膜厚度为 h , 因此光子晶体和上层银膜之间的空气层厚度为 $d = d_1 + h$ 。由于上层银膜的反射相位以测量得到, 我们可以根据3. 35反推出光子晶体的反射相位。

在图3. 9b中, 我们使用聚焦离子束在光子晶体表面做了一个切面, 并使用扫描电镜观测, 该光子晶体参数为 $d_a = 97\text{nm}$, $d_b = 72\text{nm}$, $p = -0.38$ 和 $q = -0.31$, 其中浅色区域为 HfO_2 , 深色区域为 SiO_2 。除了局域会有一些起伏, 整体都呈现很好的平整性和周期性。考虑到实验上制作的样品与设计的参数会有一些整体的偏移, 我

一维光子晶体中拓扑量及其界面态的研究

们用 α 来表示这个误差，因此

$$L_f = (1 + \alpha)L_d \quad (3.37)$$

其中 L_f 和 L_d 分别为实验上光子晶体原胞的光程和设计的光程。由于 α 的取值会造成禁带频率的偏移，因此我们可以在理论上根据实验测量得到的反射谱来得到 α 的值（保持 p 和 q 的取值不变）。在图 3.9c 中，红线为实验测量得到的光子晶体反射谱，蓝线是在理论上拟合误差 α 得到的反射谱。我们设计的光程 $L_d = 597.0\text{nm}$ ，而蓝色实线对应的 $L_f = 596.4\text{nm}$ ，因此我们可以得到 $\alpha \approx -0.1\%$ 。在图 3.9d 中，我们将实验测量得到的反射相位与理论结果做了对比，两者符合的非常好。

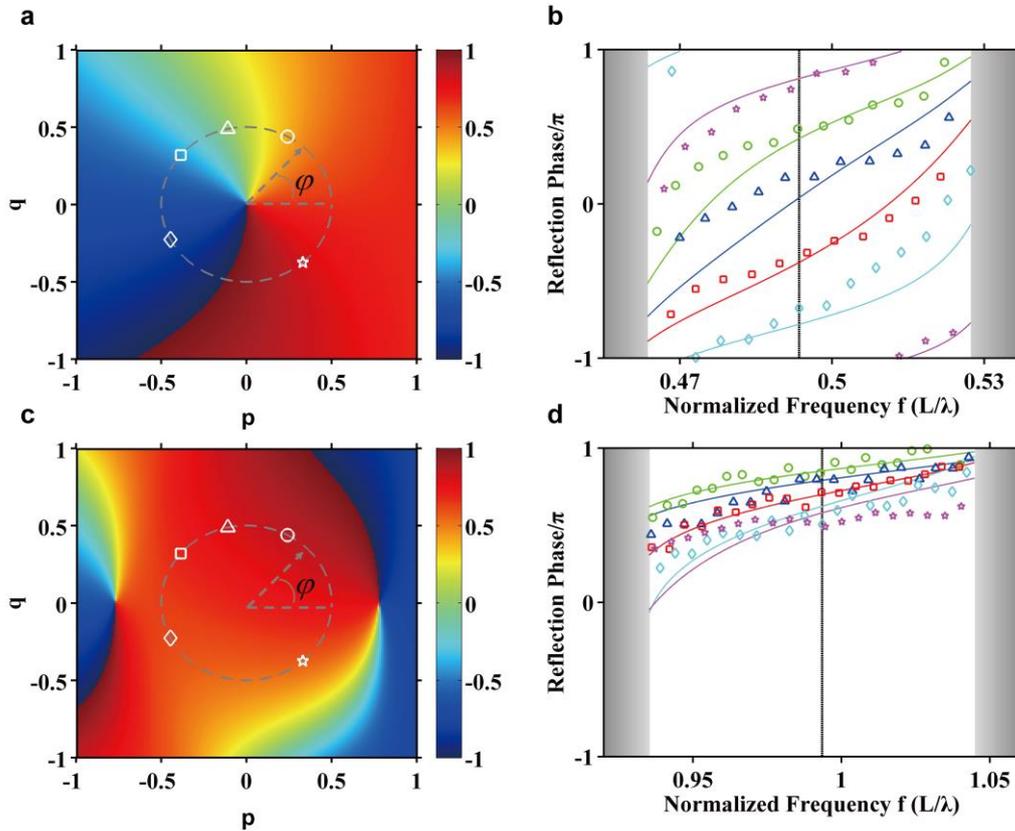


图 3.10 a, c 对应第 1,2 阶外尔点频率时光子晶体在参数空间的反射相位分布，在实验中我们选取了 5 个参数，其中白色圆形，三角形，正方形，菱形和五角星分别对应 $(p, q) = (0.24, 0.44)$, $(-0.11, 0.49)$, $(-0.38, 0.31)$, $(-0.45, 0.22)$ 和 $(0.33, -0.37)$ 。b, d 为实验中测量对样品的反射相位，并用相同的图形表示，而对应颜色的实线则为理论计算的结果，灰色区域为导带，黑色实线则表示外尔点对应的频率。

一维光子晶体中拓扑量及其界面态的研究

在图3.10中，我们分别计算了第1, 2阶外尔点对应频率时光子晶体在参数空间的反射相位。由于上述外尔点的“电荷”均为-1，因此反射相位所形成的的涡旋“电荷”均为-1，也就是说，如果选取一个回路包含外尔点（图3, 10a中灰色虚线），其反射相位随极角 φ 减小，并且遍历 $(0, 2\pi]$ 区间。在实验中我们在该回路中选取了5个样品，其中白色圆形，三角形，正方形，菱形和五角星分别对应 $(p, q) = (0.24, 0.44)$, $(-0.11, 0.49)$, $(-0.38, 0.31)$, $(-0.45, 0.22)$ 和 $(0.33, -0.37)$ 。在3.10b中，我们分别测量了这5个样品的反射相位，并用对应的形状表示，灰色区域表示光子晶体的导带区域，而黑色虚线则为外尔点对应的频率。从实验结果可以看到反射相位随极角 φ 减小，并且覆盖了 $(0, 2\pi]$ 。当考虑第2阶外尔点频率时，这个回路不在包含外尔点（图3, 10b），因此反射相位不再有上述性质，其实验测量结果如图3.10d所示，均与理论符合得较好。

3.4 广义空间中的“费米弧型界面态”

在外尔半金属中，费米弧是其最为有趣的一个性质。当费米能位置存在具有相反“电荷”的外尔点时，边界态将会连接这两个外尔点，形成一孤立的线段[2,3,5,7,16,35]。尽管在电子体系费米弧已被实验所观测到，但在经典波体系，包括光波和声波等，尚未有实验观测到费米弧。在我们建立的广义空间中，可以看到在第3阶或更高阶禁带将会同时出现“电荷”为+1或-1的外尔点，这使得“费米弧”的存在成为可能。

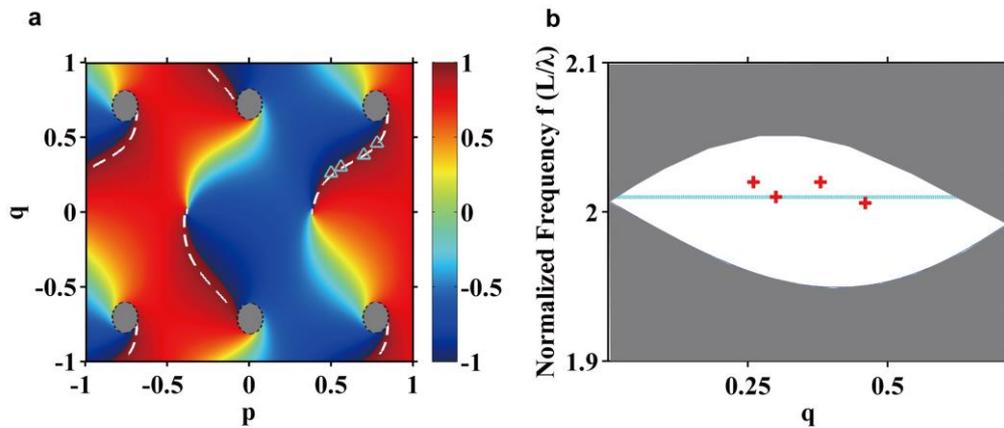


图 3.11, a, 光子晶体在 p - q 空间的反射相位, 虚线包裹的灰色区域为导带区域, 该图对应的频率为“电荷”为+1的外尔点的频率。白色虚线是理论计算得到的边界态的轨迹, 此时光子晶体的切面位置为平板 A1 的中间位置, 上面覆盖的银膜厚度为 20nm。青色三角形为实验中所选取的样品位置, 分别对应 $(p, q) = (0.50, 0.26)$, $(0.56, 0.30)$, $(0.70, 0.38)$ 和 $(0.78, 0.36)$, 而光子晶体参数 $d_a = 0.323\mu\text{m}$ 和 $d_b = 0.240\mu\text{m}$ 。b, 红色十字型为实验测量得到的边界态的频率, 青色虚线为 a 图中计算所用的频率, 灰色区域则为导带。

