



南京大學  
研究生畢業論文  
(申請博士學位)

論文題目: 光子晶体中拓扑半金属

与拓扑界面态的研究

作者: 胡梦莹

专业: 物理学

研究方向: 拓扑光子学

指导教师: 刘辉 教授

2021 年 6 月 25 日

南京大学博士学位论文  
光子晶体中拓扑半金属与拓扑界面态的研究

作者：胡梦莹

导师：刘辉 教授

南京大学物理学院  
固体微结构国家重点实验室

**Study of topological semimetals and topological interface states  
in photonic crystals**

**by Mengying Hu**

**Supervised by Prof. Hui Liu**

**Department of Physics, Nanjing University  
National Laboratory of Solid State Microstructures**

# 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： 所提交的学位论文，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事实办法》，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： \_\_\_\_\_

# 目录

摘要.....	1
Abstract.....	3
第一章 绪论.....	5
1.1 拓扑电子学研究简述.....	5
1.2 光学系统的拓扑研究.....	12
1.2.1 一维光学系统中的拓扑相和界面态.....	12
1.2.2 二维光学系统中的拓扑效应.....	17
1.2.3 三维光学系统中的拓扑半金属.....	20
1.3 本论文研究思路和论文结构.....	26
参考文献.....	27
第二章 光子晶体超晶格中 charge-2 狄拉克半金属与边界态.....	37
2.1 引言.....	37
2.2 光子晶体超晶格的构造.....	38
2.2.1 拓扑界面模式的实现和调控.....	38
2.2.2 两个拓扑界面模式的耦合强度及符号的调控.....	42
2.2.3 光子晶体超晶格拓扑能带的实现.....	45
2.3 合成空间中的 charge-2 狄拉克半金属及其衍生外尔半金属的实现和探测.....	51
2.4 拓扑边界态的调控.....	56
2.5 本章小结.....	59
参考文献.....	60
第三章 光子晶体超晶格中的次级拓扑界面态.....	65
3.1 引言.....	65
3.2 复合光子晶体超晶格的构造.....	66
3.3 次级拓扑界面态的调控与测量.....	73
3.4 有限复合光子晶体超晶格中的“零模式”.....	75
3.5 本章小结.....	76
参考文献.....	78
第四章 光子晶体中狄拉克 nodal line 半金属与 double-bowl 表面态.....	81
4.1 引言.....	81
4.2 光学狄拉克 nodal line 半金属的实现.....	82
4.2.1 能带的相交条件.....	82

4.2.2 光学 type-II 型狄拉克 nodal ring.....	85
4.3 光学狄拉克 nodal line 半金属的实验探测.....	87
4.3.1 面内色散的探测.....	87
4.3.2 垂直于面方向的色散提取.....	88
4.4 四重简并的 double-bowl 表面态.....	91
4.5 其他塔姆型表面态.....	94
4.6 本章小结.....	95
参考文献.....	97
第五章 总结与展望.....	100
已发表与待发表的论文.....	103
致谢.....	104

## 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：光子晶体中拓扑半金属与拓扑界面态的研究

物理学 专业 2016 级博士生姓名：胡梦莹

指导教师（姓名、职称）：刘辉 教授

### 摘要

拓扑光子学作为拓扑物理学的重要分支，近年来备受关注。基于光学系统的灵活性和多样性，人们设计构造了类似电子体系的拓扑相，例如光学拓扑绝缘体和光学拓扑半金属等。然而，由于光子作为玻色子与电子存在本质的不同，光学拓扑态具有与电子拓扑态完全不同的特性。因此，人们可以探索光子独有的拓扑现象和新奇应用，包括具有偏振的拓扑保护界面态等。本论文利用光子晶体，实现了新颖的光学拓扑半金属以及对光学拓扑界面态的调控。本论文主要取得如下成果：

1. 利用光子晶体构造超晶格，实现光学 charge-2 狄拉克半金属及其边界态调控：将两种不同拓扑性质的光子晶体交替堆叠形成超晶格结构，每个界面处都存在拓扑界面模式。通过调节相邻界面模式之间的耦合，得到具有拓扑特性的超晶格色散。再利用光子的赝自旋并引入合成维度，首次实现了光频的 charge-2 狄拉克半金属及其衍生的外尔半金属。同时，实现了有限超晶格系统中拓扑边界态的充分调控。半金属能带色散和边界态可通过透反射实验直接观测。

2. 利用光子晶体超晶格实现自旋依赖的次级拓扑界面态：利用光子晶体周期拼接构造两种拓扑性质不同的超晶格结构，再进一步将它们拼接得到复合超晶格，其界面上存在拓扑保护的界面态。由于这种界面态源于拓扑保护的人工光子轨道的杂化，因此被称为次级拓扑界面态。利用光子赝自旋自由度，改变超晶格结构参数可实现对自旋依赖的次级拓扑界面态的精确调控。实验上，利用透射测量可直接验证次级拓扑界面态的自旋依赖特性。

3. 利用光子晶体实现三维光学狄拉克 nodal line 半金属及其 double-bowl 表面态: 利用光子晶体对称性和光子自旋, 建立了一种全新而简易的机制首次实现了严格的三维光学 type-II 型狄拉克 nodal line 半金属。这种狄拉克 nodal line 半金属是光子体系所特有的, 其具备四重简并的狄拉克 nodal ring。在光子晶体与金属膜的界面处, 可形成两组不同偏振的 double-bowl 表面态。这两组表面态几乎在整个测量光谱范围内简并。实验上, 通过测量透反射, 可直接观测到光学狄拉克 nodal line 半金属色散及其 double-bowl 表面态。

**关键词:** 光学拓扑半金属、光学 charge-2 狄拉克点、光学 nodal line 半金属、拓扑界面态、光子晶体

南京大学研究生毕业论文英文摘要首页用纸

THESIS: Study of topological semimetals and topological interface states  
in photonic crystals

SPECIALIZATION: Physics

POSTGRADUATE: Mengying Hu

MENTOR: Prof. Hui Liu

**Abstract**

As a burgeoning field of topological physics, the study of topological photonics has captured huge attention in recent years. Based on the flexibility and diversity of photonic systems, people have engineered topological phases of electrons for photons, such as photonic topological insulators and topological semimetals, etc. However, there exist essential differences between photons (bosons) and electrons, so that topological phases of photons own unique characteristics distinct from those of electrons. Therefore, people are capable to explore topological phenomena and novel applications exclusive to photons, including topologically protected interface states equipped with polarizations. Assisted by photonic crystals, the contributions of this thesis are the realization of novel photonic topological semimetals and the tunability of topological interface states. The main achievements are as follows:

1. Realizing photonic charge-2 Dirac semimetals and the tunability of boundary states by utilizing the superlattice formed by photonic crystals. Two kinds of photonic crystals with different topological properties stacking alternatively forms the superlattice structure, in which topological interface modes emerge at each interface. By tuning the coupling between adjacent interface states, the superlattice dispersion with topological features is achieved. Then by harnessing the pseudospins of photons and introducing synthetic dimensions, the charge-2 Dirac semimetal and its spawned Weyl semimetals in the visible regime are realized for the first time. Meanwhile, the sufficient control of topological boundary states appearing in truncated superlattice systems is acquired. The band dispersions as well as boundary states can be observed straightforwardly via transmission and reflection experiments.

2. Realizing secondary topological interface states based on the superlattice of photonic crystals. By stacking the structures of photonic crystals periodically, two superlattices with distinct topological phases are formed, and then they are connected with each other to form a complex superlattice, in which topologically protected interface states emerge at the interface between two superlattices. Since such kind of topological interface state originates from the hybridization of artificial photonic orbitals, which are of topological origin as well, it is thus named as secondary topological interface state. Drawing on the pseudospin degree of photons and varying structural parameters of the superlattice, the precise control of spin-dependent secondary topological interface states is attained. In experiment, the spin-dependent property of secondary topological interface states can be evidenced unambiguously through measured transmission spectra.

3. Realizing photonic Dirac nodal line semimetal and double-bowl surface states by using the photonic crystal structure. By exploring symmetries of the photonic crystal together with the pseudospins of photons, a novel and simple mechanism is established to realize a stringent photonic Dirac nodal line semimetal of type-II. This sort of Dirac nodal line semimetal is unique to photonic systems, exhibiting a four-fold Dirac nodal ring degeneracy. At the interface between the photonic crystal and the metallic film, two sets of double-bowl surface states with different polarizations can be excited, and they are almost degenerate over an entire range of spectrum. Experimentally, the dispersions of photonic Dirac nodal line semimetal together with associated double-bowl surface waves are directly observed.

**Key Words:** photonic topological semimetal, photonic charge-2 Dirac point, photonic nodal line semimetal, topological interface state, photonic crystal

## 第一章 绪论

作为近代数学的重要分支，拓扑学一开始被引入研究电子系统，成功揭示了量子霍尔效应、量子自旋霍尔效应和拓扑半金属等诸多现象和物态的拓扑特性。此后，人们把拓扑学理论从凝聚态引入到光学体系，开创了拓扑光子学这一新兴的光学研究领域。近十多年，拓扑光子学发展迅速。人们不仅在光子体系中实现了类似电子体系的各种拓扑态，如光学拓扑绝缘体和光学拓扑半金属；还探索了光学系统中独有的拓扑现象，包括具有偏振的抗散射拓扑表面态等等。本章我们先简要介绍拓扑电子学的研究历史，回顾了拓扑物理的基本概念和定义。然后介绍了不同维度光学系统中的拓扑效应，其中着重介绍了我们所研究的三维光学拓扑半金属和拓扑界面态的研究进展。

### 1.1 拓扑电子学研究简述

#### A. 拓扑相

根据布洛赫定理，周期势中量子的本征态形成能带，被能隙分隔开。固态材料的金属或绝缘性质取决于自身能带结构。除了能带的色散，动量空间中布洛赫本征态的几何结构也会对材料的电子性质产生影响，这最早是由 Karplus 和 Luttinger[1]以及 Adams 和 Blount[2]发现的。这种几何结构性质可由与每个能带相关的整数全局拓扑不变量（topological invariant）所反映。

我们考虑一个周期势场中的哈密顿量  $H(\mathbf{r}) = H(\mathbf{r} + \mathbf{R})$ 。由布洛赫定理可知，系统的本征函数一定具有这样的形式：

$$|\psi_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r})\rangle = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} |u_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r})\rangle, \quad (1.1)$$

这里  $|u_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r})\rangle$  是晶格常数  $\mathbf{R}$  的周期函数，即  $|u_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r})\rangle = |u_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r} + \mathbf{R})\rangle$ 。在倒空间， $|u_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r})\rangle$  对应  $H(\mathbf{k}) = e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} H(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$  的单元周期本征态，

$$H(\mathbf{k}) |u_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r})\rangle = E_{n,\mathbf{k}} |u_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r})\rangle. \quad (1.2)$$

因此，对应的能量本征值满足  $E_n(\mathbf{k}) = E_n(\mathbf{k} + \mathbf{K})$ ，其中  $\mathbf{K}$  为倒格矢周期。与指

数  $n$  有关的能量随波矢量  $\mathbf{k}$  连续变化，形成一个以  $n$  确定的能带，即第  $n$  个能带色散为  $E_n(\mathbf{k})$ 。

能带物理取决于它的色散关系  $E_n(\mathbf{k})$ ，但也取决于它的本征态  $|u_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r})\rangle$  如何随  $\mathbf{k}$  的变化而变化而表现出的几何性质 [1-5]。本征态的几何性质由其贝里相位 (Berry phase) [6, 7] 体现，接下来我们简要介绍如何得到贝里相位。由于晶格的周期性，我们求贝里相位时只需要满足  $\mathbf{k}$  遍历第一布里渊区。于是有以下结论：如果从能带  $n$  的态选一个局域波包，并使它在动量空间中沿封闭路径绝热移动，它将获得一个动态相位，其由依赖于  $\mathbf{k}$  能量的空间积分决定，即所谓的贝里相位 [8]：

$$\gamma = \oint \mathbf{A}_n(\mathbf{k}) \cdot d\mathbf{k}, \quad (1.3)$$

它几何上由同一个动量空间路径的积分决定，即贝里连接 (Berry connection)，定义为：

$$\mathbf{A}_n(\mathbf{k}) \equiv i \langle u_{n,\mathbf{k}} | \nabla_{\mathbf{k}} | u_{n,\mathbf{k}} \rangle. \quad (1.4)$$

注意到在 (1.4) 中的定义并没有指定  $|u_{n,\mathbf{k}}\rangle$  的相位，于是这些布洛赫态的相位可以自由选择。在规范变换  $|u_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r})\rangle \rightarrow e^{i\chi(\mathbf{k})} |u_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r})\rangle$  下，贝里连接不是一个规范不变量，它变为  $\mathbf{A}_n(\mathbf{k}) - \nabla_{\mathbf{k}}\chi(\mathbf{k})$ 。然而， $e^{i\chi(\mathbf{k})}$  在路径开始和结束的单值性使得给定闭合路径的贝里相位 (1.3) 模  $2\pi$  是规范不变的。于是，我们可以由规范相关的贝里连接  $\mathbf{A}_n(\mathbf{k})$  构造一个规范不变的贝里曲率 (Berry curvature)，它在三维空间中具有以下形式：

$$\boldsymbol{\Omega}_n(\mathbf{k}) = \nabla_{\mathbf{k}} \times \mathbf{A}_n(\mathbf{k}). \quad (1.5)$$

贝里曲率表明了第  $n$  个能带的几何性质。

尽管贝里曲率是一个规范不变量，它可在整个布里渊带上连续定义，但布洛赫态本身的相位不总为连续的，这取决于带的拓扑不变量，即陈数 (Chern number)，定义为

$$C_n = \frac{1}{2\pi} \int_{\text{BZ}} \boldsymbol{\Omega}_n(\mathbf{k}) \cdot d^2\mathbf{k}. \quad (1.6)$$

在整个第一布里渊区上的积分。如果可以定义布洛赫态的相位，贝里连接  $\mathbf{A}_n(\mathbf{k})$  连续地在整个布里渊区变化，则  $\boldsymbol{\Omega}_n(\mathbf{k}) = \nabla_{\mathbf{k}} \times \mathbf{A}_n(\mathbf{k})$  和 Stokes 定理带来的直接结

果是陈数必然是零。相反，陈数不为零意味着布洛赫态进而贝里连接  $A_n(\mathbf{k})$  不能被连续定义。前者对应拓扑平庸相，而后者为拓扑非平庸相。因而贝里相位能表征能带拓扑性质，被广泛用来研究物质的拓扑相。

除了上述贝里相位，人们也定义了其他拓扑相的相位。其中一个例子是傅里叶拓扑相位 (Floquet topological phase)，它用于探索周期时间调制下的系统的拓扑性质 [9, 10]。另一种常见的相位称为 Zak 相位 [11]。Zak 相位用于反映一维体系的拓扑性质，可以看成是贝里相位的一维版本，它是通过贝里连接沿一个波矢量轴积分而得到的。Zak 相位的拓扑起源于体极化或 Wannier 带的移动，并且只有两个值： $0$  和  $\pi$  分别对应拓扑平庸和拓扑非平庸。