在图 3.11a 中, 我们计算了光子晶体在 p - q 空间的反射相位, 其频率为为+1的外尔点对应的频率。由于在我们体系没有额外的对称性来保护不同“电荷”的外尔点, 因此它们的频率会有一些偏离。在该图中, “电荷”为+1的外尔点的频率略高于-1的外尔点, 因此虚线包裹的区域表示“电荷”为-1外尔点的导带区域。我们可以清

一维光子晶体中拓扑量及其界面态的研究

楚地看到，“电荷”为-1和+1的外尔点附近反射相位形成的涡旋具有对应的“电荷”，以及环绕方向，这与3.3节中理论推导得到的结论相同。

在2.3节中，我们讨论了边界态（塔姆态）存在的条件为：

$$\phi_{PC} + \phi_S = 2m\pi, \quad m \in \mathbb{Z}, \quad (3.38)$$

其中 ϕ_{PC} 和 ϕ_S 分别为光子晶体和上层反射薄膜的反射相位。考虑现在的参数空间，如果选取一个回路包含一个外尔点，这个回路上光子晶体的反射相位将会遍历 $(0, 2\pi]$ 区间，因此无论反射薄膜的反射相位为何值，均存在于满足公式3.38的点；当把这个回路不断扩大，这些点将会连成线，亦即边界态的轨迹，也就是说，一旦存在外尔点，必将会有边界态的存在；而具体的轨迹则和反射薄膜的性质相关。按照上述讨论，我们在 p - q 空间求解出边界态的轨迹，其结果如图3.11a中白色虚线所示，计算中所用的金属薄膜为20nm的银膜，其在300THz附近对应

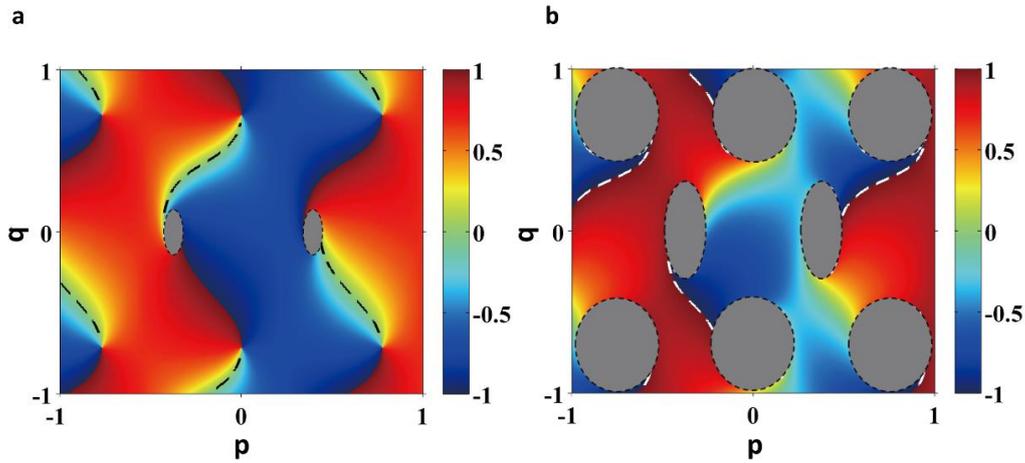


图 3.12, a, 光子晶体在 p - q 空间的反射相位，频率对应“电荷”为-1的外尔点的频率，黑色虚线对应 $\phi_{PC}=0$ ，灰色区域为导带。b, 光子晶体在 p - q 空间的反射相位，频率高于对应“电荷”为+1的外尔点的频率，黑色虚线对应 $\phi_{PC}=\pi$ ，灰色区域为导带。

的反射相位为 -0.95π 。我们可以看到，每个外尔点位置均存在边界态；并且有两线段分别连接“电荷”为+1和-1的外尔点，其性质与电子体系费米弧相同。另外，由于我们的参数空间不存在时间反演对称性保护，因此“电荷”为+1和-1的

一维光子晶体中拓扑量及其界面态的研究

外尔点的数量不相同，导致有些边界态无法连接“电荷”相反的两个外尔点而是出了边界。

为了证明理论的正确性，我们选取了理论计算的“费米弧”上 4 个样品，其具体的位置用青色三角形在图 3.11a 标注，分别对应 $(p, q) = (0.50, 0.26)$, $(0.56, 0.30)$, $(0.70, 0.38)$ 和 $(0.78, 0.36)$ ，而光子晶体参数 $d_a = 0.323\mu\text{m}$ 和 $d_b = 0.240\mu\text{m}$ 。实验中我们在光子晶体表面溅射了 20nm 银膜(实验测量得到反射相位 $(-0.95 \pm 0.0471)\pi$)，测量得到的结果如图 3.11b 中所示，其中红色十字型为边界态的频率，而灰色区域表示导带，青色虚线为 a 图中计算反射相位时对应的频率，可以看到实验测量的边界态频率与理论偏差的很小，足见我们实验中测量到了“费米弧”。

尽管在实验中我们在光子晶体表面溅射了 20nm 的银膜，并且频率固定在“电荷”为+1 的外尔点的频率，但“费米弧”在我们体系中是受拓扑保护而具有健壮性。在图 3.12a 中，我们将频率固定在“电荷”为-1 的外尔点的频率，并用黑色虚线画出了 $\phi_{PC} = 0$ 的轨迹，亦即当反射薄膜 $\phi_s = 0$ 时边界态的轨迹，我们可以看到依然存在两段“费米弧”连接“电荷”为-1 和+1 的外尔点；在图 3.12b 中，我们选取频率高于“电荷”为+1 的外尔点的频率，并用白色虚线画出了 $\phi_{PC} = \pi$ 的轨迹，亦即当反射薄膜 $\phi_s = \pi$ 时边界态的轨迹，“费米弧”依然存在，只是连接了不同“电荷”为-1 和+1 的外尔点，图中灰色区域表示导带。

一维光子晶体中拓扑量及其界面态的研究

3.5 斜入射与外尔点

在上述讨论中，我们只考虑了正入射情况，即 $k_{//} = 0$ 。在本节中我们将外尔点拓展到斜入射的情况。

由于 $k_{//} \neq 0$ ，因此转移矩阵需要作出修正（TE 模）：

$$A = e^{ik_a d_{a1}} \left[\cos(k_b d_{b1}) + \frac{i}{2} \left(\frac{k_b}{k_a} + \frac{k_a}{k_b} \right) \sin(k_b d_{b1}) \right] \quad (3.39)$$

$$B = e^{-ik_a d_{a1}} \left[\frac{i}{2} \left(\frac{k_b}{k_a} - \frac{k_a}{k_b} \right) \sin(k_b d_{b1}) \right] \quad (3.40)$$

$$C = e^{ik_a d_{a2}} \left[\cos(k_b d_{b2}) + \frac{i}{2} \left(\frac{k_b}{k_a} + \frac{k_a}{k_b} \right) \sin(k_b d_{b2}) \right] \quad (3.41)$$

$$D = e^{-ik_a d_{a2}} \left[\frac{i}{2} \left(\frac{k_b}{k_a} - \frac{k_a}{k_b} \right) \sin(k_b d_{b2}) \right] \quad (3.42)$$

其中 $k_a = \sqrt{(n_a k_0)^2 - k_{//}^2}$ ， $k_b = \sqrt{(n_b k_0)^2 - k_{//}^2}$ 。如果我们重新定义：

$$\varepsilon_a = \varepsilon_a + k_{//}^2 / \mu_a k_0^2 \quad (3.43)$$

$$\varepsilon_b = \varepsilon_b + k_{//}^2 / \mu_b k_0^2 \quad (3.44)$$

$$Z_a = \sqrt{\mu_a / \varepsilon_a} \quad (3.45)$$

$$Z_b = \sqrt{\mu_b / \varepsilon_b} \quad (3.46)$$

公式 3.19-3.42 可以改写成：

$$A = e^{ik_a d_{a1}} \left[\cos(k_b d_{b1}) + \frac{i}{2} \left(\frac{Z_b}{Z_a} + \frac{Z_a}{Z_b} \right) \sin(k_b d_{b1}) \right] \quad (3.47)$$

$$B = e^{-ik_a d_{a1}} \left[\frac{i}{2} \left(\frac{Z_a}{Z_b} - \frac{Z_b}{Z_a} \right) \sin(k_b d_{b1}) \right] \quad (3.48)$$

$$C = e^{ik_a d_{a2}} \left[\cos(k_b d_{b2}) + \frac{i}{2} \left(\frac{Z_b}{Z_a} + \frac{Z_a}{Z_b} \right) \sin(k_b d_{b2}) \right] \quad (3.49)$$

一维光子晶体中拓扑量及其界面态的研究

$$B = e^{-ik_a d_{a2}} \left[\frac{i}{2} \left(\frac{Z_a}{Z_b} - \frac{Z_b}{Z_a} \right) \sin(k_b d_{b2}) \right] \quad (3.50)$$

在图 3.13a, b 中我们分别计算了第一阶外尔点在正入射与斜入射的色散关系，可以看到外尔点依旧存在，只是在斜入射情况下，外尔点的频率有所提高。我们也分别计算了光子晶体在外尔点频率时 p - q 空间的反射相位，均形成了涡旋，并且具有相同的“电荷”。

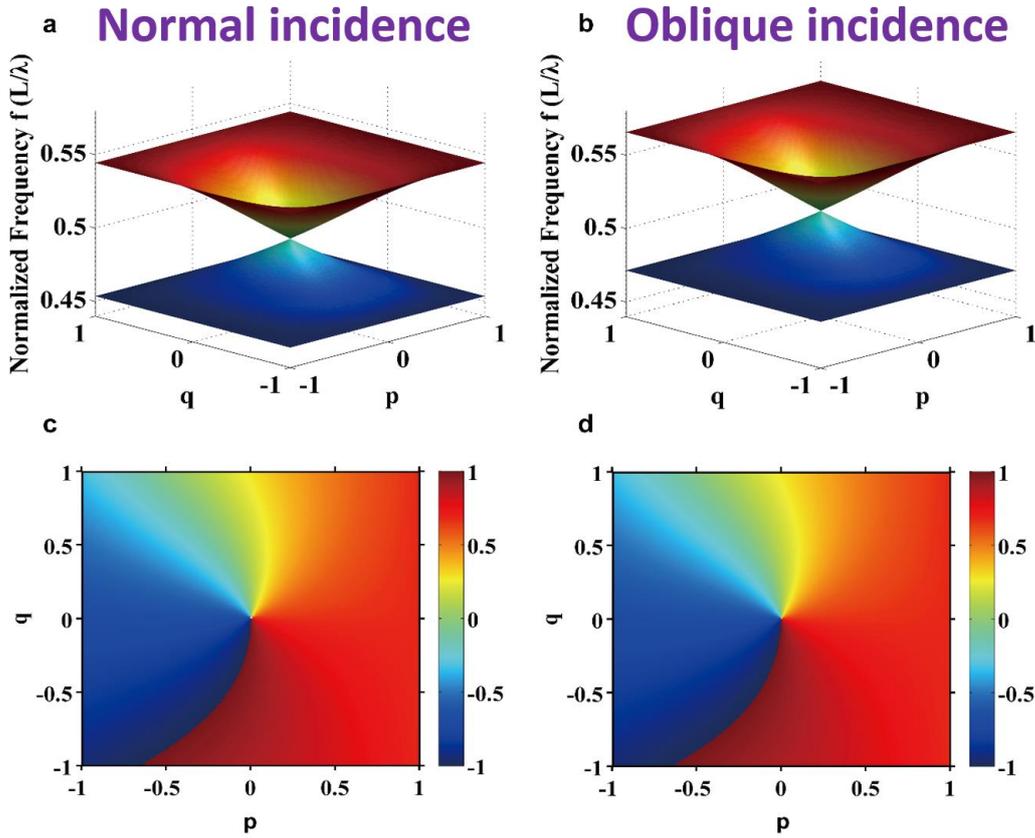


图 3.13, a, b 分别为正入射和斜入射情况下的外尔点; c, d 在外尔点频率。光子晶体在 p - q 空间的反射相位。

针对 TM 模，我们则需要修改 3.43-3.46，可以表示为：

$$\mu_a = \mu_a + k_{//}^2 / \epsilon_a k_0^2 \quad (3.51)$$

$$\mu_b = \mu_b + k_{//}^2 / \epsilon_b k_0^2 \quad (3.52)$$

一维光子晶体中拓扑量及其界面态的研究

$$Z_a = \sqrt{\mu_a / \varepsilon_a} \quad (3.53)$$

$$Z_b = \sqrt{\mu_b / \varepsilon_b} \quad (3.54)$$

而公式 3.47-3.50 保持不变。

3.6 本章小结

在本章节中，我们将一维光子晶体有两层原胞拓展成四层原胞，从而建立了三维广义空间，并且在其色散中发现一些三维简并点。利用转移矩阵推倒得到的哈密顿量和离散化数值方法，我们证明了这些简并点均为外尔点。根据哈密顿量，我们计算了外尔点附近的反射相位，并且发现外尔点附近的反射相位将形成涡旋，其所带“电荷”与外尔点的“电荷”相同。由于这些涡旋的存在，使得边界态必然存在，并且始于外尔点。当体系中存在“电荷”相反的外尔点，边界态将会形成“费米弧”，连接两个“电荷”相反的外尔点，该结论也被实验所证实。另外我们研究了在斜入射情况下的外尔点的性质。

参考文献

- [1] H. Weyl, *Zeitschr. Phys.* **56**, 330 (1929).
- [2] X. Wan, A. M. Turner, A. Vishwanath, and S. Y. Savrasov, *Phys. Rev. B* **83**, 205101 (2011).
- [3] S.-Y. Xu *et al.*, *Science* **349**, 613 (2015).
- [4] B. Q. Lv *et al.*, *Phys. Rev. X* **5**, 031013 (2015).
- [5] S.-Y. Xu *et al.*, *Nat. Phys.* **11**, 748 (2015).
- [6] J. Ruan, S.-K. Jian, H. Yao, H. Zhang, S.-C. Zhang, and D. Xing, *Nature Communications* **7**, 11136 (2016).
- [7] N. Xu *et al.*, *Nature Communications* **7**, 11006 (2016).
- [8] L. X. Yang *et al.*, *Nat Phys* **11**, 728 (2015).
- [9] P. Hosur and X. Qi, *Comp. Rend. Phys.* **14**, 857 (2013).
- [10] F. Arnold *et al.*, *Nature Communications* **7**, 11615 (2016).
- [11] C. Shekhar *et al.*, *Nat Phys* **11**, 645 (2015).
- [12] C. Bai, Y. Yang, and K. Chang, *Scientific Reports* **6**, 21283 (2016).
- [13] J. Hu *et al.*, *Scientific Reports* **6**, 18674 (2016).
- [14] A. A. Soluyanov, D. Gresch, Z. Wang, Q. Wu, M. Troyer, X. Dai, and B. A. Bernevig, *Nature* **527**, 495 (2015).
- [15] L. Huang *et al.*, *Nat. Mater* **advance online publication** (2016).
- [16] K. Deng *et al.*, *Nat. Phys.* <http://dx.doi.org/10.1038/nphys3871> (2016).
- [17] L. Lu, L. Fu, J. D. Joannopoulos, and M. Soljacic, *Nat. Photon* **7**, 294 (2013).
- [18] L. Lu, Z. Wang, D. Ye, L. Ran, L. Fu, J. D. Joannopoulos, and M. Soljačić, *Science* **349**, 622 (2015).
- [19] M.-L. Chang, M. Xiao, W.-J. Chen, and C. T. Chan, in *Preprint at <https://arxiv.org/abs/1607.029182016>*.
- [20] L. Wang, S.-K. Jian, and H. Yao, *Phys Rev A* **93**, 061801 (2016).
- [21] M. Xiao, Q. Lin, and S. Fan, *Phys. Rev. Lett.* **117**, 057401 (2016).
- [22] W. Gao, B. Yang, M. Lawrence, F. Fang, B. Beri, and S. Zhang, *Nat. Commun.* **7**, 12435 (2016).
- [23] F. Mei, Z.-Y. Xue, D.-W. Zhang, L. Tian, C. Lee, and S.-L. Zhu, in *Preprint at <https://arxiv.org/abs/1605.072982016>*.
- [24] J. Noh, S. Huang, D. Leykam, Y. D. Chong, K. Chen, and M. C. Rechtsman, in *Preprint at <https://arxiv.org/abs/1610.010332016>*.
- [25] M. Xiao, W. J. Chen, W. Y. He, and C. T. Chan, *Nat. Phys.* **11**, 920 (2015).
- [26] Z. Yang and B. Zhang, *Physical Review Letters* **117**, 224301 (2016).
- [27] Z. Fang *et al.*, *Science* **302**, 92 (2003).
- [28] Q. Lin, M. Xiao, L. Yuan, and S. Fan, *Nat. Commun.* **7**, 13731 (2016).
- [29] L. Yuan, Y. Shi, and S. Fan, *Opt. Lett.* **41**, 741 (2016).
- [30] M. Mancini *et al.*, *Science* **349**, 1510 (2015).
- [31] A. Celi, P. Massignan, J. Ruseckas, N. Goldman, I. B. Spielman, G. Juzeliūnas, and M. Lewenstein,

一维光子晶体中拓扑量及其界面态的研究

Phys. Rev. Lett. **112**, 043001 (2014).

[32] B. Lian and S.-C. Zhang, Phys. Rev. B **94**, 041105 (2016).

[33] M. Xiao, Z. Q. Zhang, and C. T. Chan, Phys. Rev. X **4**, 021017 (2014).

[34] N. Yu, P. Genevet, M. A. Kats, F. Aieta, J.-P. Tetienne, F. Capasso, and Z. Gaburro, Science **334**, 333 (2011).

[35] C. Fang, L. Lu, J. Liu, and L. Fu, Nat. Phys. **12**, 936 (2016).