## B. 量子霍尔效应

量子霍尔效应 (即整数量子霍尔效应, integer quantum Hall effect (IQHE)) 是历史上第一个由动量空间拓扑所导致的可观测物理现象 [12]。1980 年, Klitzing 等人发现, 如果给二维电子气体施加一个垂直于平面方向上的强磁场, 霍尔电导率将量子化, 大小等于  $N \frac{e^2}{h}$  [12]。其中,  $e$  和  $h$  分别是元电荷和普朗克常数,  $N$  为整数, 表示有  $N$  个朗道能级被电子占据。不久之后, Thouless、Kohmoto、Nightingale 和 Dennyjs (TKNN) 提出了霍尔电导的鲁棒量子化与动量空间中能带拓扑有关 [13]。他们指出霍尔电导率中整数  $N$  本质上对应电子系统中的拓扑不变量——陈数, 其反映了能带波函数在动量空间内保持不变的性质。具体来说, 在线性响应下若忽略粒子间相互作用, 可以得出二维绝缘体的霍尔电导率  $\sigma_{xy}$  为:

$$\sigma_{xy} = -\frac{e^2}{h} \sum_n C_n. \quad (1.7)$$

这里陈数需对  $n$  个占据带求和。由于陈数只能取整数, 因此霍尔电导量子化的单位为  $\frac{e^2}{h}$ 。对于在强磁场下的均匀二维电子气体, 能级会形成平坦的朗道能级, 并且所有的朗道能级具有相同的陈数。因此, 整数量子霍尔效应的霍尔电导率与被占据的朗道能级数量成正比。这一重要发现开创了拓扑物理学这个全新领域。

此外, 人们发现陈数具备更深刻的物理内涵, 它决定了界面态的模式数量。

实际上，每一个界面态对测量的霍尔电导率都贡献了  $\frac{e^2}{h}$  [14-16]，于是界面态的模式数目受到体态拓扑的限制，其数量等于两个材料体态的陈数之差。这种体态拓扑不变量(陈数)与局域界面态数量之间的匹配关系即为广为人知的体边关系 (bulk-edge correspondence) [17-19]。由于陈数反映的是材料体态拓扑特性，只要陈数不改变，界面态的数量也不会变。于是界面态具有强鲁棒性，对材料表面杂质缺陷等都不敏感进而能够很好地单向传输。

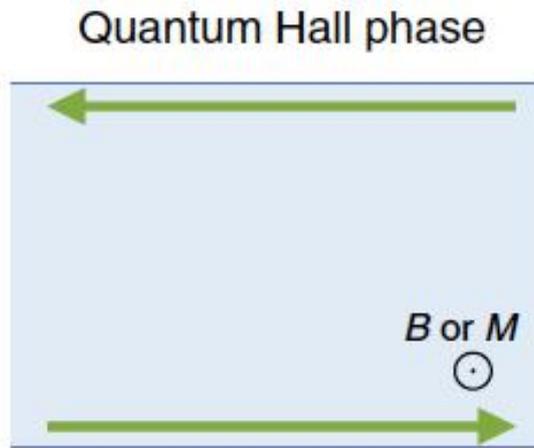


图 1.1 量子霍尔效应中边界态的单向传播[20]。

由于实现量子霍尔效应需要强磁场等极端物理条件，难以推广到应用场景。而在 1988 年, Haldane 首次提出了一个无需外磁场实现整数量子霍尔效应的晶格模型[21]。该模型表明，要得到量子霍尔效应，本质上需要的不是静磁场，而是时间反演对称性的打破。这种不需要外加磁场所得到的整数量子霍尔效应称为量子反常霍尔效应 (quantum anomalous Hall effect (QAHE))，Haldane 模型是第一个提出来实现量子反常霍尔效应的模型，其非平庸拓扑特性不仅仅反映在霍尔电导率量子化上，也可被边界上单向无散射传输的手性边界态验证[21]。之后，2013 年，薛其坤研究组[22]在凝聚态体系中首次实验上验证了量子反常霍尔效应。这类材料由于需要时间反演对称破缺获得非 0 陈数，因而称之为拓扑 Chern 绝缘体 (Chern topological insulator)。对量子霍尔效应的研究使得人们开始利用对称性来调控能带以实现拓扑相，为探索拓扑物理指明了方向，进而为之后量子自旋霍尔效应及拓扑半金属等的发现奠定了基础。

### C. 量子自旋霍尔效应

若要实现整数量子霍尔效应，时间反演对称性必须被打破。因而施加强磁场的困难以及材料限制使得量子霍尔效应难以实现，这促使人们在时间反演对称性存在的系统中寻找拓扑态。在 2005 年，Kane 和 Mele 提出在保持时间反演对称性的石墨烯系统中，存在着与电子自旋相关的量子霍尔现象[23, 24]。具体来说，根据 Kramers 定理[25]，具有半整数自旋的系统的的所有本征态在时间反演对称性下至少是双重简并的。由于自旋轨道耦合作用，自旋向上电子与自旋向下电子所受的力不同，两类电子在简并能级下可能具有不同的拓扑行为。在该石墨烯系统边界，自旋向上的电子可以沿边界逆时针传播，而自旋向下的电子可以沿边界顺时针传播，反之亦然。这类边界态被称为螺旋边界态 (helical edge states)。他们的研究表明，与自旋相关的霍尔电导是量子化的，此时总的霍尔电导零，但每一自旋的霍尔电导都不为零。这种与电子自旋相关的量子霍尔效应被称为量子自旋霍尔效应[23, 24, 26, 27] (quantum spin Hall effect (QSHE))。与此同时，张首晟等[26]也独立预言了量子自旋效应在 HgTe/CdTe 量子阱系统中的存在，他们提出的 BHZ 模型具有一定普适性。并且在一年后，他们与德国的 Laurens 研究组合作，首次在实验上观测到了量子自旋霍尔效应[28]。

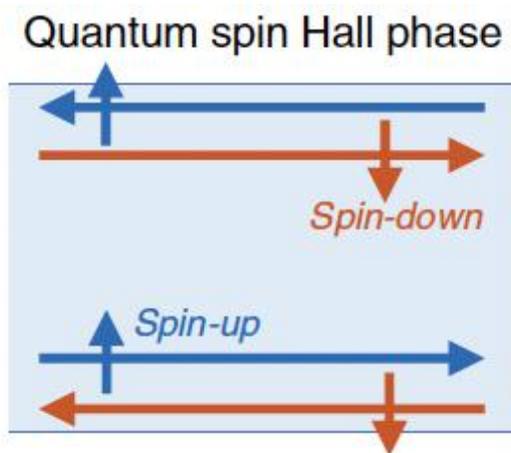


图 1.2 量子自旋霍尔效应中自旋依赖螺旋边界态的单向传播[20]。自旋不同的电子群速度方向相反。

对于量子自旋霍尔效应，不能再采用陈数作为拓扑不变量。因为若时间反演对称性存在，非简并带的陈数等于零，在二维系统中的简并带里也找不到陈数不为零的能带。因此，人们用  $Z_2$  不变量[24, 29] ( $Z_2$  invariant) 作为拓扑不变量来

描述量子自旋霍尔效应，它只有两个取值：0 和 1 分别对应拓扑平庸态和拓扑非平庸态。由于采用  $Z_2$  作为拓扑不变量，这一类型的拓扑绝缘体又称作  $Z_2$  拓扑绝缘体 ( $Z_2$  topological insulator)。不久之后，人们相继发现了三维  $Z_2$  拓扑绝缘体 [30–32] 和拓扑晶体绝缘体 [33] 等。

## D. 拓扑半金属

在电子体系中，人们根据能带占据特点定义了导体和绝缘体。对绝缘体能带的进一步研究表明，占据满的电子能带具有拓扑特性，借助拓扑相进一步把绝缘体分为普通绝缘体和拓扑绝缘体。拓扑绝缘体具有拓扑保护的边界态，具有广泛应用潜能已被深入研究。然而，近年来人们发现，金属也可根据拓扑性质而划分为普通金属和拓扑半金属，对后者的研究成为近年来凝聚态领域的热潮。拓扑半金属的特征是两个或多个能带在第一布里渊区的动量特定值上严格简并，其简并处正好位于费米能上。典型的拓扑半金属包括外尔 (Weyl) 半金属 [34–38]、狄拉克 (Dirac) 半金属 [39–42]、多重外尔 (multi-Weyl) 半金属 [43–49]、nodal line 半金属 [50–57] 和节面 (nodal surface) 半金属 [58, 59] 等等。

为深入理解它们的物理特性，我们先回到 1928 年狄拉克所提出的描述电子态的方程 [60]：

$$H = \sum_i ck_i\alpha_i + mc^2\beta. \quad (1.8)$$

在三维空间， $k_i$  为动量 ( $i = 1, 2, 3$ )， $c$  为真空中光速， $m$  对应电子静止质量。 $\alpha_i = \sigma_x \otimes \sigma_i$ ， $\beta = \sigma_z \otimes \sigma_0$ ，这里  $\sigma_i$  为泡利矩阵而  $\sigma_0$  为  $2 \times 2$  单位矩阵。第二年，外尔指出无质量狄拉克方描述的是一对具有相反的手性的新粒子，即外尔费米子 [61]，其哈密顿量满足方程：

$$H = \sum_i ck_i\sigma_i, \quad (1.9)$$

其手性可用拓扑荷来描述：

$$C = \text{sgn}(\prod k_i). \quad (1.10)$$

由此可见，无质量的狄拉克电子是一对手性相反的外尔费米子的重叠。

尽管狄拉克方程和外尔方程最早用来描述基本粒子，人们发现它们也可以用来描述凝聚态体系中的准粒子，即能级交叉点附近电子的低能激发 [6]。人们将

色散方程满足无质量狄拉克方程或者外尔方程，且简并点只位于费米面上的固体材料分别称为狄拉克半金属及外尔半金属，简并点即狄拉克点和外尔点。若简并点附近色散是直立的“X”锥体，即为 type-I 简并点；若简并点附近的色散锥是倾斜的，则为 type-II 简并点[36, 38]。

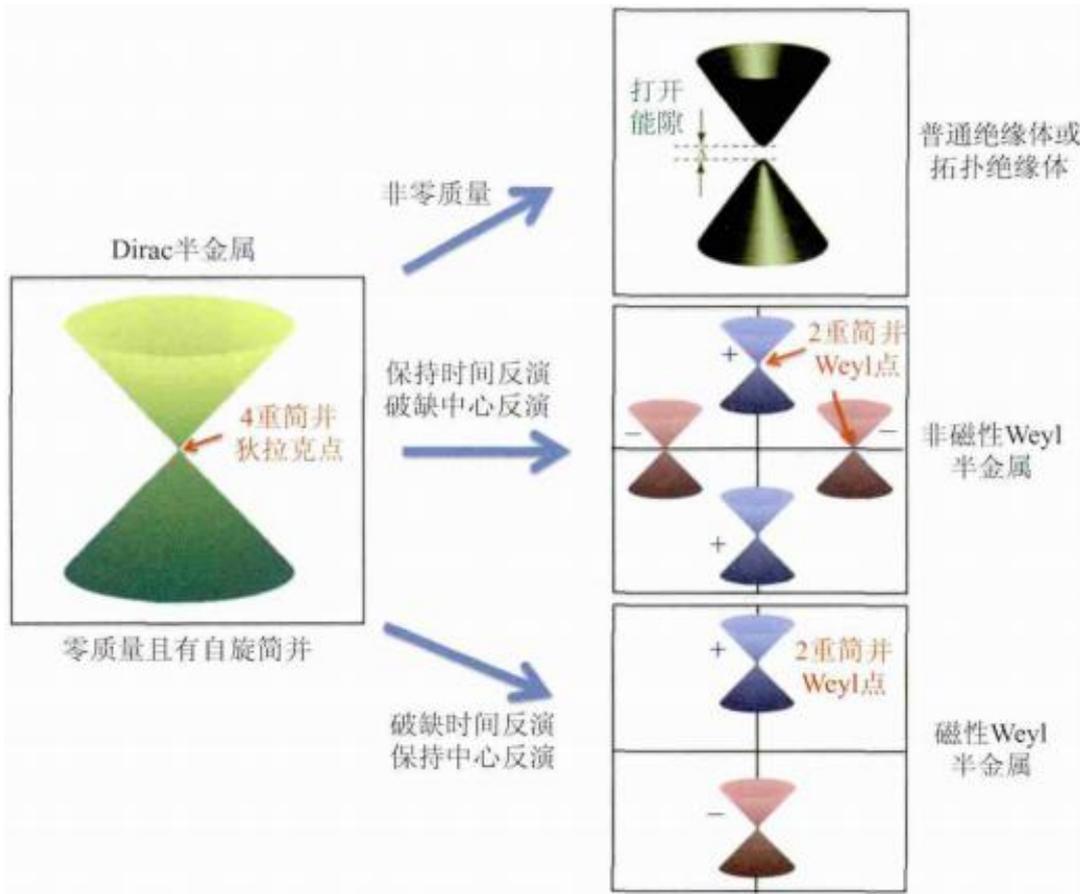


图 1.3 狄拉克半金属与绝缘体、外尔半金属之间的关系[55]。

图 1.3 给出了狄拉克半金属及外尔半金属的色散，可见狄拉克半金属是受时间反演对称性和中心反演对称性保护的。如果引入非零质量，能带打开带隙形成拓扑或普通绝缘体；如果打破中心反演对称性或者时间反演对称性，那原本手性相反的两个外尔色散的简并将消失。

我国科学家在这一领域做出了卓越贡献。理论上，2011 年万贤刚等人率先预测在缺少空间反演对称性的烧绿石（Pyrochlore iridates）结构中存在外尔点，且两个手性相反的外尔点由费米弧（Fermi arc）相连[34]。2012 和 2013 年，方忠和戴希等人预言了  $\text{Na}_3\text{Bi}$  [41] 和  $\text{Cd}_2\text{As}_3$  [42] 是受晶格对称性保护的狄拉克半金属，它们的费米面是由手性相反的一对外尔点重叠而成的。实验上，中科院

翁洪明等人证实了 TaAs 家族材料是天然存在的一类外尔半金属，并观测到了表面费米弧、负磁阻现象等等[35]。此外，人们发现在某些材料里存在高阶外尔点（high-order Weyl point），与传统外尔点拓扑荷大小为 1 不同，高阶外尔点的拓扑荷大于 1[62]。

随着研究的深入，人们发现某些拓扑半金属能带交叉处不是动量空间的离散点，而是闭合的曲线，这便是 nodal line 半金属[50–55]。到目前为止，nodal line 半金属包括 nodal ring、nodal chain、nodal link 和 nodal knot 几类半金属。如图 1.4a 所示，外尔 nodal ring 是一个闭环，而一个 nodal chain 是由几个 nodal rings 相互接触组成的。几个 nodal rings 连接在一起形成一个 nodal link，而一个与自身相连的 nodal ring 是一个 nodal knot[20]。

除此之外，人们也在  $Ti_3Al$  等体系中找到了能带交叉简并是一个二维平面的拓扑半金属，即 nodal surface 半金属[58, 59]，其能带示意图为图 1.4b。nodal surface 的存在往往受到非点式对称性和时间反演对称性保护。