第四章 广义空间拓扑相变与“Nodal Line”相

4.1 引言

在凝聚态中，拓扑半金属有三类，分别为狄拉克半金属[1-8]，外尔半金属[4,9-16]

以及 nodal line 半金属[17-23]，其哈密顿量分别具有 $H = \sum_{i=1}^3 v_i k_i \alpha_i$ ， $H = \sum_{i=1}^3 v_i k_i \sigma_i$

和 $H = h_1(k_1, k_2) \sigma_x + k_3 \sigma_z$ 类似的形式，其中 $\alpha_i = \begin{pmatrix} 0 & \sigma_i \\ \sigma_i & 0 \end{pmatrix}$ ， σ_i 则为泡利矩阵，

$i=1,2,3$ 。对于狄拉克半金属，因其哈密顿量为 4×4 矩阵，因此其为三维空间的 4 重简并点；而外尔半金属则为 2×2 矩阵，为三维空间两重简并点；而 nodal line 半金属则比较特殊，不在是简并点，而是空间简并的线，可以形象地理解为二维狄拉克点在第三个维度上移动而形成，因此其具有许多不同于狄拉克点和外尔点的性质，引起了许多研究者的兴趣。

在第三章中，我们详细地介绍了外尔点，由于其包含了所有的泡利矩阵，因此单独加入扰动项无法打开带隙，只能移动外尔点的位置，也就是说外尔拓扑相是非常稳定的状态。尽管如此，如果考虑让“电荷”相反的两个外尔点重叠，则可以破坏外尔拓扑相，产生带隙。在本章节中，我们引入第三个参数，从而将三维参数空间拓展到四维，并且观测到了拓扑相变[24]，而“Nodal Line”则对应相变点。

4.2 光子晶体色散的拓扑相变

在第三章中，我们将光子晶体原胞设计成四层平板构成，并且每层的厚度满足如下的关系式：

$$\begin{aligned}
 d_{a1} &= (1+p)d_a \\
 d_{b1} &= (1+q)d_b \\
 d_{a2} &= (1-p)d_a \\
 d_{b2} &= (1-q)d_b
 \end{aligned}
 \tag{4.1}$$

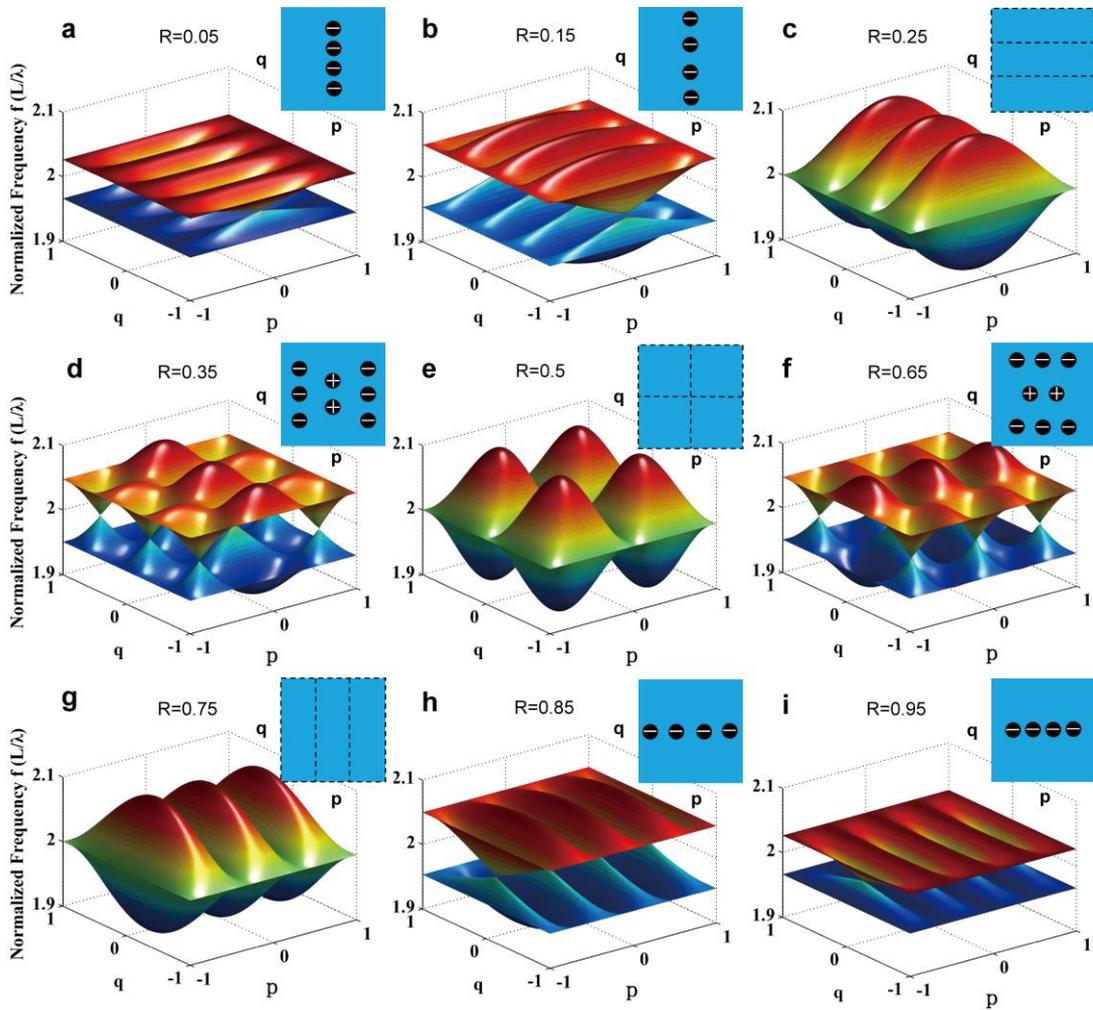


图 4.1, a-i, 光子晶体在 p - q 空间第 4,5 阶能带色散, 分别对应 $R=0.05, 0.15, 0.25, 0.35, 0.5, 0.65, 0.75, 0.85,$ 和 0.95 , 此时 $k=0$ 。

一维光子晶体中拓扑量及其界面态的研究

其中平板 A1 和 A2 为氧化铅，其折射率 $n_a=2.00$ ，厚度分别为 da_1 和 da_2 ；而平板 B1 和 B2 为二氧化硅，其折射率 $n_b=1.45$ ，厚度分别为 db_1 和 db_2 。尽管引入了 p, q 这两个参数，我们可以定义第三个参数 R ，其定义为 $R = n_a d_a / (n_a d_a + n_b d_b)$ ，即平板 A1 和 A3 中所累积的光程占总光程的比例，因此其取值范围为 $(0, 1)$ 。在图 4.1 中，我们画出了光子晶体在 p - q 空间第 4,5 阶能带色散，分别对应 $R=0.05, 0.15, 0.25, 0.35, 0.5, 0.65, 0.75, 0.85$ ，和 0.95 ，此时 $k=0$ 。我们可以清楚地看到随着 R 取值变化，光子晶体的色散经历了 3 次相变，分别对应 $R=0.25, 0.5$ 和 0.75 ，在 p - q 空间不再有外尔点，取而代之的为一些简并线（插图中用黑色虚线表示）；当经过相变点 $R=0.25$ 时，我们可以看到外尔点的数目变化，由 4 个“电荷”-1 的外尔点变为 6 个“电荷”-1 的外尔点和 2 个“电荷”+1 的外尔点，而总“电荷”为-4；当经过相变点 $R=0.5$ 时，尽管外尔点的数量没有变化，但可以看到其位置产生了突变；当经过相变点 $R=0.75$ 时，我们可以看到外尔点的数目变化，由 6 个“电荷”-1 的外尔点和 2 个“电荷”+1 的外尔点变为 4 个“电荷”-1 的外尔点，而总“电荷”为-4。在相变点时，光子晶体色散类似于“nodal line 半金属”。

4.3 广义空间中光子晶体的“Nodal Line” 相

在3.2节中，我们采用了转移矩阵来推导外尔点的哈密顿量，同样，在本节中我们依旧使用转移矩阵。对于原胞包含四层平板的光子晶体，其转移矩阵如下：

$$\mathbf{T} = \begin{pmatrix} C & D \\ D^* & C^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A & B \\ B^* & A^* \end{pmatrix} \quad (4.2)$$

其中

$$A = e^{ik_a d_{a1}} \left[\cos(k_b d_{b1}) + \frac{i}{2} \left(\frac{n_b}{n_a} + \frac{n_a}{n_b} \right) \sin(k_b d_{b1}) \right] \quad (4.3)$$

$$B = e^{-ik_a d_{a1}} \left[\frac{i}{2} \left(\frac{n_b}{n_a} - \frac{n_a}{n_b} \right) \sin(k_b d_{b1}) \right] \quad (4.4)$$

$$C = e^{ik_a d_{a2}} \left[\cos(k_b d_{b2}) + \frac{i}{2} \left(\frac{n_b}{n_a} + \frac{n_a}{n_b} \right) \sin(k_b d_{b2}) \right] \quad (4.5)$$

$$D = e^{-ik_a d_{a2}} \left[\frac{i}{2} \left(\frac{n_b}{n_a} - \frac{n_a}{n_b} \right) \sin(k_b d_{b2}) \right] \quad (4.6)$$

考虑周期性边界条件，我们可以得到：

$$\left[\mathbf{T} - e^{ik\Lambda} \right] \begin{pmatrix} c^+ \\ c^- \end{pmatrix} = 0 \quad (4.7)$$

其中 $\Lambda = 2(d_a + d_b)$ 。因此可以得到

$$\text{Det} \begin{vmatrix} A - e^{ik\Lambda} & B \\ C & D - e^{ik\Lambda} \end{vmatrix} = 0 \quad (4.8)$$

即

$$e^{i2k\Lambda} - (A + D)e^{ik\Lambda} + AD - BC = 0 \quad (4.9)$$

由于 T 为酉矩阵，因此

$$AD - BC = 1 \quad (4.10)$$

所以公式 4.8 的解可以写成

$$e^{ik\Lambda} = \frac{(A + D)}{2} \pm \frac{\left((A + D)^2 - 1 \right)^{1/2}}{2} \quad (4.11)$$

一维光子晶体中拓扑量及其界面态的研究

简单的相加之后我们可以得到

$$\cos(k\Lambda) = \frac{A+D}{2} \quad (4.12)$$

因为 $A^*=D$, 因此 $A+D$ 为实数。若 $A+D > 2$, 则 k 必为复数, 此时对应光子晶体禁带; 反之则为导带。将公式 4.1 带入上式, 经过一些数学简化, 我们可以得到:

$$\cos(k\Lambda) = -\frac{1}{8} \left(\frac{n_b}{n_a} - \frac{n_a}{n_b} \right)^2 \left[\cos\left(\frac{2\pi\nu L}{c} R\right) \cos\left(\frac{2\pi\nu L}{c} q(1-R)\right) \right] + \quad (4.13)$$

$$-\frac{1}{8} \left(\frac{n_b}{n_a} - \frac{n_a}{n_b} \right)^2 \left[\cos\left(\frac{2\pi\nu L}{c} pR\right) \cos\left(\frac{2\pi\nu L}{c} (1-R)\right) \right] + \quad (4.14)$$

$$\frac{1}{8} \left(\frac{n_b}{n_a} - \frac{n_a}{n_b} \right)^2 \left[\cos\left(\frac{2\pi\nu L}{c} pR\right) \cos\left(\frac{2\pi\nu L}{c} q(1-R)\right) \right] + \quad (4.15)$$

$$\frac{1}{16} \left(\frac{n_b}{n_a} + \frac{n_a}{n_b} + 2 \right)^2 \left[\cos\left(\frac{2\pi\nu L}{c}\right) \right] + \quad (4.16)$$

$$\frac{1}{16} \left(\frac{n_b}{n_a} + \frac{n_a}{n_b} - 2 \right)^2 \left[\cos\left(\frac{2\pi\nu L}{c} (2R-1)\right) \right] \quad (4.17)$$

其中 ν 为频率, $L = 2(n_a d_a + n_b d_b)$ 为光子晶体原胞的光程, $R = n_a d_a / (n_a d_a + n_b d_b)$, 即平板 A1 和 A2 中所累积的光程占总光程的比例, 因此其取值范围为 $(0, 1)$ 。根据公式 4.13-4.17, 我们可以看到, 如果做变换:

$$\begin{aligned} p &\rightarrow q' \\ q &\rightarrow p' \\ R &\rightarrow 1-R \end{aligned} \quad (4.18)$$

可以看到 $\cos(k\Lambda)$ 的取值不变。也就是说, 如果将 R 取值变为 $1-R$, 光子晶体的色散等效于在 p - q 空间旋转 90° , 如图 4.1 中 a 和 i, b 和 h, c 和 g, d 和 f。

对于 nodal line 色散 (图 4.1 中 c, e 和 g), 我们可以看这些简并线平行于 $p=0$ 或 $q=0$ 。若简并线的位置对应 $p=p_0$, 则对于任意 q 值, 该点参数对应的光子晶体均有简并点 (无禁带), 即 $\cos(k\Lambda) = \pm 1$, 分别对应 $k=0$ 和 $k=0.5k_0$ ($k_0 = 2\pi/\Lambda$), 并且在对应的频率 ν_0 为其极值点, 即 $|\cos(k\Lambda)| \leq 1$, 所以 k 均有实解。由于在线上不依赖于 q 的取值, 所以公式 4.13 和 4.15 需要相消, 因此

一维光子晶体中拓扑量及其界面态的研究

$$\cos\left(\frac{2\pi\nu L}{c} R\right) = -\cos\left(\frac{2\pi\nu L}{c} pR\right) \quad (4.19)$$

根据数值模拟的结果，我们猜想 nodal line 对应的频率为 $\nu = nc/2L$ ，其中 c 为真空中的光速， L 为光子晶体原胞的光程， n 对应第 n 阶禁带。将频率带入公式 4.13-4.17，我们可以得到：

$$\cos(k\Lambda) = -\frac{1}{8} \left(\frac{n_b}{n_a} - \frac{n_a}{n_b}\right)^2 [\cos(n\pi R) \cos(n\pi q(1-R))] + \quad (4.20)$$

$$-\frac{1}{8} \left(\frac{n_b}{n_a} - \frac{n_a}{n_b}\right)^2 [\cos(n\pi pR) \cos(n\pi(1-R))] + \quad (4.21)$$

$$\frac{1}{8} \left(\frac{n_b}{n_a} - \frac{n_a}{n_b}\right)^2 [\cos(n\pi pR) \cos(n\pi q(1-R))] + \quad (4.22)$$

$$\frac{1}{16} \left(\frac{n_b}{n_a} + \frac{n_a}{n_b} + 2\right)^2 [\cos(n\pi)] + \quad (4.23)$$

$$\frac{1}{16} \left(\frac{n_b}{n_a} + \frac{n_a}{n_b} - 2\right)^2 [\cos(n\pi(2R-1))] \quad (4.24)$$

由于在 nodal line 位置不依赖于 q ，因此公式 4.20 和 4.22 相加为 0，则

$$nR = npR + 2\mathbb{Z} \quad (4.25)$$

\mathbb{Z} 为任意整数。由于 $\cos(k\Lambda) = \pm 1$ ，我们做出如下猜想：

$$R = \frac{m}{n}, \quad m \in \mathbb{Z} \ \& \ 0 < m < n \quad (4.26)$$

公式 4.20-4.24 可以简化成：

$$\begin{aligned} \cos(k\Lambda) = & -\frac{1}{8} \left(\frac{n_b}{n_a} - \frac{n_a}{n_b}\right)^2 [\cos((m-2n\mathbb{Z})\pi) \cos(\pi(n-m))] + \\ & \frac{1}{16} \left(\frac{n_b}{n_a} + \frac{n_a}{n_b} + 2\right)^2 [\cos(n\pi)] + \\ & \frac{1}{16} \left(\frac{n_b}{n_a} + \frac{n_a}{n_b} - 2\right)^2 [\cos(\pi(2m-n))] \end{aligned} \quad (4.27)$$

若 $n = 2\mathbb{Z}$ ，则 $m-2n\mathbb{Z}$ 和 $n-m$ 具有相同的奇偶性；而 n 和 $2m-n$ 均为偶数，因此 $\cos(k\Lambda) = 1$ ，对应 $k=0$ ；若 $n = 2\mathbb{Z} + 1$ ，则 $m-2n\mathbb{Z}$ 和 $n-m$ 具有相反的奇偶性，而 n 和 $2m-n$ 均为奇数，因此 $\cos(k\Lambda) = -1$ ，对应 $k=0.5k_0$ 。

一维光子晶体中拓扑量及其界面态的研究

为了证明 $\nu = nc/2L$ 为简并点的频率，我们还需要证明 $\cos(k\Lambda)$ 为极值点。我们定义 $\nu = \nu'2L/nc$ ，则色散方程可以写成：

$$(-1)^n \cos(k\Lambda) = 1 - \frac{1}{8} \left(\frac{n_b}{n_a} - \frac{n_a}{n_b} \right)^2 [\cos(pm\pi\nu') \cos(\pi(n-m)\nu')] + \frac{1}{16} \left(\frac{n_b}{n_a} + \frac{n_a}{n_b} + 2 \right)^2 [\cos(n\pi\nu')] + \frac{1}{16} \left(\frac{n_b}{n_a} + \frac{n_a}{n_b} - 2 \right)^2 [\cos(\pi(2m-n)\nu')] \quad (4.28)$$

其一阶偏导数为：

$$(-1)^n \partial [\cos(k\Lambda)] / \partial \nu = \frac{1}{8} \left(\frac{n_b}{n_a} - \frac{n_a}{n_b} \right)^2 [pm\pi \sin(pm\pi\nu') \cos(\pi(n-m)\nu')] + \frac{1}{8} \left(\frac{n_b}{n_a} - \frac{n_a}{n_b} \right)^2 [\pi(n-m) \cos(pm\pi\nu') \sin(\pi(n-m)\nu')] + \frac{1}{16} \left(\frac{n_b}{n_a} + \frac{n_a}{n_b} + 2 \right)^2 [-n\pi \sin(n\pi\nu')] + \frac{1}{16} \left(\frac{n_b}{n_a} + \frac{n_a}{n_b} - 2 \right)^2 [\pi(2m-n) \sin(\pi(2m-n)\nu')] \quad (4.29)$$