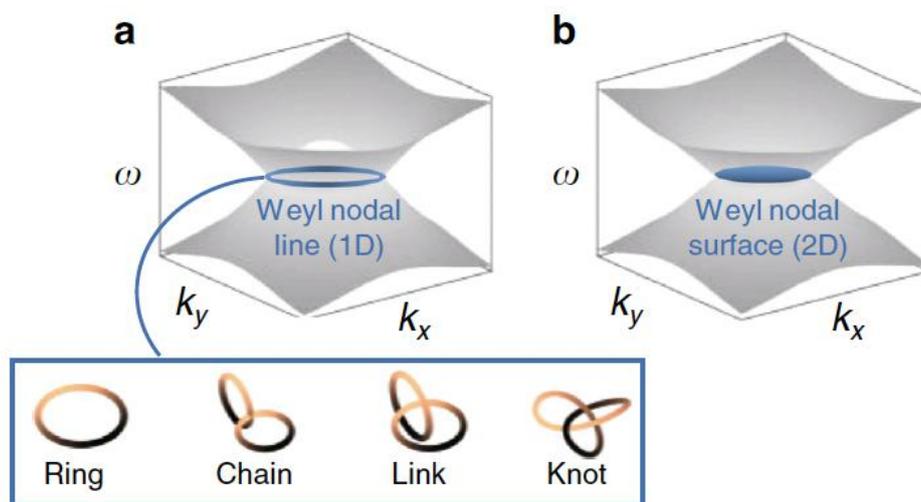


图 1.4 nodal line 与 nodal surface 半金属色散[20]。(a) 四种不同类型 nodal line 半金属色散。(b) nodal surface 半金属色散。

## 1.2 光学系统的拓扑研究

### 1.2.1 一维光学系统中的拓扑相和界面态

一维体系往往构造简单，其参数灵活可调并且现象易于观测，因而广为用于

研究拓扑物理。在光学体系，一维体系也是研究光子拓扑效应的良好平台。本节主要介绍一维体系中常用拓扑模型以及它们在光学系统中的应用。

在一维体系中，最典型和简单的一维拓扑模型是 Su-Schrieffer-Heeger (SSH) 模型 [63]，最早是为了研究聚乙炔这种具有手性对称性、一维二聚晶格的绝缘体而引入的。它的哈密顿可写为：

$$H = \sum_i \left( (t + \delta t) a_i^\dagger b_i + (t - \delta t) a_{i+1}^\dagger b_i + h.c. \right), \quad (1.11)$$

这里， $a_i^\dagger$  ( $b_i^\dagger$ ) 和  $a_i$  ( $b_i$ ) 分别是子晶格点  $A_i$  ( $B_i$ ) 上电子的产生和湮灭算符。在这个模型里，每个单元包含两个子格点 (A 和 B)，并且两个不同的子晶格点之间的耦合强度分别为  $t + \delta t$  (单元内) 和  $t - \delta t$  (单元间)，如图 1.5 所示。

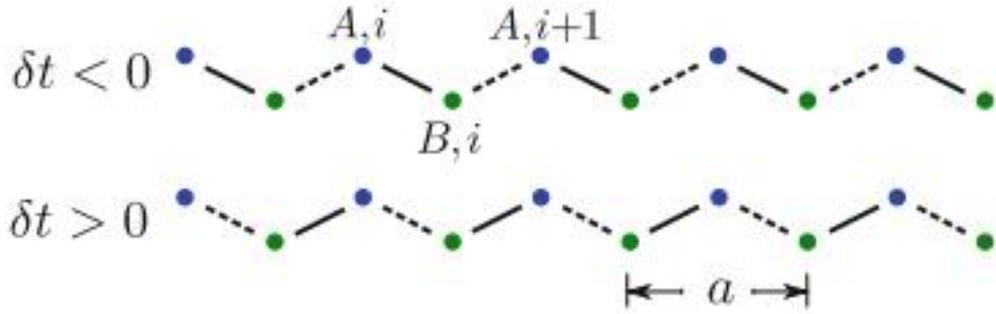


图 1.5 SSH 模型，其中实线和虚线分别表示弱键和强键 [64]。

傅里叶变换到动量空间后，得到双能带色散：

$$\omega(k) = \pm \sqrt{2t^2 + 2(\delta t)^2 + 2(t + \delta t)(t - \delta t) \cos(ka)}, \quad (1.12)$$

其中  $k$  是布洛赫波矢， $a$  是晶格单元长度。可见，只有  $\delta t = 0$  时，带隙等于零，否则带隙为  $4|\delta t|$ 。当  $\delta t > 0$  时，贝里相位（即 Zak 相位）为  $\gamma = 0$ ，对应拓扑平庸相；而当  $\delta t < 0$  时，贝里相位为  $\gamma = \pi$ ，对应拓扑平庸相。我们也可以采用另一种对拓扑相的指标即环绕数 (winding number) 来表征拓扑相 [64]，这里环绕数  $W$  满足：

$$(-1)^W = \text{sgn}(1 + t/\delta t). \quad (1.13)$$

即当  $\delta t > 0$ ，有  $W = 0$ ；而当  $\delta t < 0$ ，有  $W = 1$ 。所以， $\delta t = 0$  对应拓扑相变点， $\delta t$  的符号变化意味着拓扑相变。图 1.6 给出了三种情况下的能带色散。

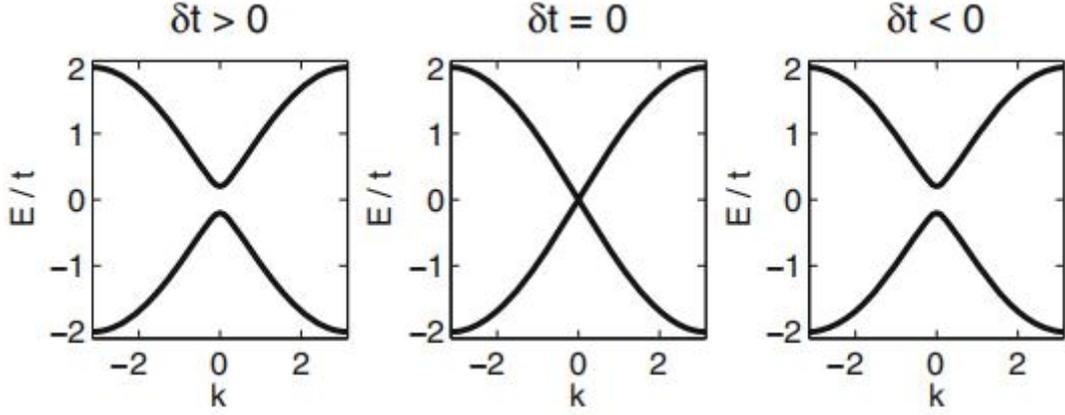


图 1.6  $\delta t > 0$ 、 $\delta t = 0$  和  $\delta t < 0$  下的能带色散[64]。能隙在  $\delta t = 0$  附近开合，意味着拓扑相变的发生。

开放边界（open boundary）条件下拓扑界面态的存在是贝里相位  $\gamma = \pi$  或  $w = 1$  时拓扑非平庸相的特征。这里，开放边界条件是晶格链在两个单元之间被截断，而不是截于一个单元内的两个子格点之间。也就是说，如果末端键是弱键， $|t + \delta t| < |t - \delta t|$ ，它就是拓扑非平庸的，反之则为拓扑平庸。前者在开边界条件下具有拓扑保护的、“零能量”的界面态，后者则没有。

另一方面，通过对角化哈密顿量，我们还可以用数值方法计算能量本征态和本征值，得到拓扑界面态的模式分布。哈密顿量可以写成方阵的形式：

$$H = \begin{pmatrix} 0 & t + \delta t & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ t + \delta t & 0 & t - \delta t & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & t - \delta t & 0 & t + \delta t & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & t + \delta t & 0 & t - \delta t & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & t - \delta t & 0 & \ddots & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \ddots & 0 & t + \delta t \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & t + \delta t & 0 \end{pmatrix}. \quad (1.14)$$

可以得到，在改变  $\delta t$  符号的过程中，伴随着终端“零能量”边界模式的出现和消失。图 1.7 给出了不同  $\delta t$  下拓扑界面态的模式分布。

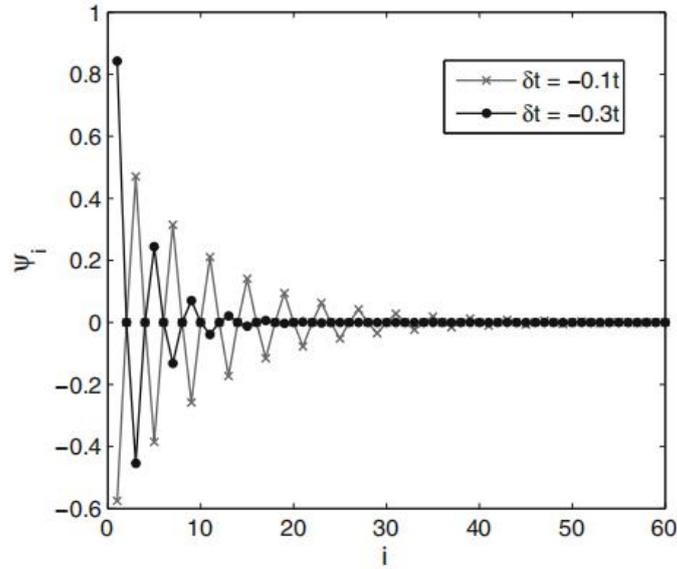


图 1.7  $\delta t = -0.1t$  和  $\delta t = -0.3t$  下“零能量”界面态振幅在不同格点上的分布 [64]。

在光学体系中，2009 年南开大学陈志刚等利用光学超晶格，首次用实验实现 SSH 模型及其相关拓扑界面态 [65]。他们在光折变铌酸锶钡非线性晶体中光诱导得到了半无限光子超晶格，结构如图 1.8 所示。利用两个原本偏振部分相干光束产生两个一维周期性强度分布 (图 1.8a 里两条虚线)，这两个强度分布正好叠加得到准双周期强度分布图 (图 1.8a 里实曲线)，其在整个晶体中保持恒定。在弱偏场下，光强分布图会使折射率周期性改变，从而得到了强弱耦合交替的波导。强耦合波导由高折射率层隔开，称为强键 (strong bond)，而弱耦合波导由低折射率层称为弱键 (weak bond) 隔开，如图 1.8b 所示。

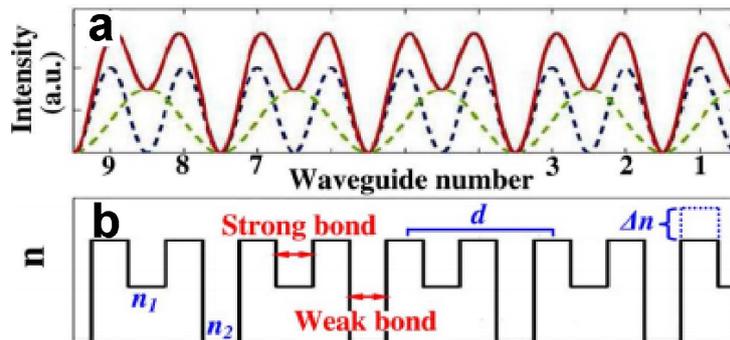


图 1.8 光学超晶格 SSH 链 [65]。(a) 通过叠加两个周期图案 (黑色和灰色虚线) 来构造超晶格结构 (实曲线) 的强度剖面。(b) 理论模型中采用的简化结构，截断处位于右端。

当  $\Delta n \equiv n_1 - n_2 > 0$ ，超晶格在强耦合处截断，此时会出现拓扑保护的界面态。

图 1.9 绘制出了不同  $\Delta n$  下拓扑界面态模式分布，和实验上对应波导输出模式的

强度观测相符。

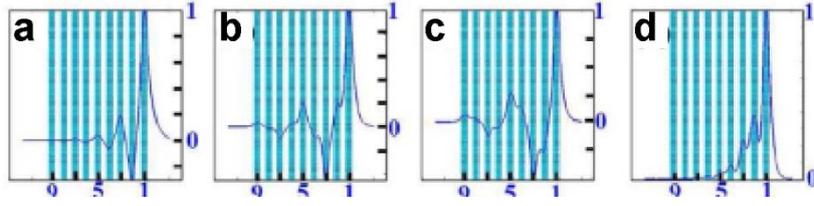


图 1.9 (a-d) 不同  $\Delta n$  情况下界面态振幅分布[65]。

此后，SSH 模型在各类光学体系中被实现和进一步探索，包括光子晶体[66, 67]、电磁超材料[68, 69]、等离子体和介质纳米颗粒[70-74]、等离子体波导阵列[75, 76]、极化子微柱[77]和耦合光波导[78]等。虽然是最简单的拓扑模型，但 SSH 模型依然是研究前沿拓扑光学的有力工具。例如，St-Jean 等人[79]、Parto 等人[80]和 Zhao 等人[81]通过实验观察到了 SSH 模型界面态的激光，这些是拓扑激光器的首次实现，即利用拓扑界面态的激光器；在光子晶体[82, 83]、微波腔阵列[84]和耦合波导阵列[85]讨论了 SSH 模型和光子辐射损失之间的相互作用，进而发展了光学非厄米拓扑的研究。此外，SSH 模型近期也被用于研究时间离散化量子行走[86, 87]等，这里不再赘述。

除了上述 SSH 模型以外，另一个常用于研究一维光学系统拓扑的模型为 Rice-Mele 模型(RM 模型)，它最早于 20 世纪 80 年代被引入多烯中的孤子系统，后来被用于铁电性的研究[88]。RM 模型是一个一维紧束缚模型，其特征是最近邻耦合系数  $J_i = J(1 + (-1)^i \delta)$  ( $i = 1, 2$ ,  $\delta \in [-1, 1]$ )，与格点在位能都是交替分布的，如图 1.10 所示。它的哈密顿量可写作：

$$H = \sum_i \left( -J(1 + (-1)^i \delta) a_i^\dagger a_{i+1} + (-1)^i \frac{\Delta}{2} a_i^\dagger a_i + h.c. \right). \quad (1.15)$$

这里， $a_i^\dagger$  和  $a_i$  分别是第  $i$  个晶格点上的产生和湮灭算符， $\Delta$  表示交错在位势。

计算可得到其双能带色散为：

$$\omega(k) = \pm \sqrt{(\Delta/2J)^2 + 4(1 - (1 - \delta^2)\cos(ka))}, \quad (1.16)$$

其简并点位于  $\delta = \Delta = 0$  处。可以看出，当  $\delta \neq 0$  而  $\Delta = 0$  时，RM 模型变为 SSH 模型。由于一维光学体系往往易于调控，RM 模型成为研究光学拓扑效应的实用工具[89]。