当 ν' 为整数时，一阶偏导数为 0，因此可以证明其为极值点。其二阶偏导数则为：

$$(-1)^n \partial^2 [\cos(k\Lambda)] / \partial \nu^2 = \frac{1}{8} \left(\frac{n_b}{n_a} - \frac{n_a}{n_b} \right)^2 [(pm\pi)^2 + \pi^2(n-m)^2] + \frac{1}{16} \left(\frac{n_b}{n_a} + \frac{n_a}{n_b} + 2 \right)^2 [n^2\pi^2] - \frac{1}{16} \left(\frac{n_b}{n_a} + \frac{n_a}{n_b} - 2 \right)^2 [\pi^2(2m-n)^2] \quad (4.30)$$

经过一些数学简化，可以写成：

$$(-1)^n \partial^2 [\cos(k\Lambda)] / \partial \nu^2 = \frac{1}{16} \left(\left(\frac{n_b}{n_a} \right)^2 - \left(\frac{n_a}{n_b} \right)^2 \right) [2(pm\pi)^2 - 2m^2\pi^2] + \frac{1}{16} \left(\frac{n_b}{n_a} + \frac{n_a}{n_b} \right) [6(2m-n)^2\pi^2 - 6n^2\pi^2] - [4(pm\pi)^2 + 4(n-m)^2\pi^2 + 2n^2\pi^2 + 2(2m-n)^2\pi^2] \quad (4.31)$$

由于 $p < 1$ ， $m < n$ ，因此公式 4.31 的右边部分小于 0。当 n 为奇数时， $\partial^2 [\cos(k\Lambda)] / \partial \nu^2 > 0$ ，因此对应极小值，即 $\cos(k\Lambda) \geq -1$ ，即光子晶体无禁带；若 n 为偶数时， $\partial^2 [\cos(k\Lambda)] / \partial \nu^2 < 0$ ，因此对应极大值，即 $\cos(k\Lambda) \leq 1$ ，即光子晶体无禁带。综合公式 4.27，4.29 和 4.30，我们已经证明在 $\nu = nc/2L$ 确为简并点。

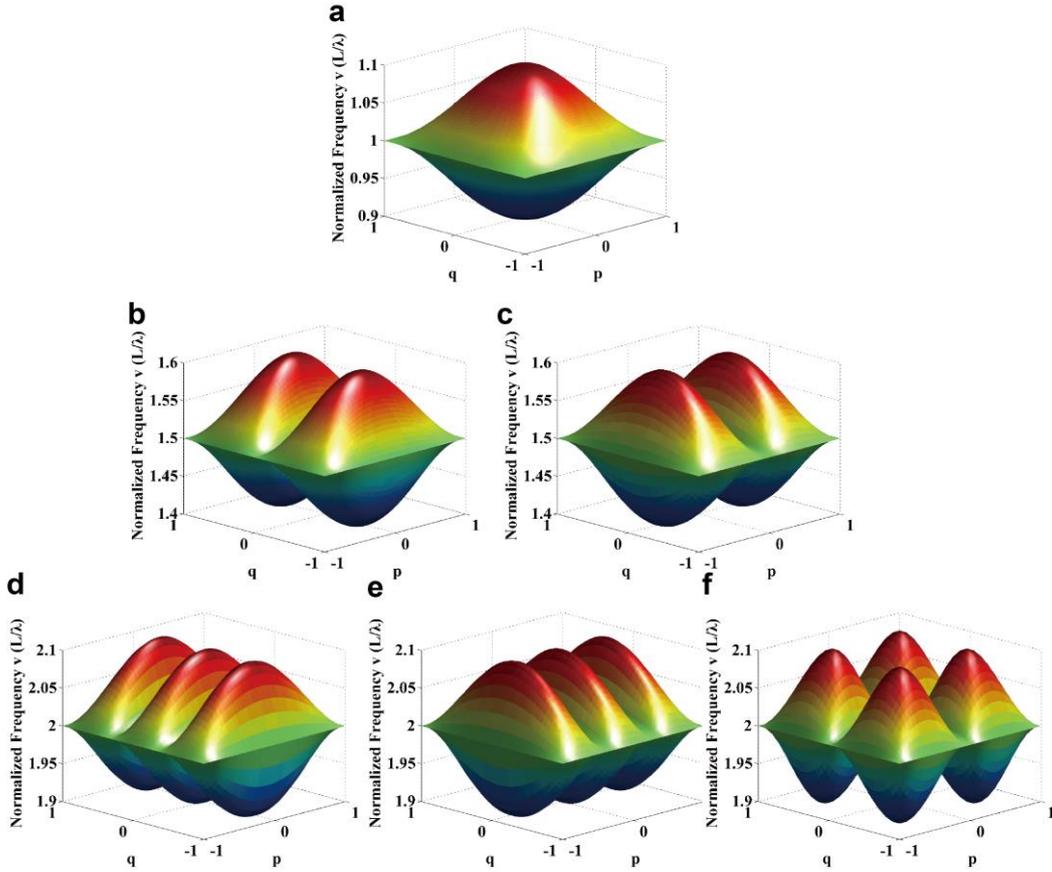


图 4.2, a, 第 2 阶禁带中的 nodal line 色散。b, c, 第 3 阶禁带中的 nodal line 色散；d, e, f, 第 4 阶禁带中的 nodal line 色散。

在上述讨论中，我们使用了公式 4.25 和 4.26 这两个条件，简化之后即为：

$$R = \frac{m}{n} \tag{4.32}$$

$$m = pm + 2\mathbb{Z}$$

其中 $m \in \mathbb{Z} \ \& \ 0 < m < n$ 。根据公式 4.32 我们可以确定简并线的位置。若 $n=1$ ，则 m 无解，因此第 1 解禁带没有相变点，即 nodal line 色散；若 $n=2$ ， $m=1$ ，因此 $p=1$ 或 $p=-1$ ，因此简并线位置在 $p=-1$ 和 $p=1$ ，如图 4.2a 所示；若 $n=3$ ， m 取值 1 或 2。若 $m=1$ 即 $R=1/3$ ， p 的取值为 -1 或 $+1$ ，因此简并线位置在 $p=-1$ 和 $p=1$ ，如图 4.2b 所示；若 $m=2$ 即 $R=2/3$ ， p 的取值为 $-1, 0$ 或 $+1$ ，因此简并线位置在 $p=-1, p=0$ 和 $p=1$ ，如图 4.2c 所示；若 $n=4$ ，因此 m 的取值为 $1, 2, 3$ 。若 $m=1$ 即 $R=1/4$ ，

一维光子晶体中拓扑量及其界面态的研究

p 的取值为-1 或+1, 因此简并线位置在 $p=-1$ 和 $p=1$, 如图 4.2d 所示; 若 $m=2$ 即 $R=2/4$, p 的取值为-1, 0 或+1, 因此简并线位置在 $p=-1$, $p=0$ 和 $p=1$, 如图 4.2e 所示; 若 $m=3$ 即 $R=3/4$, p 的取值为-1, $-1/3$, $1/3$ 或+1, 因此简并线位置在 $p=-1$, $p=-1/3$, $p=1/3$ 和 $p=1$, 如图 4.2f 所示。

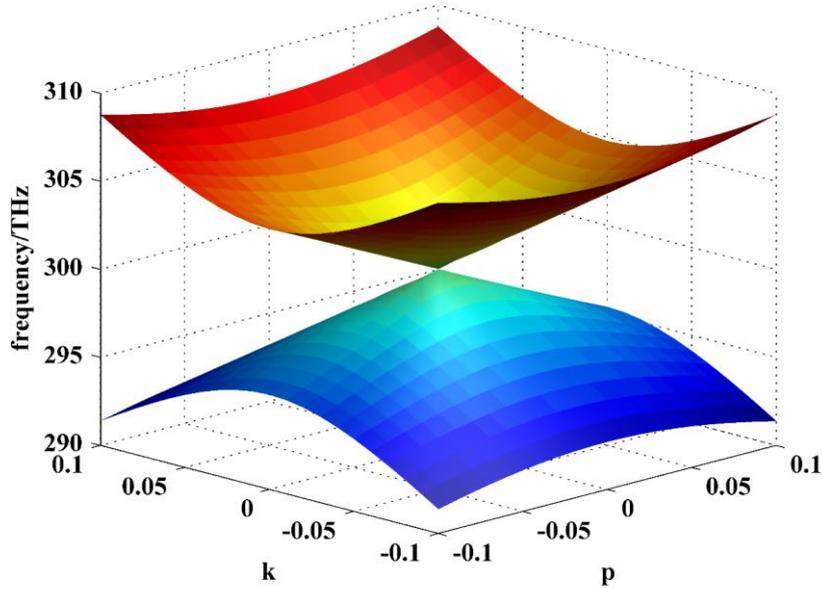


图 4.3, 光子晶体第 4,5 阶能带色散形成狄拉克锥, 这边 $R=0.5$, $q=0.5$ 。

在图 4.3 中, 我们计算了光子晶体的第 4,5 阶能带色散, 不同于图 4.1 和 4.4, 我们固定 $q=0.5$, 因此其色散是 p 和 k 的函数。由于 $R=0.5$, 因此 $p=0$ 即为简并线的位置。可以清楚地看到, 这两阶能带形成了狄拉克锥。按照 3.2 节中计算 Berry 相位的公式:

$$\gamma_n = -\text{Im} \sum_{j=1}^N \ln \left(\int_0^L \varepsilon(x) u_{n,p_j,q,k_j}^*(x) u_{n,p_{j+1},q,k_{j+1}}(x) dx \right) \quad (4.33)$$

其中 $\varepsilon(x)$ 是光子晶体原胞的介电函数, u_{n,p_j,q,k_j} 为第 n 阶能带上对应 p_j , q 和 k_j 时的本征电场分布函数, $p_j = r \sin(\theta) \cos(j2\pi/N)$, $k_j = r \sin(\theta) \sin(j2\pi/N)$ 。我们分别计算了第 4 和第 5 阶能带的 Berry 相位, 均得到 π 的结果, 即证明了其为狄拉克锥。我们在 $p=0$ 线上取不同的 q 值计算, 都得到了相同的结果, 也就是说

一维光子晶体中拓扑量及其界面态的研究

该简并线的确为 nodal line。

4.4 全透射与 Nodal Line 相

考虑光从空气入射到半无穷厚的光子晶体，若频率处在禁带区域区域，则光会被全反射；若频率处在导带内，则会有透射。但若频率处在 nodal line 位置（如图 4.4a），即简并点的频率，透射或反射的性质依然是一个疑问，这引起了我们极大的兴趣。

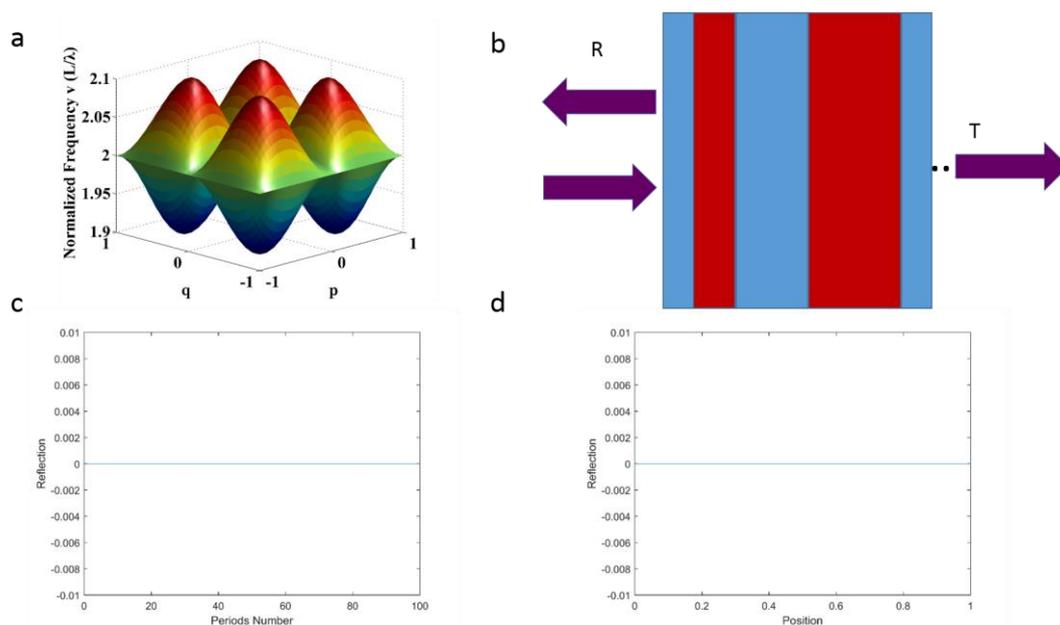


图 4.4, a, $R=0.5$, $k=0$ 时第 4,5 阶能带的色散 (nodal line)。b, 有限厚度的光子晶体在空气中的透反射。c, d, 对应 nodal line 频率时, 光子晶体反射率与周期数和原胞切面位置的关系。

考虑有限周期数的光子晶体处在空气中，如图 4.4b 所示，为了更具有普遍性，我们考虑光子晶体的切面不是平板 A1 的边界，因此原胞可以表示成 5 层，其中第 1 和 5 层相当于原来的平板 A1。我们选取了简并线上的一点， $R=0.5$, $p=0$, $q=0.5$ ，计算了对应光子晶体的反射率与原胞周期数的关系，其结果如图 4.4c 所示，可以看到其反射率始终为 0；另外我们选取不同的原胞，即不同的切面位置，其结果如图 4.4d 所示，其反射率均为 0。计算不同的位置，我们均得到了相同的结果。

一维光子晶体中拓扑量及其界面态的研究

为了验证上述的结论，我们仍然采用转移矩阵来计算光子晶体的反射率。由于原胞保持相同，因此原胞的转移矩阵依然可以写成：

考虑光子晶体置于空气中，其周期数为 n ，则整个结构的转移矩阵可以表示成：

$$T = M_{12} [M_{a11} M_{ab} M_{b1} M_{ba} M_{a2} M_{ab} M_{b2} M_{ba} M_{a12}]^n M_{21} \quad (4.34)$$

其中 M_{12} , M_{21} , M_{ab} , M_{ba} 分别为空气-氧化铪，氧化铪-空气，氧化铪-氧化硅和氧化硅-氧化铪界面的转移矩阵； M_{a11} , M_{b1} , M_{a2} , M_{b2} , M_{a12} 分别为 5 层 s 平板中的传播矩阵，分别可以写成：

$$M_{12} = \frac{1}{2n_{air}} \begin{pmatrix} n_{air} + n_a & n_{air} - n_a \\ n_{air} - n_a & n_{air} + n_a \end{pmatrix} \quad (4.35)$$

$$M_{21} = \frac{1}{2n_a} \begin{pmatrix} n_{air} + n_a & n_a - n_{air} \\ n_a - n_{air} & n_{air} + n_a \end{pmatrix} \quad (4.36)$$

$$M_{a11} = \begin{pmatrix} e^{ik_a d_{a11}} & 0 \\ 0 & e^{-ik_a d_{a11}} \end{pmatrix} \quad (4.37)$$

$$M_{ab} = \frac{1}{2n_a} \begin{pmatrix} n_a + n_b & n_a - n_b \\ n_a - n_b & n_a + n_b \end{pmatrix} \quad (4.38)$$

$$M_{b1} = \begin{pmatrix} e^{ik_b d_{b1}} & 0 \\ 0 & e^{-ik_b d_{b1}} \end{pmatrix} \quad (4.39)$$

$$M_{ba} = \frac{1}{2n_b} \begin{pmatrix} n_a + n_b & n_b - n_a \\ n_b - n_a & n_a + n_b \end{pmatrix} \quad (4.40)$$

$$M_{a2} = \begin{pmatrix} e^{ik_a d_{a2}} & 0 \\ 0 & e^{-ik_a d_{a2}} \end{pmatrix} \quad (4.41)$$

$$M_{b2} = \begin{pmatrix} e^{ik_b d_{b2}} & 0 \\ 0 & e^{-ik_b d_{b2}} \end{pmatrix} \quad (4.42)$$

$$M_{a12} = \begin{pmatrix} e^{ik_a d_{a12}} & 0 \\ 0 & e^{-ik_a d_{a12}} \end{pmatrix} \quad (4.43)$$

由于处在 nodal line 上面，我们可以得到：

一维光子晶体中拓扑量及其界面态的研究

$$\begin{aligned} k_a(d_{a11} + d_{a12}) &= j_1\pi \\ k_a d_{a2} &= j_2\pi \\ k_b(d_{b1} + d_{b2}) &= j_3\pi \end{aligned}, \quad j_1, j_2, j_3 \in \mathbb{Z} \quad (4.44)$$

将公式 4.44 带入 4.34-4.43，我们可以得到：

$$T = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (4.45)$$

也就是说如果入射方向为正方向，不会产生反方向的波矢，即无反射。因此在 nodal line 频率，光子晶体的反射率始终为 0。在图 4.5 中，我们同时计算了光子

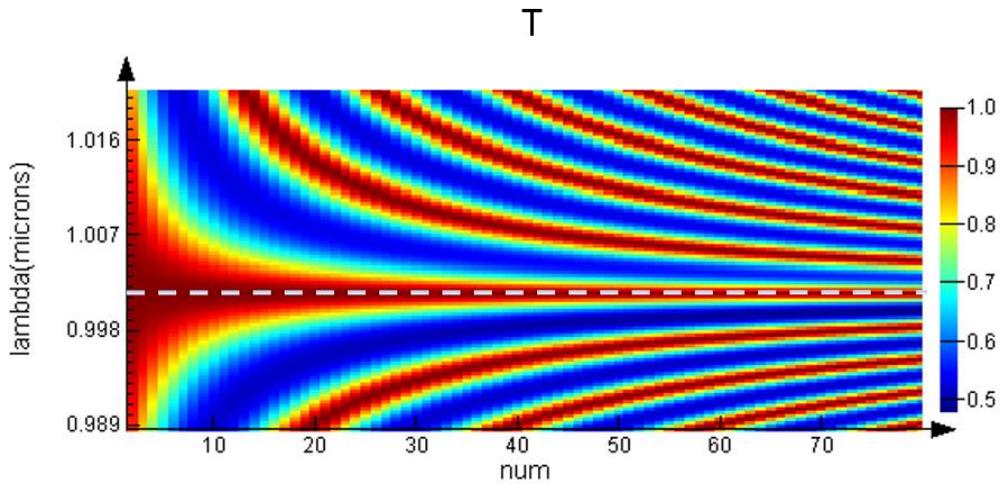


图 4.5，光子晶体反射率与频率和周期数的关系，白色虚线为 nodal line 对应的频率。

晶体透射率与频率和周期数的关系，可以看到在 nodal line 对应的频率（白色虚线），其透射率始终为 1；而在其他频率，其反射率会随周期数而变化（FP 腔共振）。