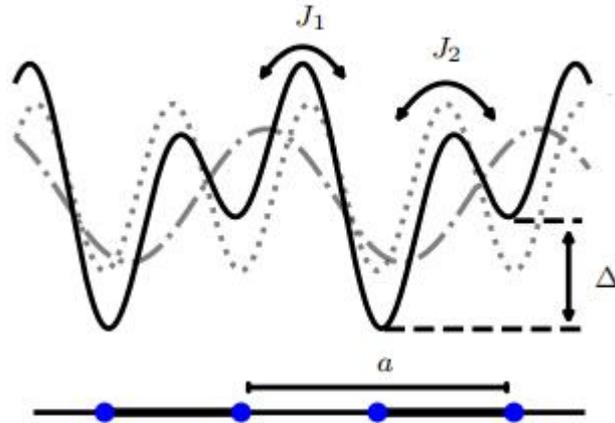


图 1.10 Rice-Mele 模型示意图[90]。图中黑色实线是由两个驻波（虚线）产生的光学势叠加而成。

### 1.2.2 二维光学系统中的拓扑效应

拓扑光子学的发展源于利用二维光学系统模拟整数量子霍尔效应以及量子自旋霍尔效应等。本节简要回顾实现这两种效应的几个典型二维光学体系，及其核心方法论。

随着拓扑物理的发展，人们认识到光学系统的能带能量并不能代表能带的全部性质，光子能带同样具备拓扑性质[91-95]。所以，二维光子体系中应该存在类似二维电子体系中的量子霍尔效应及单向传播的边界模式。在2008年，Haldane和Raghu提出，当一个静磁场作用在旋电光子晶体（gyroelectric photonic crystal）上时，系统时间反演对称性被破坏[96, 97]。因此，晶格中的一对狄拉克锥打开带隙，使得光学系统的拓扑性质发生改变。此时能带陈数不为0，带隙中存在不受散射干扰的单向传输手性边界态。但是，自然存在的旋电材料的旋电相应往往较弱，实验上难以观测相应边界态。在Haldane和Raghu的预测提出不久之后，MIT的Wang等人提出利用旋磁材料代替旋电材料，他们在模拟上把钇铁石榴石（yttrium-iron-garnet）柱子周期地排列成二维正方晶格旋磁光子晶体（gyromagnetic photonic crystal），发现它能产生拓扑非平庸（陈数为1）的能带，以及无反射缺陷的单向传播电磁波[98]。随后Wang等人在实验上，利用掺杂的钙铁石榴石（vanadium-doped calcium-iron garnet）柱子组成正方晶格旋磁光子晶

体，观测到了微波的单向无散射传输从而验证了理论方案[99]，如图 1.11 所示。

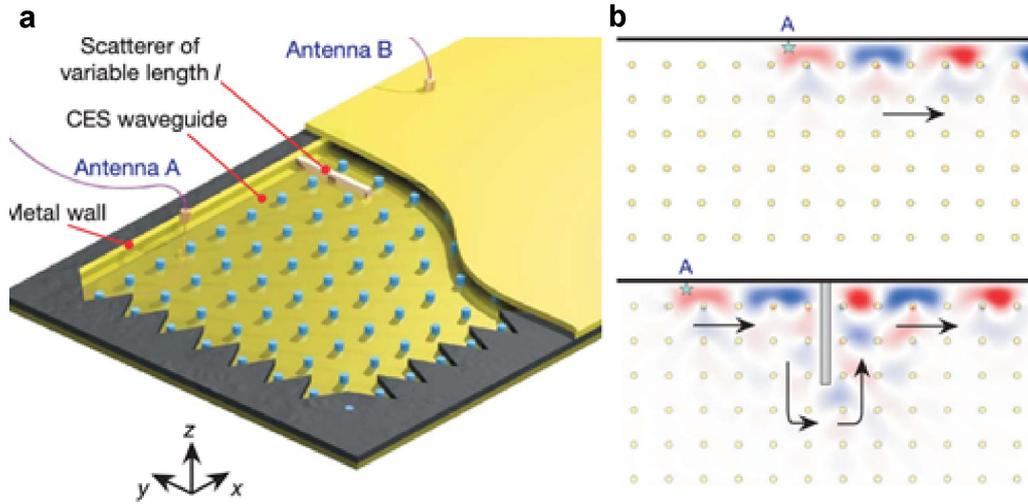


图 1.11 旋磁光子晶体中的光学量子霍尔效应[99]。(a) 旋磁光子晶体板(蓝色棒)和金属壁(黄色)之间的界面组成的波导示意图。(b) 单向无散射传输的拓扑边界态电场分布图。

除使用磁光材料实现光学量子霍尔效应外，斯坦福的 Fan 研究组和以色列理工学院的 Rechtsman 研究组分别通过动态调制光学谐振腔阵列耦合系数[100]（图 1.12a）以及构造弯曲波导阵列[101]（图 1.12b），获得了作用于系统的有效磁场。因而，体系由于时间反演对称性破缺能发生拓扑相变，也能够出现单向传输的边界态。

自从在多个光学系统里通过打破时间反演对称性实现光学量子霍尔效应以后，人们开始探索在光学体系中实现类似电子系统的量子自旋霍尔效应。然而，由于光子不具备自旋，Kramers 简并定理不适用于光子，光的量子自旋霍尔效应似乎难以实现。因此，为实现光学量子自旋霍尔效应，关键在于为光子构造自旋自由度（即赝自旋）。

由于圆偏光具备自旋属性，一开始人们考虑利用光子的左旋和右旋作为赝自旋自由度。2011 年，Hafezi 等人提出了一个二维环形谐振腔模型，通过调节腔之间的耦合来实现光学量子霍尔效应[102]。具体来说，当环形谐振腔中存在一对简并的回音壁模（whispering gallery modes），且分别沿顺时针和逆时针方向回旋便能自然地构造出光子的赝自旋自由度。这两种谐振器模式可以通过之间的连接器耦合，因而不同赝自旋模式之间出现相位差，如图 1.13a 所示。由于系统不具备磁性，相位差的出现可看作是人为构造的有效磁场所致。因此，两个赝自旋

态经历了相反的有效磁场作用，系统中存在两种赝自旋态的拓扑保护边界态，这直接对应量子自旋霍尔效应。随后在 2013 年，他们制备二维环形硅谐振腔了用实验加以验证[103]，如图 1.13b 所示。

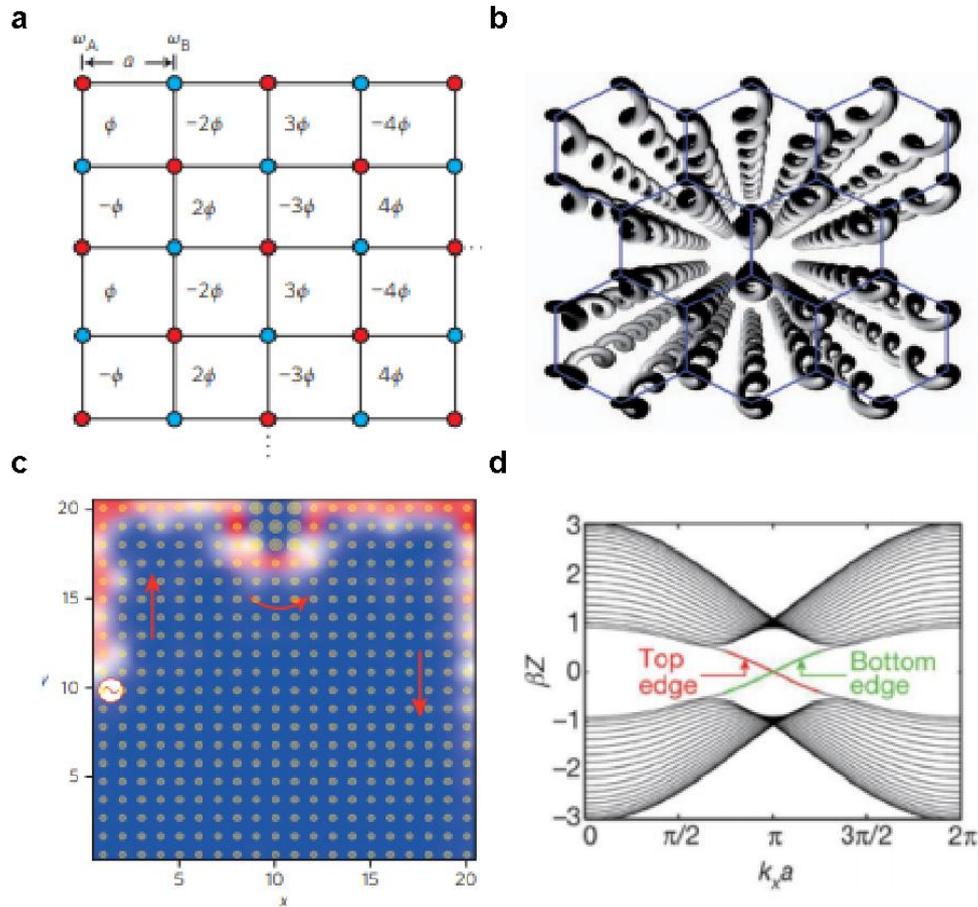


图 1.12 (a, b) 动态调制光学谐振腔阵列模型及其鲁棒拓扑边界态[100]。(c, d) 弯曲波导阵列模型及其鲁棒拓扑边界态[101]。

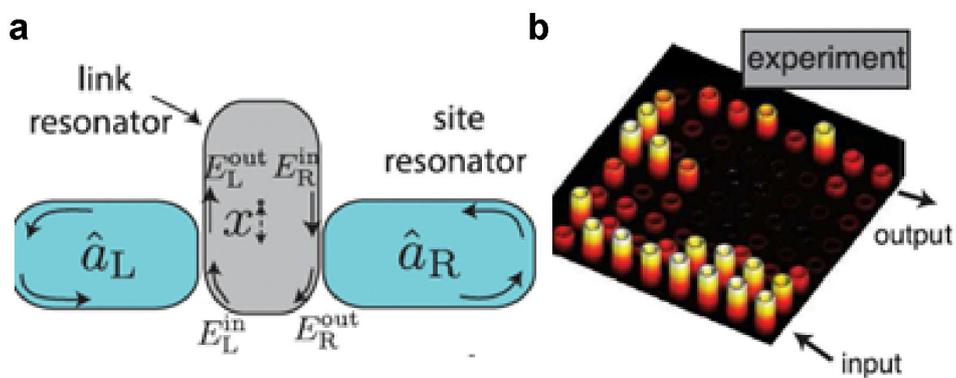


图 1.13 二维环形谐振腔中的光学量子自旋霍尔效应。(a) 两个相邻环形谐振器之间的耦合

机制示意图[102]。(b) 拓扑边界态光强分布[103]。

此外，由于光子具有极化属性，可以利用光子极化和电磁对偶性 (electromagnetic duality)，来得到赝自旋自由度。2013 年，来自德州大学的 Khanikaev 等人[104]利用 TE 和 TM 偏振模式的线性组合构造出光子赝自旋态 (图 1.14a)，并得到了自旋锁定的拓扑保护边界态 (图 1.14b)。这项研究里的具有时间反演对称的光子虽然是玻色子，却满足费米子 Kramers 简并条件。后来研究人员发现[105]，为实现光学量子自旋霍尔效应，时间反演对称并不是必须的，关键要构造出费米子时间反演算符  $T^2 = -1$ 。因此，人们利用光学系统晶格对称性以构造满足 Kramers 简并的算符，成功得到了光子赝自旋自由度 [106–108]。

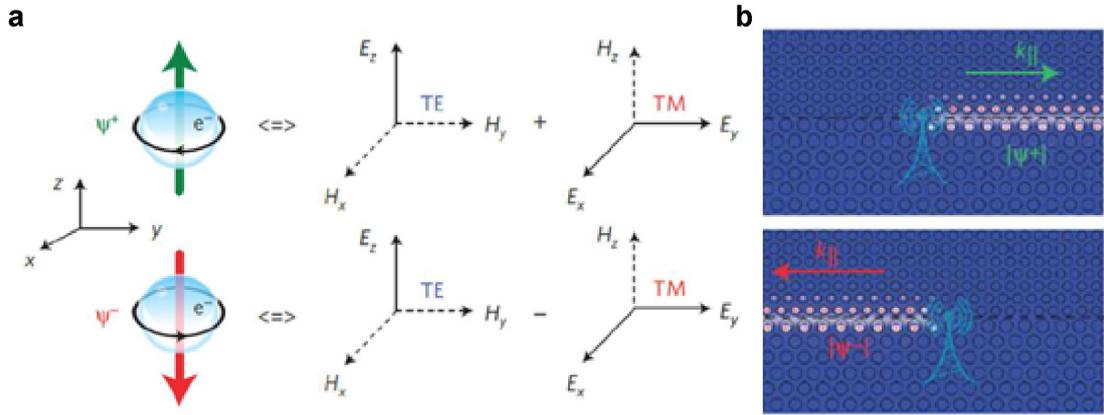


图 1.14 利用光子极化实现的光学量子自旋霍尔效应[104]。(a) TE、TM 模式构造的光学 Kramers 简并对。(b) 自旋锁定的拓扑边界态。

### 1.2.3 三维光学系统中的拓扑半金属

随着拓扑半金属领域理论和实验的研究发展，人们开始在光学系统构造光学拓扑半金属。到如今光学拓扑半金属已成为重要的拓扑系统而被广为研究，主要包括光学外尔 (Weyl) 半金属[109–123]、光学狄拉克 (Dirac) 半金属[124–127]、光学多重外尔 (multi-Weyl) 半金属[118, 128]和光学 nodal line 半金属[129–131]等等。本节主要介绍它们在光学系统中的实现及性质。

## A. 光学外尔半金属

在光学体系中，理论上，最早是 2013 年由 MIT 的陆凌等人在破缺时间或中心反演对称性的双螺旋二十四面体构成的光子晶体中实现了外尔半金属色散 [109]，其元胞包含两组相互嵌套的螺旋二十四面体（图 1.15a 蓝色和红色区域）当中心或时间反演对称性被打破时，便能得到外尔色散（图 1.15b）。之后人们在光学超晶格 [110, 111]、磁化等离子激元 [112]、手性超材料 [113–115] 和磁四面体晶体 [116] 等中预言了外尔点的存在。实验上，也是由陆凌研究组 2015 年率先在微波频段，利用角分辨透射能谱测出了该光子晶体能带中的外尔色散 [117]（图 1.15c）。在此之后，2016 年港科大的 Chan 等人在金属光子晶体中构造了高阶外尔点并测量到螺旋表面态 [118]；Rechtsman 研究组和 Yang 研究组分别利用耦合波导阵列 [120] 和光学超材料 [119] 实现了 type-II 外尔点其表面态；2018 年，伯明翰大学的 Zhang 研究组在金属正方晶格结构中构造了四个等频率的理想外尔点，并测出了表面态 [121]。

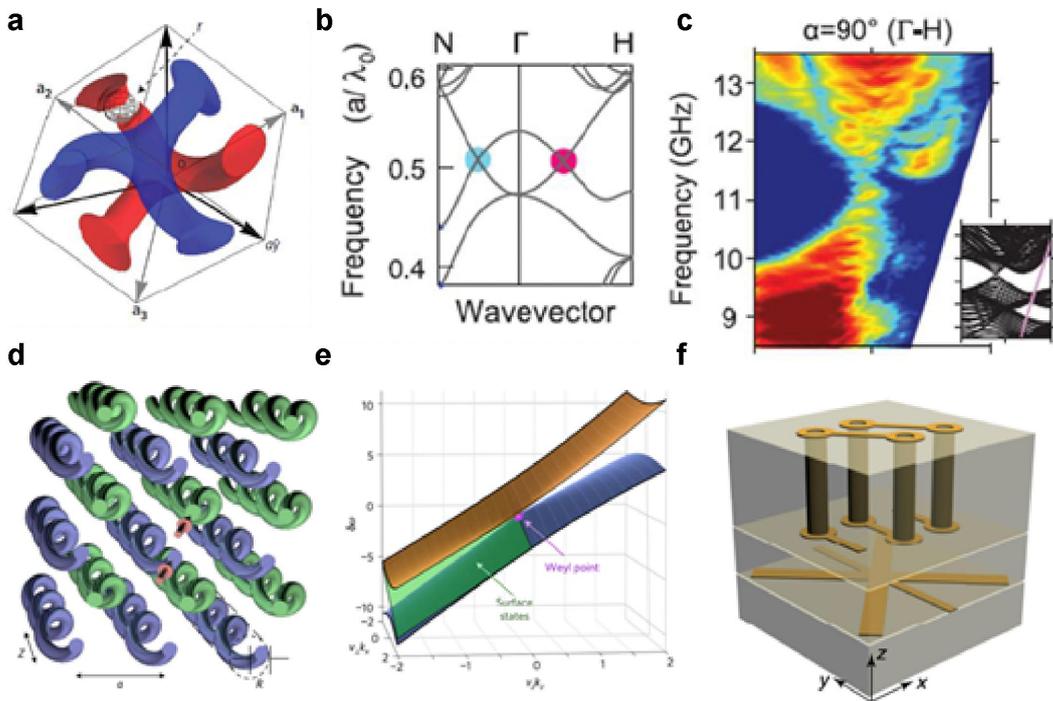


图 1.15 (a–c) 双螺旋二十四面体光子晶体实现外尔半金属。(a) 双螺旋二十四面体元胞 [109]。(b) 外尔点及其附近色散，其中天蓝和玫红色对应外尔点陈数相反 [117]。(c) 测量透射谱，右下为投影能带 [117]。(d, e) 耦合波导阵列中的光学 type-II 外尔半金属 [120]。(d) 耦合波导阵列结构图。(e) type-II 外尔半金属能带色散，表面态位于绿色面上。(f) 产

生理想等频外尔点的结构元胞[121]。

由于外尔半金属色散存在于三维动量空间，所以相应光学系统往往结构复杂，制作工艺繁复，尤其在可见光波段。如果引入合成维度[132]来代替动量空间的一个或者两个分量，可以大大简化实验结构。这里的合成维度可以指频率、相位和几何大小等等。2016年，斯坦福的 Fan 课题组用环形谐振腔构造了二维蜂巢型晶格，利用腔模式耦合引入了频率这一合成维度。此时频率维度与二维布洛赫动量维度和在一起构成了三维合成空间，如图 1.16a 所示。他们成功在不同坐标处实现外尔点，图 1.16b 绘制出了简并点附近色散[122]。2017年，南京大学的 Wang 等人利用一维层状光子晶体实现了外尔点[123]。图 1.16c 给出了光子晶体结构单元，它包含四层介质层， $p$  和  $q$  是跟介质层厚度相关的参数。因此  $p$ 、 $q$  以及原本的布洛赫波矢构成三维合成空间，他们通过测量外尔点附近反射相位的涡旋进行了实验验证。合成维度的使用能够使实验调控更灵活，并且还能用于探索高维物理，在拓扑光学领域中具有重要地位[133, 134]。

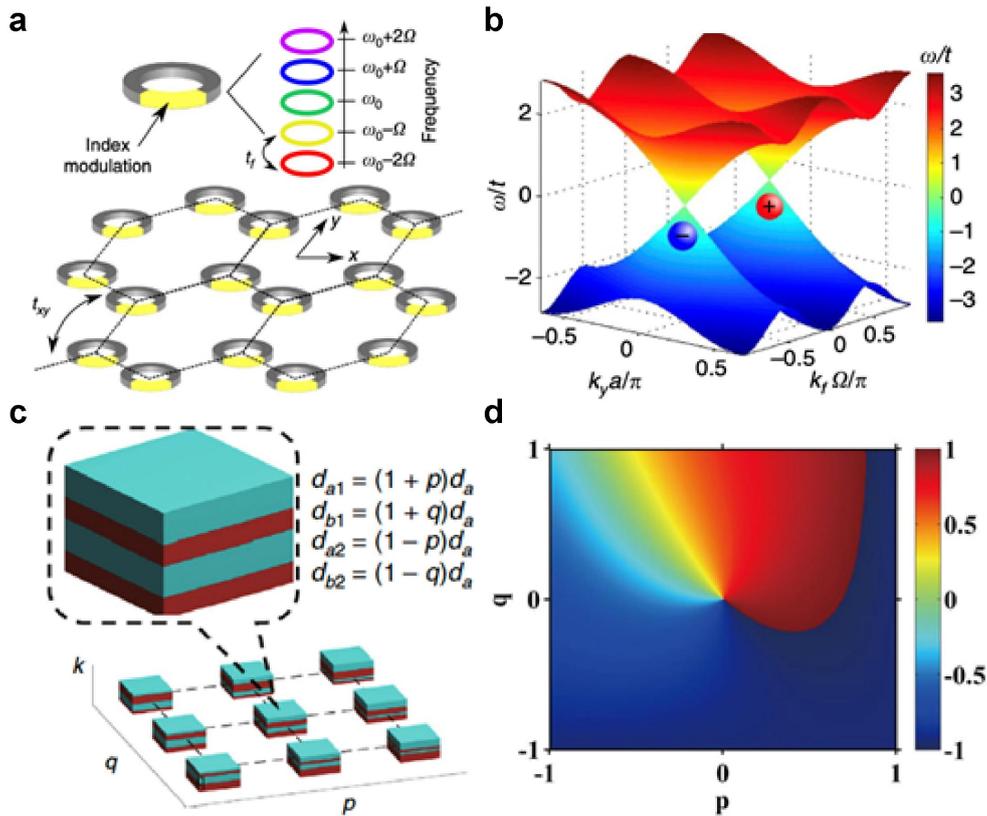


图 1.16 合成空间里的光学外尔半金属。(a, b) 二维环形谐振腔实现外尔点[122]。(a) 二维环形谐振腔阵列结构，频率维度由耦合产生。(b) 外尔点色散。(c, d) 一维光子晶体实现外尔点[123]。(c) 光子晶体元胞结构。(d) 外尔点附近反射相位涡旋。

## B. 光学狄拉克半金属

基于 1.1 节 D 中的讨论，可看出狄拉克半金属是拓扑绝缘体、外尔半金属等的“母态”。和电子不同，光子的自旋简并度需要特殊设计，因而得到稳定的光学狄拉克半金属并不容易，其报道也较少。2016 年，苏州大学的蒋建华课题组利用点群对称性设计了稳定的光学狄拉克点[124]，他们借助介质柱构造了三维六角晶格光子晶体，其中存在的狄拉克点是受到  $C_6$  点群对称性保护的。紧接着在 2017 年，他们又将非点式对称性引入到三维光子晶体中，从而实现了稳定的光学 type-II 狄拉克半金属并得到了拓扑保护的表面局域态[125]。伯明翰大学的 Zhang 课题组在 2017 年从理论上证明了利用电磁对偶性和电磁波内禀自由度也可以在有效介质中实现狄拉克点，并模拟得到了空气和狄拉克超材料界面上的一对自旋极化的类费米弧表面态[126]。在 2019 年，他们通过微波实验验证了超材料中的三维光学狄拉克点[127]，它们在动量空间是两两对称存在的，其稳定性是电磁对偶性所保证的；同时，它们也通过测量验证了自旋极化表面弧（对应于电子系统的“费米弧”），如图 1.17 所示。

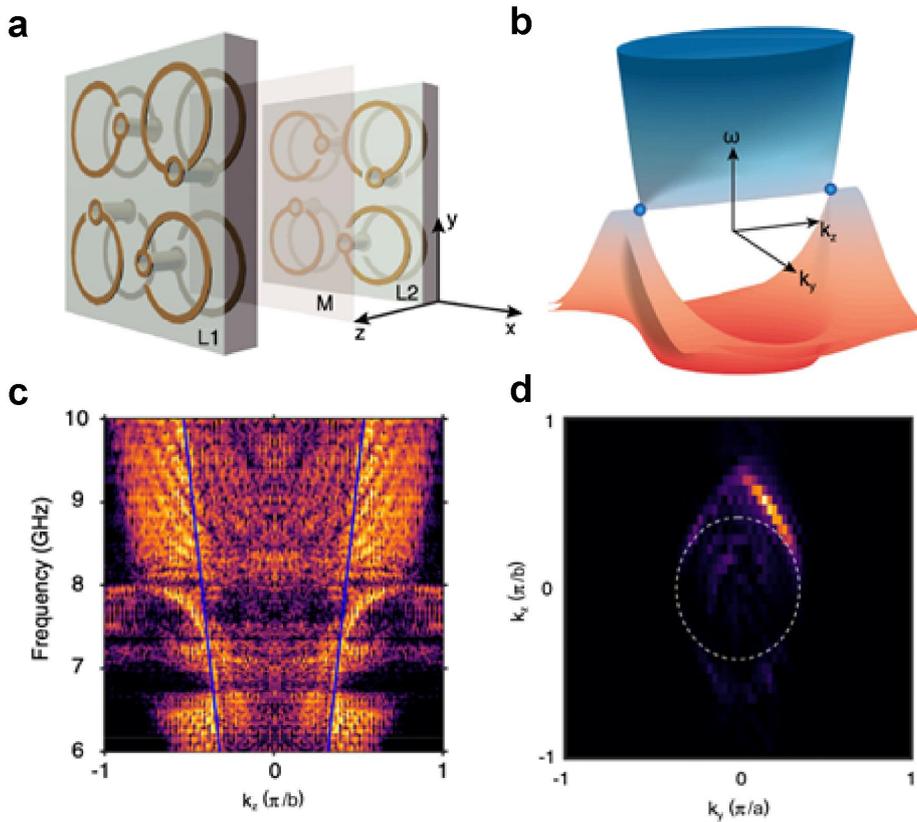


图 1.17 光学狄拉克半金属[127]。(a) 超材料结构示意图，每个元胞由八个螺旋形单元组成。(b) 全波模拟下的两个四重简并狄拉克点。(c) 实验测量的光学狄拉克半金属投影能带。(d) 实验测量的光学狄拉克半金属投影能带。

(d) 右圆偏振光激发的表面波。

### C. 光学多重外尔半金属

传统外尔半金属的双能带在外尔点线性相交（即 spin-1/2 Weyl point），对应拓扑荷即陈数大小为 1，如图 1.18a 所示。随着对拓扑光子学的深入研究，人们在不同光子体系实现了陈数大于 1 的多重外尔点 (multi-Weyl point) [118, 128]。从本质上说，非零陈数的外尔点除了晶格平移对称性外，不需要额外对称性保护；随着对称性的增加，在动量空间高对称处便可实现稳定的多重外尔点。例如，陈数为 2 的双外尔点 (double-Weyl point) 可由两条带形成二阶外尔点 (quadratic Weyl point) [118]、由三条带形成自旋为 1 的外尔点 (spin-1 Weyl point) [135] 或四条带形成 charge-2 狄拉克点 (charge-2 Dirac point) [135]，如图 1.18b-d 所示。在最后一种情况中，charge-2 意味着拓扑荷即陈数大小为 2，因而四重简并对应相同陈数的外尔点的重叠。与传统的四重简并狄拉克点不同，charge-2 狄拉克点具有非零净拓扑荷，可以导致全新的拓扑边界态。如果能利用光学系统实现光频 charge-2 狄拉克半金属，必然能发展新的应用。但在可见光频域实现三维拓扑简并点并不容易，往往需要复杂的结构设计。而本论文第二章，便介绍了我们利用一维光学超晶格结构首次构造了可见光频域的 charge-2 狄拉克半金属这一工作，以及对其所引起的拓扑边界态的灵活调控。

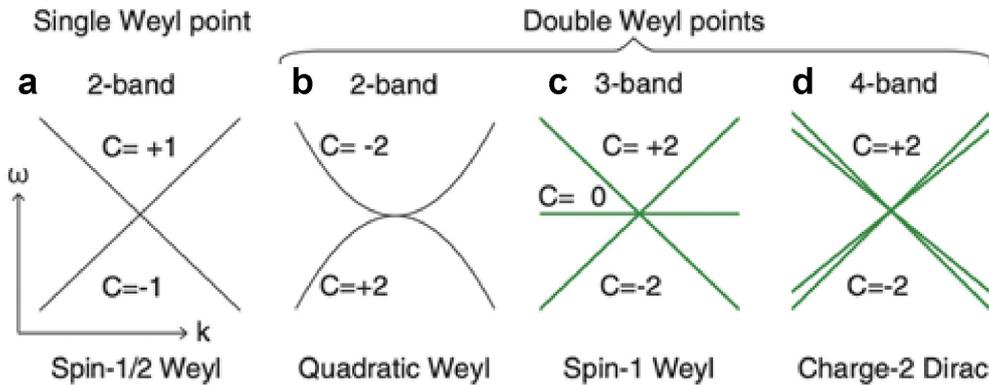


图 1.18 陈数大小为 1 和 2 的外尔点[135]。(a) 传统陈数大小为 1 的外尔点。(b) 三种不同类型的双外尔点。

### D. 光学 nodal line 半金属

nodal line 半金属的能带在三维动量空间的简并不是零维的，而是一条闭合

曲线，我们在 1.1 节简要介绍了其分类。在光学系统中，对 nodal line 半金属的研究进展主要是近几年取得的。例如，nodal chain 是由多个 nodal rings 相接触构成，2018 年被中科院陆凌研究组在简单立方金属光子晶体中用实验观测到 [129]，如图 1.19a 和 1.19b 所示。由于 nodal line 半金属依赖于偶然简并，易被扰动破坏，这些扰动甚至保持了结构变化等对称性。而从四个能带的沙漏型色散中产生的 nodal line (hourglass nodal line) 对保持对称性的扰动具有鲁棒性 [56, 57]，它在具有滑移镜对称性和  $C_4$  对称性的光子晶体中被实验观测到 [130]，图 1.19c 和 1.19d 展示了光子晶体元胞结构以及沙漏型 nodal line 半金属色散。2020 年，伯明翰大学的 Shuang Zhang 等人在实验上证明了双轴双曲超材料中的非阿贝尔 nodal link，并在超材料于空气的界面上观测到了连续体中的表面束缚态 [131]。然而，在光学系统中实现四重简并的狄拉克 nodal line 半金属是不容易的，本文第四章将介绍我们关于实现严格的光频狄拉克 nodal ring 半金属的工作，以及宽频简并的表面态的实验观测。