4.5 本章小结

在本章节中，我们引入了第 4 个维度参数，从而观测到了拓扑相变，并且观测到了新的拓扑相，即 nodal line；通过转移矩阵我们求解了 nodal line 出现的条件，并且可以确定 nodal line 的位置。计算其有限周期数的光子晶体的透反射，我们发现 nodal line 可以保证在该频率点的全透射。

参考文献

- [1] C. Zhang *et al.*, Nature Communications **8**, 13741 (2017).
- [2] P. Tang, Q. Zhou, G. Xu, and S.-C. Zhang, Nat Phys **12**, 1100 (2016).
- [3] B. J. Wieder, Y. Kim, A. M. Rappe, and C. L. Kane, Physical Review Letters **116**, 186402 (2016).
- [4] S.-Y. Xu *et al.*, Nat. Phys. **11**, 748 (2015).
- [5] A. C. Potter, I. Kimchi, and A. Vishwanath, Nature Communications **5**, 5161 (2014).
- [6] Z. K. Liu *et al.*, Nat Mater **13**, 677 (2014).
- [7] M. Neupane *et al.*, Nature Communications **5**, 3786 (2014).
- [8] S. M. Young, S. Zaheer, J. C. Y. Teo, C. L. Kane, E. J. Mele, and A. M. Rappe, Physical Review Letters **108**, 140405 (2012).
- [9] L. Huang *et al.*, Nat. Mater **advance online publication** (2016).
- [10] S.-Y. Xu *et al.*, Science **349**, 613 (2015).
- [11] S.-Y. Xu *et al.*, Science Advances **1** (2015).
- [12] B. Q. Lv *et al.*, Phys. Rev. X **5**, 031013 (2015).
- [13] A. A. Soluyanov, D. Gresch, Z. Wang, Q. Wu, M. Troyer, X. Dai, and B. A. Bernevig, Nature **527**, 495 (2015).
- [14] B. Q. Lv *et al.*, Nat Phys **11**, 724 (2015).
- [15] L. X. Yang *et al.*, Nat Phys **11**, 728 (2015).
- [16] C. Shekhar *et al.*, Nat Phys **11**, 645 (2015).
- [17] L.-K. Lim and R. Moessner, Physical Review Letters **118**, 016401 (2017).
- [18] Q. Xu, R. Yu, Z. Fang, X. Dai, and H. Weng, Physical Review B **95**, 045136 (2017).
- [19] T. Micklitz and M. R. Norman, Physical Review B **95**, 024508 (2017).
- [20] G. Bian *et al.*, Nature Communications **7**, 10556 (2016).
- [21] Z. Yan, P.-W. Huang, and Z. Wang, Physical Review B **93**, 085138 (2016).
- [22] W. M. H. Natori, E. C. Andrade, E. Miranda, and R. G. Pereira, Physical Review Letters **117**, 017204 (2016).
- [23] C. Fang, Y. Chen, H.-Y. Kee, and L. Fu, Phys. Rev. B **92**, 081201 (2015).
- [24] L. Lu, L. Fu, J. D. Joannopoulos, and M. Soljacic, Nat. Photon **7**, 294 (2013)

第五章 总结与展望

在本论文中，我们主要研究了一维光子晶体的拓扑量，包括一维空间中的 Zak 相位，以及三维空间中的 Weyl 点，Nodal Line 相等。通过研究光子晶体的拓扑量，可以帮助我们构造拓扑边界态，其具有广泛的应用前景。本论文的主要结论和创新性如下

1、一维光子晶体的拓扑量，即 Zak 相位为一抽象概念，因而无法直接测量。根据体块-边界联系，我们利用光子晶体与金属膜之间的界面态，在实验中测量得到了光子晶体的 Zak 相位。通过引入超构表面，我们实现了对界面态的多维度调控，使其具有广泛的应用前景。

2、在三维动量空间实现光学 Weyl 点往往需要设计非常复杂的结构，因而在实验中实现十分困难。通过引入两个人造维度，我们利用一维光子晶体实现了广义空间的 Weyl 点。受 Weyl 点的保护，光子晶体的反射相位在参数空间形成涡旋。该相位涡旋保证了光子晶体与任意反射衬底间界面态的存在。

3、由于广义空间没有维度限制，我们构造了一个广义四维空间。在该空间中，光子晶体色散的拓扑相变也被观测到，而相变点则对应 Nodal Line 相。理论证明，在 Nodal Line 相光子晶体具有完美透射的性质。

本论文基于一维光子晶体体系，探究了其在不同维度下的拓扑量以及拓扑界面态。由于采用一维光子晶体，其色散和本征波函数均可利用转移矩阵得到解析表达式，因此可以帮助我们更好地理解许多新奇现象的本质，例如 Weyl 半金属中的费米弧边界态等。其次，我们采用了人造维度的概念，可以构造出四维甚至更高维度的空间，来探索这些高维度空间的拓扑性质。而光子晶体拓扑量的研究可以帮助我们构造界面态，其具有十分广泛的应用前景。

一维光子晶体中拓扑量及其界面态的研究

攻博期间发表论文

发表论文目录

- 1、**Q. Wang**, M. Xiao, H. Liu, S. N. Zhu and C.T. Chan, " Optical interface states protected by synthetic Weyl Points" Accepted by *Phys. Rev. X* (2017)
- 2、**Q. Wang**, M. Xiao, H. Liu, S. N. Zhu and C.T. Chan, " Measurement of the Zak phase of photonic bands through the interface states of a metasurface/photonic crystal ", *Phys. Rev. B* 93, 041415(R) (2016)
- 3、**王强**, 刘辉, 祝世宁, “一维光子晶体的拓扑性质及其与超构表面间界面态的调控”, 中国科技论文在线 (2016)
- 4、X. Zhang, H. Liu, Z. G. Zhang, **Q. Wang** and S. N. Zhu, " Controlling thermal emission of phonon by magnetic metasurfaces", *Sci.Rep.* 7.41858 (2016)
- 5、C. Zhu, H. Liu, C. Sheng, F. Gao, **Q. Wang**, S.N. Zhu, Excitation of coherent plasmon modes in a polymer structure with side resonators, *SCIENCE CHINA Information Sciences*, 56 :120409(6) (2013)

一维光子晶体中拓扑量及其界面态的研究

致谢

值此论文完成之际，谨向所有关心和帮助过我的人表示衷心的感谢。

首先特别感谢我的导师祝世宁院士。祝老师严谨的治学作风，豁达的胸怀，睿智的谈吐、积极乐观的态度值得我用一生去学习。感谢祝老师提供这样一个国际领先的平台，让我不断的学习，进步，成长。在此向祝老师表达我最诚挚的谢意与最崇高的敬意。

感谢刘辉老师，感谢他在科研上对我的悉心指导与在生活上对我的关心帮助。本论文是在刘老师的悉心指导下完成的，课题开展过程中遇到很多困难，在刘老师的鼓励下一直坚持，最终守得云开见明月，取得有意义的成果。

感谢香港科技大学陈子亭老师。陈老师严谨的科研态度，创造性的思维方式给与了我极大地帮助。感谢斯坦福大学博士后肖孟，与他的合作使我受益匪浅。

感谢本实验室的吕鹏老师、徐平老师、谢臻达老师、李涛老师、胡小鹏老师、吕新杰老师、赵刚老师、王漱明老师，在科研上与生活上给予我的关心帮助。感谢李旭老师和丁小妹老师对我的帮助。

感谢超构材料小组张霞博士后，以及各位师兄弟和师妹们，他们是朱聪师兄，盛冲师兄，高飞师兄，王向阳，仲帆，张振国，张昊，郝倩予，胡梦莹，严志伟，乔通，冯晨等。感谢他们在实验上对我的帮助与支持，本论文得已顺利完成离不开他们的帮助。

感谢与我同年级的同学，他们是林惠斌、王雨淋、邹炯、杨娟娟、张群永。我们一同进组，一同成长，由稚嫩的师弟成长为师兄师姐。感谢实验室中各位同学，他们在生活上实验上对我帮助很多的，他们是金华师兄、李林师兄、李世凤师姐、陆亮亮师兄、程庆庆师兄、柏艳飞师兄、钟马林师兄、罗湘雯师姐等，以及倪睿、刘奕辰、杜正婷、贾鲲鹏、魏星、纽云飞、莫其金、孙昌伟、田晓慧、

一维光子晶体中拓扑量及其界面态的研究

刘华颖, 段佳辰、陈绩、徐贝贝、赵陈晨、李涵梦等。

感谢父母的养育之恩, 感谢父母毫无保留的关爱, 并一直全力支持我去追逐自己的梦想。感谢亲戚朋友对我生活上的无微不至的帮助。

最后, 感谢所有关心帮助过我的人!

谨以此文纪念我即将结束的硕博五年时光。

王强

二零一七年七月