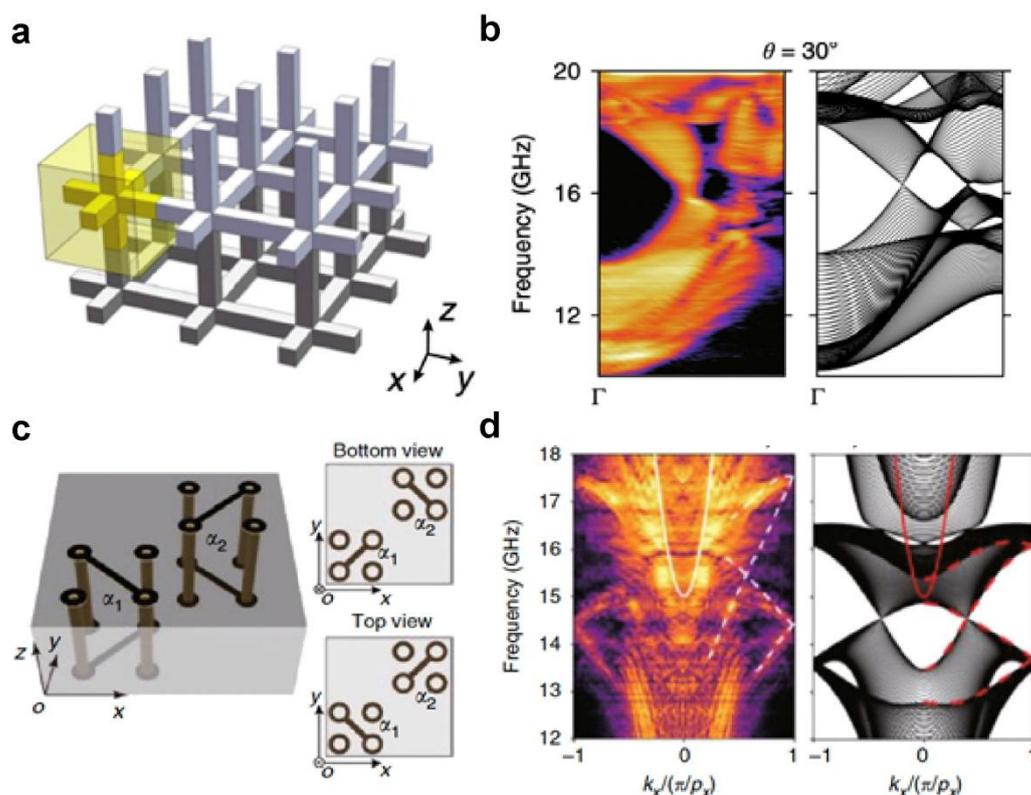


图 1.19 光学 nodal line 半金属。(a, b) 光学 nodal chain 半金属 [129]。(a) 金属光子晶体结构示意图。(b) nodal chain 色散的实验与理论结果。(c, d) 光学沙漏型 nodal line 半金属 [130]。(c) 元胞的结构示意图。(d) 沙漏型 nodal line 色散的实验与理论结果。

### 1.3 本论文研究思路和论文结构

本论文利用光子晶体结构，研究了光学系统中的拓扑半金属，以及拓扑保护的界面态调控。全文共分为五章，每章的主要内容为：

第一章为绪论部分，简述了拓扑电子学的发展历程以及光学系统的拓扑效应，并回顾了一些重要的拓扑物理理论和拓扑模型。其中，我们着重介绍了本论文研究的光学拓扑半金属以及拓扑界面态。

第二章到第四章详细阐述了本论文的研究内容。

第二章中，我们首先介绍了一维光子晶体超晶格的构造，接着引入两个合成维度并利用光子赝自旋，在实验上实现了可见光波段的 charge-2 狄拉克半金属及其衍生的具有相同拓扑荷的外尔半金属。此外，charge-2 狄拉克简并点拓扑荷不为零的特性保证了有限超晶格系统中拓扑边界态的存在。这些拓扑边界态依赖于激发光的偏振模式、入射角大小以及入射方向，进而高度灵活可调。

第三章中，我们首先借鉴第二章中构造超晶格的方法，设计了两个拓扑相不同的光学超晶格，再将其拼接在一起形成复合光学超晶格结构。其次，我们在理论和实验上研究了复合超晶格结构中的全新的、自旋依赖的拓扑界面态。该界面态起源于拓扑保护的“光子轨道”的杂化，被称为次级拓扑界面态。通过人为设计，我们可以使次级拓扑界面态始终是一种位于带隙中心的“零模式[84]”。最后通过透反射实验，我们验证了不同偏振下次级拓扑界面态的存在及可调性。

第四章中，首先介绍了我们的光子晶体系统中的能带简并理论，并指出该体系能带存在四重简并的 type-II 型狄拉克 nodal ring，进而实现了光学狄拉克 nodal line 半金属。其次，我们利用布洛赫模式的法布里-珀罗干涉所引起的透射图案得到了半金属三个方向的能带色散。接着，我们研究了截断结构界面出现的 double-bowl 表面态。它的不同偏振模式在整个测量光谱范围几乎是简并的，而这种宽带简并很难在其他光学系统中实现。最后，我们进一步探索了该体系中存在的其他类型表面态。

第五章是对博士期间工作的总结，和对今后的工作的展望。

## 参考文献

- [1] Luttinger, J. M., Karplus, R. Hall Effect in Ferromagnetics. *Physical Review*, **94** 782(1954).
- [2] Adams, E. N., Blount, E. I. Energy Bands in the Presence of an External Force Field .2. Anomalous Velocities. *Journal of Physics and Chemistry of Solids*, **10** 286(1959).
- [3] Resta, R. Macroscopic Polarization in Crystalline Dielectrics - the Geometric Phase Approach. *Reviews of Modern Physics*, **66** 899(1994).
- [4] Resta, R. The Insulating State of Matter: a Geometrical Theory. *European Physical Journal B*, **79** 121(2011).
- [5] Nagaosa, N., Sinova, J., Onoda, S., MacDonald, A. H., Ong, N. P. Anomalous Hall effect. *Reviews of Modern Physics*, **82** 1539(2010).
- [6] Berry, M. V. Quantal Phase-Factors Accompanying Adiabatic Changes. *Proceedings of the Royal Society of London Series a-Mathematical and Physical Sciences*, **392** 45(1984).
- [7] Hannay, J. H. Angle Variable Holonomy in Adiabatic Excursion of an Integrable Hamiltonian. *Journal of Physics a-Mathematical and General*, **18** 221(1985).
- [8] Xiao, D., Chang, M. C., Niu, Q. Berry phase effects on electronic properties. *Reviews of Modern Physics*, **82** 1959(2010).
- [9] Lindner, N. H., Refael, G., Galitski V. Floquet topological insulator in semiconductor quantum wells. *Nature Physics*, **7** 490(2011).
- [10] Gu, Z. H., Fertig, H. A., Arovas, D. P., Auerbach, A. Floquet Spectrum and Transport through an Irradiated Graphene Ribbon. *Physical Review Letters*, **107** 216601(2011).
- [11] Zak, J. Berrys Phase for Energy-Bands in Solids. *Physical Review Letters*, **62** 2747(1989).
- [12] Vonklitzing, K., Dorda, G., Pepper, M. New Method for High-Accuracy Determination of the Fine-Structure Constant Based on Quantized Hall Resistance. *Physical Review Letters*, **45** 494(1980).
- [13] Thouless, D. J., Kohmoto, M., Nightingale, M. P., Denny, M. Quantized Hall Conductance in a Two-Dimensional Periodic Potential. *Physical Review Letters*, **49** 405(1982).

- [14] Halperin, B. I. Quantized Hall Conductance, Current-Carrying Edge States, and the Existence of Extended States in a Two-Dimensional Disordered Potential. *Physical Review B*, **25** 2185(1982).
- [15] Smrcka, L. The Role of Edge Currents in Quantized Hall-Effect. *Journal of Physics C-Solid State Physics*, **17** L63(1984).
- [16] Buttiker, M. Absence of Backscattering in the Quantum Hall-Effect in Multiprobe Conductors. *Physical Review B*, **38** 9375(1988).
- [17] Qi, X. L., Wu, Y. S., Zhang, S. C. General theorem relating the bulk topological number to edge states in two-dimensional insulators. *Physical Review B*, **74** 045125(2006).
- [18] Hatsugai, Y. Edge States in the Integer Quantum Hall-Effect and the Riemann Surface of the Bloch Function. *Physical Review B*, **48** 11851(1993).
- [19] Hatsugai, Y. Chern Number and Edge States in the Integer Quantum Hall-Effect. *Physical Review Letters*, **71** 3697(1993).
- [20] Kim, M., Jacob, Z., Rho, J. Recent advances in 2D, 3D and higher-order topological photonics. *Light-Science & Applications*, **9** 130(2020).
- [21] Haldane, F. D. M. Model for a Quantum Hall-Effect without Landau-Levels - Condensed-Matter Realization of the Parity Anomaly. *Physical Review Letters*, **61** 2015(1988).
- [22] Chang, C. Z., Zhang, J. S., Feng, X., Shen, J., Zhang, Z. C., Guo, M. H., *et al.* Experimental Observation of the Quantum Anomalous Hall Effect in a Magnetic Topological Insulator. *Science*, **340** 167(2013).
- [23] Kane, C. L., Mele, E. J. Quantum spin Hall effect in graphene. *Physical Review Letters*, **95** 226801(2005).
- [24] Kane, C. L., Mele, E. J.  $Z(2)$  topological order and the quantum spin Hall effect. *Physical Review Letters*, **95** 146802(2005).
- [25] Kramers, H. A. General theory of the paramagnetic rotation in crystals. *Proceedings of the Koninklijke Akademie Van Wetenschappen Te Amsterdam*, **33** 959(1930).
- [26] Bernevig, B. A., Hughes, T. L., Zhang, S. C. Quantum spin Hall effect and topological phase transition in HgTe quantum wells. *Science*, **314** 1757(2006).
- [27] Bernevig, B. A., Zhang, S. C. Quantum spin hall effect. *Physical Review Letters*, **96** 106802(2006).
- [28] Konig, M., Wiedmann, S., Brune, C., Roth, A., Buhmann, H., Molenkamp, L. W.,

- et al.* Quantum spin hall insulator state in HgTe quantum wells. *Science*, **318** 766(2007).
- [29] Roy, R. Z(2) classification of quantum spin Hall systems: An approach using time-reversal invariance. *Physical Review B*, **79** 195321 (2009).
- [30] Fu, L., Kane, C. L., Mele, E. J. Topological insulators in three dimensions. *Physical Review Letters*, **98** 106803(2007).
- [31] Moore, J. E., Balents, L. Topological invariants of time-reversal-invariant band structures. *Physical Review B*, **75** 121306(2007).
- [32] Roy, R. Topological phases and the quantum spin Hall effect in three dimensions. *Physical Review B*, **79** 195322(2009).
- [33] Fu, L. A. Topological Crystalline Insulators. *Physical Review Letters*, **106** 106802(2011).
- [34] Wan, X. G., Turner, A. M., Vishwanath, A., Savrasov, S. Y. Topological semimetal and Fermi-arc surface states in the electronic structure of pyrochlore iridates. *Physical Review B*, **83** 205101(2011).
- [35] Lv, B. Q., Weng, H. M., Fu, B. B., Wang, X. P., Miao, H., Ma, J., *et al.* Experimental Discovery of Weyl Semimetal TaAs. *Physical Review X*, **5** 031013(2015).
- [36] Soluyanov, A. A., Gresch, D., Wang, Z. J., Wu, Q. S., Troyer, M., Dai, X., *et al.* Type-II Weyl semimetals. *Nature*, **527** 495(2015).
- [37] Xu, S. Y., Belopolski, I., Alidoust, N., Neupane, M., Bian, G., Zhang, C. L., *et al.* Discovery of a Weyl fermion semimetal and topological Fermi arcs. *Science*, **349** 613(2015).
- [38] Deng, K., Wan, G. L., Deng, P., Zhang, K. N., Ding, S. J., Wang, E. Y., *et al.* Experimental observation of topological Fermi arcs in type-II Weyl semimetal MoTe<sub>2</sub>. *Nature Physics*, **12** 1105(2016).
- [39] Liu, Z. K., Zhou, B., Zhang, Y., Wang, Z. J., Weng, H. M., Prabhakaran, D., *et al.* Discovery of a Three-Dimensional Topological Dirac Semimetal, Na<sub>3</sub>Bi. *Science*, **343** 864(2014).
- [40] Armitage, N. P., Mele, E. J., Vishwanath, A. Weyl and Dirac semimetals in three-dimensional solids. *Reviews of Modern Physics*, **90**, 015001(2018).
- [41] Wang, Z. J., Sun, Y., Chen, X. Q., Franchini, C., Xu, G., Weng, H. M., *et al.* Dirac semimetal and topological phase transitions in A(3)Bi (A = Na, K, Rb). *Physical Review B*, **85** 095320(2012).

- [42] Wang, Z. J., Weng, H. M., Wu, Q. S., Dai, X., Fang, Z. Three-dimensional Dirac semimetal and quantum transport in  $\text{Cd}_3\text{As}_2$ . *Physical Review B*, **88** 125427(2013).
- [43] Fang, C., Gilbert, M. J., Dai, X., Bernevig, B. A. Multi-Weyl Topological Semimetals Stabilized by Point Group Symmetry. *Physical Review Letters*, **108** 266802(2012).
- [44] Bradlyn, B., Cano, J., Wang, Z. J., Vergniory, M. G., Felser, C., Cava, R. J., *et al.* Beyond Dirac and Weyl fermions: Unconventional quasiparticles in conventional crystals. *Science*, **353** (2016).
- [45] Tang, P. Z., Zhou, Q., Zhang, S. C. Multiple Types of Topological Fermions in Transition Metal Silicides. *Physical Review Letters*, **119** 206402(2017).
- [46] Lv, B. Q., Feng, Z. L., Xu, Q. N., Gao, X., Ma, J. Z., Kong, L. Y., *et al.* Observation of three-component fermions in the topological semimetal molybdenum phosphide. *Nature*, **546** 627(2017).
- [47] Sanchez, D. S., Belopolski, I., Cochran, T. A., Xu, X. T., Yin, J. X., Chang, G. Q., *et al.* Topological chiral crystals with helicoid-arc quantum states. *Nature*, **567** 500(2019).
- [48] Schroter, N. B. M., Pei, D., Vergniory, M. G., Sun, Y., Manna, K. D., Juan, F., *et al.* Chiral topological semimetal with multifold band crossings and long Fermi arcs. *Nature Physics*, **15** 759(2019).
- [49] Rao, Z. C., Li, H., Zhang, T. T., Tian, S. J., Li, C. H., Fu, B. B., *et al.* Observation of unconventional chiral fermions with long Fermi arcs in  $\text{CoSi}$ . *Nature*, **567** 496(2019).
- [50] Fang, C., Chen, Y. G., Kee, H. Y., Fu, L. Topological nodal line semimetals with and without spin-orbital coupling. *Physical Review B*, **92** 081201(2015).
- [51] Fang, C., Weng, H. M., Dai, X., Fang, Z. Topological nodal line semimetals. *Chinese Physics B*, **25** 081201(2016).
- [52] Yu, R., Fang, Z., Dai, X., Weng, H. M. Topological nodal line semimetals predicted from first-principles calculations. *Frontiers of Physics*, **12** 117106(2017).
- [53] Kim, Y., Wieder, B. J., Kane, C. L., Rappe, A. M. Dirac Line Nodes in Inversion-Symmetric Crystals. *Physical Review Letters*, **115** 036806(2015).
- [54] Bzdusek, T., Wu, Q. S., Ruegg, A., Sigrist, M., Soluyanov, A. A. Nodal-chain metals. *Nature*, **538** 75(2016).
- [55] 翁红明, 戴希, 方忠, 拓扑半金属研究最新进展 *物理* **44** 253 (2015).

- [56] Takahashi, R., Hirayama, M., Murakami, S. Spinless hourglass nodal-line semimetals. *Physical Review B*, **96** 155206(2017).
- [57] Fu, B. T., Fan, X. T., Ma, D. S., Liu, C. C., Yao, Y. G. Hourglasslike nodal net semimetal in  $\text{Ag}_2\text{BiO}_3$ . *Physical Review B*, **98** 075149(2018).
- [58] Bzdusek, T., Sigrist, M. Robust doubly charged nodal lines and nodal surfaces in centrosymmetric systems. *Physical Review B*, **96** 155105(2017).
- [59] Turker, O., Moroz, S. Weyl nodal surfaces. *Physical Review B*, **97** 075120(2018).
- [60] Dirac, P. A. M. The quantum theory of the electron. *Proceedings of the Royal Society of London Series a-Containing Papers of a Mathematical and Physical Character*, **117** 610(1928).
- [61] Weyl, H. Electron and Gravitation. 1. *Zeitschrift Fur Physik*, **56** 330(1929).
- [62] Huang, S. M., Xu, S. Y., Belopolski, I., Lee, C. C., Chang, G., Chang, T. R., *et al.* New type of Weyl semimetal with quadratic double Weyl fermions. *Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America*, **113** 1180(2016).
- [63] Su, W. P., Schrieffer, J. R., Heeger, A. J. Solitons in Polyacetylene. *Physical Review Letters*, **42** 1698(1979).
- [64] Shen, S. -Q. *Topological insulators : Dirac equation in condensed matters*. Springer: Heidelberg ; New York, 2012.
- [65] Malkova, N., Hromada, I., Wang, X. S., Bryant, G., Chen, Z. G. Observation of optical Shockley-like surface states in photonic superlattices. *Optics Letters*, **34** 1633(2009).
- [66] Keil, R., Zeuner, J. M., Dreisow, F., Heinrich, M., Tunnermann, A., Nolte, S., *et al.* The random mass Dirac model and long-range correlations on an integrated optical platform. *Nature Communications*, **4** 1368 (2013).
- [67] Xiao, M., Zhang, Z. Q., Chan, C. T. Surface Impedance and Bulk Band Geometric Phases in One-Dimensional Systems. *Physical Review X*, **4** 021017(2014).
- [68] Tan, W., Sun, Y., Chen, H., Shen, S. Q. Photonic simulation of topological excitations in metamaterials. *Scientific Reports*, **4** 3842(2014).
- [69] Yannopoulos, V. Dirac Points, Topological Edge Modes and Nonreciprocal Transmission in One-Dimensional Metamaterial-Based Coupled-Cavity Arrays. *International Journal of Modern Physics B*, **28** 1441006(2014).
- [70] Poddubny, A., Miroshnichenko, A., Slobozhanyuk, A., Kivshar, Y. Topological Majorana States in Zigzag Chains of Plasmonic Nanoparticles. *Acs Photonics*, **1** 101(2014).

- [71] Ling, C. W., Xiao, M., Chan, C. T., Yu, S. F., Fung, K. H. Topological edge plasmon modes between diatomic chains of plasmonic nanoparticles. *Optics Express*, **23** 2021(2015).
- [72] Sinev, I. S., Mukhin, I. S., Slobozhanyuk, A. P., Poddubny, A. N., Miroschnichenko, A. E., Samusev, A. K., *et al.* Mapping plasmonic topological states at the nanoscale. *Nanoscale*, **7** 11904(2015).
- [73] Slobozhanyuk, A. P., Poddubny, A. N., Miroschnichenko, A. E., Belov, P. A., Kivshar, Y. S. Subwavelength Topological Edge States in Optically Resonant Dielectric Structures. *Physical Review Letters*, **114** 123901(2015).
- [74] Kruk, S., Slobozhanyuk, A., Denkova, D., Poddubny, A., Kravchenko, I., Miroschnichenko, A., *et al.* Edge States and Topological Phase Transitions in Chains of Dielectric Nanoparticles. *Small*, **13** 1603190(2017).
- [75] Bleckmann, F., Cherpakova, Z., Linden, S., Alberti, A. Spectral imaging of topological edge states in plasmonic waveguide arrays. *Physical Review B*, **96** 045417(2017).
- [76] Fedorova Z., Jorg, C., Dauer, C., Letscher, F., Fleischhauer, M., Eggert, S., *et al.* Limits of topological protection under local periodic driving. *Light-Science & Applications*, **8** 63(2019).
- [77] Solnyshkov, D. D., Nalitov, A. V., Malpuech, G. Kibble-Zurek Mechanism in Topologically Nontrivial Zigzag Chains of Polariton Micropillars. *Physical Review Letters*, **116** 046402(2016).
- [78] Naz, E. S. G., Fulga, I. C., Ma, L. B., Schmidt, O. G., van den Brink J. Topological phase transition in a stretchable photonic crystal. *Physical Review A*, **98** 033803(2018).
- [79] St-Jean, P., Goblot, V., Galopin, E., Lemaitre, A., Ozawa, T., Le Gratiet, L., *et al.* Lasing in topological edge states of a one-dimensional lattice. *Nature Photonics*, **11** 651(2017).
- [80] Parto, M., Wittek, S., Hodaei, H., Harari, G., Bandres, M. A., Ren, J. H., *et al.* Edge-Mode Lasing in 1D Topological Active Arrays. *Physical Review Letters*, **120** 113901(2018).
- [81] Zhao, H., Miao, P., Teimourpour, M. H., Malzard, S., El-Ganainy, R., Schomerus H., *et al.* Topological hybrid silicon microlasers. *Nature Communications*, **9** 981(2018).
- [82] Schomerus, H. Topologically protected midgap states in complex photonic

- lattices. *Optics Letters*, **38** 1912(2013).
- [83] Poshakinskiy, A. V., Poddubny, A. N., Pilozzi, L., Ivchenko, E. L. Radiative Topological States in Resonant Photonic Crystals. *Physical Review Letters*, **112** 107403(2014).
- [84] Poli, C., Bellec, M., Kuhl, U., Mortessagne, F., Schomerus, H. Selective enhancement of topologically induced interface states in a dielectric resonator chain. *Nature Communications*, **6** 6710 (2015).
- [85] Zeuner, J. M., Rechtsman, M. C., Plotnik, Y., Lumer, Y., Nolte, S., Rudner, M. S., *et al.* Observation of a Topological Transition in the Bulk of a Non-Hermitian System. *Physical Review Letters*, **115** 040402(2015).
- [86] Kitagawa, T., Rudner, M. S., Berg, E., Demler, E. Exploring topological phases with quantum walks. *Physical Review A*, **82** 033429(2010).
- [87] Tarasinski, B., Asboth, J. K., Dahlhaus, J. P. Scattering theory of topological phases in discrete-time quantum walks. *Physical Review A*, **89** 042327(2014).
- [88] Rice, M. J., Mele, E. J. Elementary Excitations of a Linearly Conjugated Diatomic Polymer. *Physical Review Letters*, **49** 1455(1982).
- [89] Wang, R., Zhang, X. Z., Song, Z. Dynamical topological invariant for the non-Hermitian Rice-Mele model. *Physical Review A*, **98** 042120(2018).
- [90] Hayward, A., Schweizer, C., Lohse, M., Aidelsburger, M., Heidrich-Meisner, F. Topological charge pumping in the interacting bosonic Rice-Mele model. *Physical Review B*, **98** 245148(2018).
- [91] Lu, L., Joannopoulos, J. D., Soljagic, M. Topological photonics. *Nature Photonics*, **8** 821(2014).
- [92] Lu, L., Joannopoulos, J. D., Soljagic, M. Topological states in photonic systems. *Nature Physics*, **12** 626(2016).
- [93] Khanikaev A.B., Shvets G. Two-dimensional topological photonics. *Nature Photonics*, **11** 763(2017).
- [94] Zhen, B., Zhou, H. Y., Peng, C., Yoon, Y., Hsu, C. W., Nelson, K. A., *et al.* Non-Hermitian Topological Photonics. *2018 Conference on Lasers and Electro-Optics (CLEO)* (2018).
- [95] Ozawa, T., Price, H. M., Amo, A., Goldman, N., Hafezi, M., Lu, L., *et al.* Topological photonics. *Reviews of Modern Physics*, **91** 015006(2019).
- [96] Haldane, F. D. M., Raghu, S. Possible realization of directional optical waveguides in photonic crystals with broken time-reversal symmetry. *Physical*

- Review Letters*, **100** 013904(2008).
- [97] Raghu, S., Haldane, F. D. M. Analogs of quantum-Hall-effect edge states in photonic crystals. *Physical Review A*, **78** 033834(2008).
- [98] Wang, Z., Chong, Y.D., Joannopoulos, J. D., Soljagic, M. Reflection-free one-way edge modes in a gyromagnetic photonic crystal. *Physical Review Letters*, **100** 013905(2008).
- [99] Wang, Z., Chong, Y. D., Joannopoulos, J. D., Soljagic, M. Observation of unidirectional backscattering-immune topological electromagnetic states. *Nature*, **461** 772(2009).
- [100] Fang, K. J., Yu, Z. F., Fan, S. H. Realizing effective magnetic field for photons by controlling the phase of dynamic modulation. *Nature Photonics*, **6** 782(2012).
- [101] Rechtsman, M. C., Zeuner, J. M., Plotnik, Y., Lumer, Y., Podolsky, D., Dreisow, F., *et al.* Photonic Floquet topological insulators. *Nature*, **496** 196(2013).
- [102] Hafezi, M., Demler, E. A., Lukin, M. D., Taylor, J. M. Robust optical delay lines with topological protection. *Nature Physics*, **7** 907(2011).
- [103] Hafezi, M., Mittal, S., Fan, J., Migdall, A., Taylor, J. M. Imaging topological edge states in silicon photonics. *Nature Photonics*, **7** 1001(2013).
- [104] Khanikaev, A. B., Mousavi, S. H., Tse, W. K., Kargarian, M., MacDonald, A. H., Shvets, G. Photonic topological insulators. *Nature Materials*, **12** 233(2013).
- [105] He, C., Sun, X. C., Liu, X. P., Lu, M. H., Chen, Y., Feng, L., *et al.* Photonic topological insulator with broken time-reversal symmetry. *Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America*, **113** 4924(2016).
- [106] Wu, L. H., Hu, X. Scheme for Achieving a Topological Photonic Crystal by Using Dielectric Material. *Physical Review Letters*, **114** 223901(2015).
- [107] Barik, S., Karasahin, A., Flower, C., Cai, T., Miyake, H., DeGottardi, W., *et al.* A topological quantum optics interface. *Science*, **359** 666(2018).
- [108] Mehrabad, M. J., Foster, A. P., Dost, R., Clarke, E., Patil, P. K., Farrer, I., *et al.* A semiconductor topological photonic ring resonator. *Applied Physics Letters*, **116** (2020).
- [109] Lu, L., Fu, L., Joannopoulos, J. D., Soljagic, M. Weyl points and line nodes in gyroid photonic crystals. *Nature Photonics*, **7** 294(2013).
- [110] Dubcek, T., Kennedy, C. J., Lu, L., Ketterle, W., Soljagic, M., Buljan, H. Weyl Points in Three-Dimensional Optical Lattices: Synthetic Magnetic Monopoles in Momentum Space. *Physical Review Letters*, **114** 225301(2015).

- [111] Roy, S., Kolodrubetz, M., Goldman, N., Grushin, A. G. Tunable axial gauge fields in engineered Weyl semimetals: semiclassical analysis and optical lattice implementations. *2d Materials*, **5** 024001(2018).
- [112] Gao, W. L., Yang, B., Lawrence, M., Fang, F. Z., Beri, B., Zhang, S. Photonic Weyl degeneracies in magnetized plasma. *Nature Communications*, **7** 12435(2016).
- [113] Gao, W. L., Lawrence, M., Yang, B. A., Liu, F., Fang, F. Z., Beri, B., *et al.* Topological Photonic Phase in Chiral Hyperbolic Metamaterials. *Physical Review Letters*, **114** 037402(2015).
- [114] Xiao, M., Lin, Q., Fan, S. H. Hyperbolic Weyl Point in Reciprocal Chiral Metamaterials. *Physical Review Letters*, **117** 057401(2016).
- [115] Liu, C. X., Gao, W. L., Yang, B., Zhang, S. Disorder-Induced Topological State Transition in Photonic Metamaterials. *Physical Review Letters*, **119** 183901(2017).
- [116] Yang, Z. J., Xiao, M., Gao, F., Lu, L., Chong, Y. D., Zhang, B. L. Weyl points in a magnetic tetrahedral photonic crystal. *Optics Express*, **25** 15772(2017).
- [117] Lu, L., Wang, Z. Y., Ye, D. X., Ran, L. X., Fu, L., Joannopoulos, J. D., *et al.* Experimental observation of Weyl points. *Science*, **349** 622(2015).
- [118] Chen, W. J., Xiao, M., Chan, C. T. Photonic crystals possessing multiple Weyl points and the experimental observation of robust surface states. *Nature Communications*, **7** 13038(2016).
- [119] Yang, B. A., Guo, Q. H., Tremain B., Barr, L. E., Gao, W. L., Liu, H. C., *et al.* Direct observation of topological surface-state arcs in photonic metamaterials. *Nature Communications*, **8** 7(2017).
- [120] Noh, J., Huang, S., Leykam, D., Chong, Y. D., Chen, K. P., Rechtsman, M. C. Experimental observation of optical Weyl points and Fermi arc-like surface states. *Nature Physics*, **13** 611(2017).
- [121] Yang, B., Guo, Q. H., Tremain, B., Liu, R. J., Barr, L. E., Yan, Q. H., *et al.* Ideal Weyl points and helicoid surface states in artificial photonic crystal structures. *Science*, **359** 1013(2018).
- [122] Lin, Q., Xiao, M., Yuan, L. Q., Fan, S. H. Photonic Weyl point in a two-dimensional resonator lattice with a synthetic frequency dimension. *Nature Communications*, **7** 13731(2016).
- [123] Wang, Q., Xiao, M., Liu, H., Zhu, S. N., Chan, C. T. Optical Interface States Protected by Synthetic Weyl Points. *Physical Review X*, **7** 031032(2017).
- [124] Wang, H. X., Xu, L., Chen, H. Y., Jiang, J. H. Three-dimensional photonic Dirac

- points stabilized by point group symmetry. *Physical Review B*, **93** 235155(2016).
- [125] Wang, H. X., Chen, Y., Hang, Z. H., Kee, H. Y., Jiang, J. H. Type-II Dirac photons. *Npj Quantum Materials*, **2** 54(2017).
- [126] Guo, Q. H., Yang, B., Xia, L. B., Gao, W. L., Liu, H. C., Chen, J., *et al.* Three Dimensional Photonic Dirac Points in Metamaterials. *Physical Review Letters*, **119** 213901(2017).
- [127] Guo, Q. H., You, O. B., Yang, B., Sellman, J. B., Blythe, E., Liu, H. C., *et al.* Observation of Three-Dimensional Photonic Dirac Points and Spin-Polarized Surface Arcs. *Physical Review Letters*, **122** 203903(2019).
- [128] Chang, M. L., Xiao, M., Chen, W. J., Chan, C. T. Multiple Weyl points and the sign change of their topological charges in woodpile photonic crystals. *Physical Review B*, **95** 125136(2017).
- [129] Yan, Q.H., Liu, R. J., Yan, Z. B., Liu, B. Y., Chen, H. S., Wang, Z., *et al.* Experimental discovery of nodal chains. *Nature Physics*, **14** 461(2018).
- [130] Xia, L. B., Guo, Q. H., Yang, B., Han, J. G., Liu, C. X., Zhang, W. L., *et al.* Observation of Hourglass Nodal Lines in Photonics. *Physical Review Letters*, **122** 103903(2019).
- [131] Yang, E. C., Yang, B., You, O. B., Chan, H. C., Mao, P., Guo, Q. H., *et al.* Observation of Non-Abelian Nodal Links in Photonics. *Physical Review Letters*, **125** 033901(2020).
- [132] Yuan, L. Q., Lin, Q., Xiao, M., Fan, S. H. Synthetic dimension in photonics. *Optica*, **5** 1396(2018).
- [133] Lohse, M., Schweizer, C., Price, H. M., Zilberberg, O., Bloch, I. Exploring 4D quantum Hall physics with a 2D topological charge pump. *Nature*, **553** 55(2018).
- [134] Zilberberg, O., Huang, S., Guglielmon, J., Wang, M. H., Chen, K. P., Kraus, Y. E., *et al.* Photonic topological boundary pumping as a probe of 4D quantum Hall physics. *Nature*, **553** 59(2018).
- [135] Zhang, T. T., Song, Z. D., Alexandradinata, A., Wen, H. M., Fang, C., Lu, L., *et al.* Double-Weyl Phonons in Transition-Metal Monosilicides. *Physical Review Letters*, **120** 016401(2018).

## 第二章 光子晶体超晶格中 charge-2 狄拉克半金属与边界态

### 2.1 引言

近年来人们对拓扑半金属材料进行了广泛而深入的研究,在理论和实验上取得了丰硕的成果。而拓扑半金属中的无能隙简并相被视为新的拓扑态,激发了人们浓厚的兴趣,开辟了拓扑物理研究的新纪元。其中的典型代表便是外尔半金属和三维狄拉克半金属,对应的能带简并点分别为外尔点(Weyl points, 记作 WPs) [1-6]和三维狄拉克点(Dirac points, 记作 DPs) [7]。WPs 在电子系统中被广泛研究,被认为是动量空间中的磁单极子,携带 $\pm 1$ 的拓扑荷(陈数),具有费米弧表面态[6, 8]。DP 可以看作是两个拓扑荷相反的王Ps 重叠在一起,近年来也在不同晶体结构中被预测和观察到。然而,最近的研究表明,在一些晶体结构中出现了非常规的拓扑简并点[9-17],它们的存在不能用相对论场论来描述。其中一种被称作 charge-2 狄拉克点(charge-2 Dirac points, 写作 CDPs)的能带简并点存在于过渡金属单硅化物的声子能带中[13, 14],它是由一对带相同拓扑荷的王Ps 重叠而成的,因此具有 $\pm 2$ 的拓扑荷。因此,CDPs 与传统的 DPs 有着根本的区别,可以带来全新的物理现象。

除了利用自然界中发现的天然材料来研究各类奇异的拓扑相,人们通过精心设计的晶格结构(engineered lattices)拓展并加深了对能带拓扑的研究。其核心思想是设计出与电子晶体类似的能带结构,而这种能带结构具有高度的可调性,会引入与电子系统显著不同的特性,为探索拓扑物理及其在各个领域的应用提供了前所未有的机会。近年来随着实验技术的发展,人们利用超冷原子系统[18, 19]、光学系统[4, 20-25]和声学系统[26-29]等成功构造了外尔半金属和狄拉克半金属等,它们往往具备新奇的特性,从而具有广泛的应用价值。

那么,如何得到拓扑半金属的特定晶格呢?最常用的方法是构造具备特定对称性或对称性破缺的复杂三维结构[4, 20-23, 26-28],而另一种实现的方法则是利用合成维度(synthetic dimensions)建立合成空间(synthetic space) [29-34]。最初,人们采用合成维度的动机是想在真实的三维空间自由度之外,通过引入可控的合成维度来探索高维空间中的基本物理效应,特别是超过三维空间的系统中

的拓扑效应。然而，最近人们将合成维度的概念引入到二维和一维系统，通过利用低维系统来研究三维拓扑半金属相，大大简化了实验设计 [18, 25, 29, 33, 35, 36]。近年来，这两种方法都被广泛应用于对 WPs 和 DPs 的研究中，但就 CDPs 而言，迄今为止报道的唯一实现它的结构是一种三维非对称的声子晶体 [37]。据我们所知，在可见光频段，光学 charge-2 狄拉克半金属既没有在三维晶格系统也没有在利用合成维度的二维和一维结构中被实现。

在本章中，我们利用人工合成维度，提出了一种在一维光子晶体超晶格中实现 charge-2 狄拉克半金属的实验可行方案，首次在可见光波段实现了 CDP 及其衍生的两个具有相同拓扑荷的 WPs。此外，在有限超晶格结构中，实现对由 CDPs 引起的拓扑保护边界态的充分调控。

## 2.2 光子晶体超晶格的构造

光子晶体 (photonic crystals, 记作 PCs) 是一类由不同折射率的材料周期性排列形成的人造微结构，具有光子带隙，最早是在 1987 年由 Yablonovitch 和 John 分别提出 [38, 39]。其中一维 PC 往往是由不同介质层周期堆叠而成。在本节中，我们首先利用一维 PCs 构造了一系列可以相互耦合的光子态，从而形成超晶格结构，这是我们得到光学 charge-2 狄拉克半金属的基础。

具有不同拓扑相的两种材料界面存在奇异的拓扑保护量子态，对这些量子态的调控和应用有力地推动了当前拓扑物理领域的发展 [40-44]。所以在这里，我们将两种属于不同拓扑相的一维 PCs 堆叠在一起，以得到拓扑保护的界面模式 (topological interface modes, 记作 TIMs)。具体来说，我们的系统由这两种 PCs 交替堆叠而成，其中每个界面都存在 TIM。每个 TIM 相当于一个人工光子轨道，它们之间相互耦合以形成集体共振模式，从而得到一维超晶格能带结构。此外，在本节中将说明这种光子晶体超晶格的能带也具备拓扑性。

### 2.2.1 拓扑界面模式的实现和调控

构造稳定存在并且高度可调的 TIMs 是实现特定超晶格能带的基础，本节将

详细介绍 TIMs 的拓扑保护起源以及如何对 TIMs 进行灵活调控。

为了阐明 TIMs 的拓扑起源，我们先对一维 PC 中的拓扑性质进行简要的回顾。对于每个光子能带，其拓扑性质由等于  $\pi$  或 0 的 Zak 相位 ( $\theta_m^{\text{Zak}}$ ) 决定，其定义由下式给出[45]：

$$\theta_m^{\text{Zak}} = \int_{-\frac{\pi}{T}}^{\frac{\pi}{T}} \left[ i \int_{\text{unit cell}} \varepsilon(z) u_{m,K}^*(z) \partial_K u_{m,K}(z) dz \right] dK, \quad (2.1)$$

这里  $T$  指的是 PC 的周期单元长度， $\varepsilon(z)$  是 PC 堆叠方向（沿  $z$  轴）上的介电系数， $u_{m,K}(z)$  表示第  $m$  条能带处电场的布洛赫本征函数，布洛赫波矢为  $K$ 。

因此，两个一维 PC 之间是否存在拓扑界面模式可以通过计算两个一维 PC 在第  $m$  个带隙 ( $\sum_i^m \theta_i^{\text{Zak}}$ ) 以下的 Zak 相位的总和来预测[46]：当它们的求和  $\sum_i^m \theta_i^{\text{Zak}}$  相差  $(2l+1)\pi$  时（其中  $l$  是整数），通过拼接它们所形成的界面存在 TIM，其频率位于第  $m$  个带隙中。特别地，如果两个 PCs 都是由两种相同的介质材料构成，并且周期单元是中心对称的，也就是说它们具有相同的介质成分而单元对称中心不同，那么它们将具有相同的能带结构和不同的能带拓扑性质[46]。这时第一个带隙以下的 Zak 相位差为  $\pi$ 。所以第一个带隙内一定能出现 TIM。

受上述研究结果的启发，在本章中，我们特意设计了两种二元中心对称的 (binary centrosymmetric) 的一维 PCs: q 型 PC 和 p 型 PC，它们都是由 M1 和 M2 两种介质材料交替堆叠而成。q(p) 型 PC 的中心对称单元由一层厚度为  $d_1$  ( $d_2$ ) 的 M1(M2) 介质层夹在厚度为  $d_2/2$  ( $d_1/2$ ) 的半层 M2(M1) 介质层之间所构成，我们用  $M2_{d_2/2}M1_{d_1}M2_{d_2/2}$  ( $M1_{d_1/2}M2_{d_2}M1_{d_1/2}$ ) 来表示。因此，这两种单元具有相同的周期 ( $T = d_1 + d_2$ ) 和介电特性以及不同的对称中心，满足上述第一个能隙中出现 TIM 的条件。除此之外，通过分别计算 q 型 PC 和 p 型 PC 能带的 Zak 相位，我们进一步地确定了界面模式的拓扑起源。图 2.1 展示了两种 PCs 的带隙和相应的 Zak 相位计算结果，与上述分析一致，从而证明了第一个带隙中存在拓扑保护的 TIM。

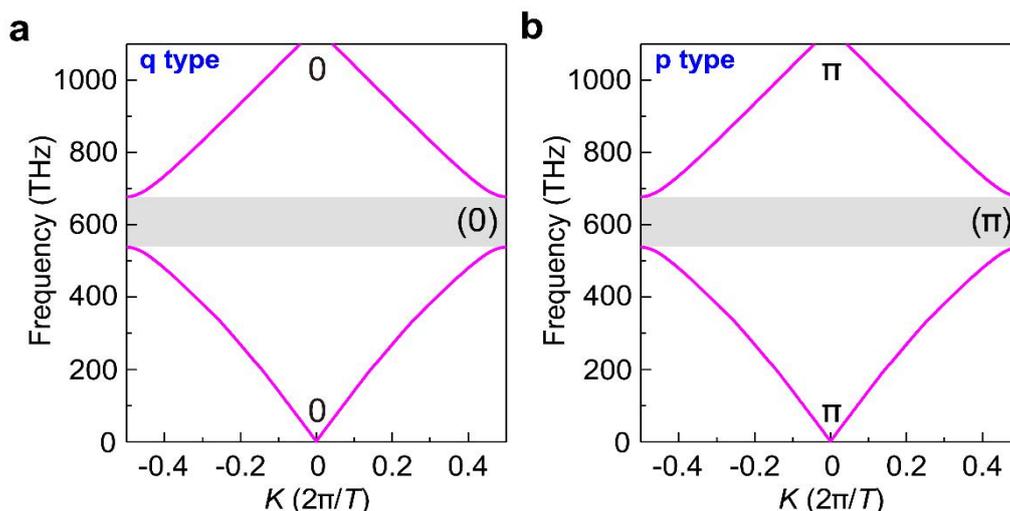


图 2.1 q 型 PC 和 p 型 PC 的能带以及相应 Zak 相位。(a) 和 (b) 分别是 q 型 PC 和 p 型 PC 的能带这里，介质材料 M1 是  $\text{HfO}_2$ ，厚度  $d_1=70\text{nm}$ ；M2 是  $\text{SiO}_2$ ，厚度  $d_2=79\text{nm}$ 。两种材料在研究频段的折射率分别约为 2 和 1.46（色散很小可以忽略）。每个能带的 Zak 相位都标注它旁边，第一个带隙以下的 Zak 相位之和为带隙区域（灰色阴影区域）的括号中数值。

有了拓扑保护的稳定 TIM，我们便可以对单个 TIM 的共振频率进行调节。接下来介绍实现高度可调的 TIM 的方法和实验论证。我们注意到，稍微改变两种 PC 界面相邻介质层的厚度便能明显改变 TIM 的共振频率。于是我们在界面引入一个薄层 D，结构其用  $M1_d M2_d$  来表示，目的是把 PC 界面相邻的 M1 和 M2 介质层各加厚  $d$ （即改变 q 型和 p 型 PC 的截断位置）。在模拟和实验中，两种 PCs 的单元数都为 6。为了方便起见，由重复的 p (q) 型单元构成的 PC 结构可以用  $p_6$  ( $q_6$ ) 来描述，其中下标用于表示单元的数量。因此，我们采用  $p_6 D q_6$  来标记上述可以支持单个 TIM 的结构，如图 2.2a 所示。实验上，这种结构是用电子束蒸发法制备的，我们制备了三个具有相同  $d_1=70\text{nm}$  和  $d_2=79\text{nm}$  的样品，但分别令  $d=0\text{nm}$ （样品 I）、 $d=5\text{nm}$ （样品 II）和  $d=10\text{nm}$ （样品 III）。图 2.2b 展示了样品 II 的扫描电子显微镜（SEM）照片，其中展示了 p 型和 q 型 PCs 的单元结构。图 2.2c 的黑色（品红）空心圆给出了样品 II（III）在垂直入射光激发下（ $k_x = 0\mu\text{m}^{-1}$ ）的测量透射谱，其中两个 PC 的公共带隙和能带位置分别对应白色和灰色区域。可以看出，在带隙内出现“尖峰”，这是 TIM 所引起的透射极大值。为了验证这一点，图 2.2d 展示了样品 II 的透射增强态的电场空间分布模拟计算结果，从中我们可以看到，该模式强度从薄层的位置向两侧快速衰减，

这是 TIM 的典型特征。我们还可以看到，图 2.2c 中样品 III 的 TIM 峰值位于比样品 II 更低的频率，因而 TIM 共振频率对薄层中介质厚度  $d$  十分敏感。为展示频率与厚度的依赖关系，我们在图 2.2e 中用红色空心圆标记了这三个样品各自的 TIM 的共振频率，可以清楚看到共振频率随着  $d$  值的增加显著降低。这证实了调制界面薄层厚度为我们提供了一种灵活调控 TIM 共振频率的可行方案。

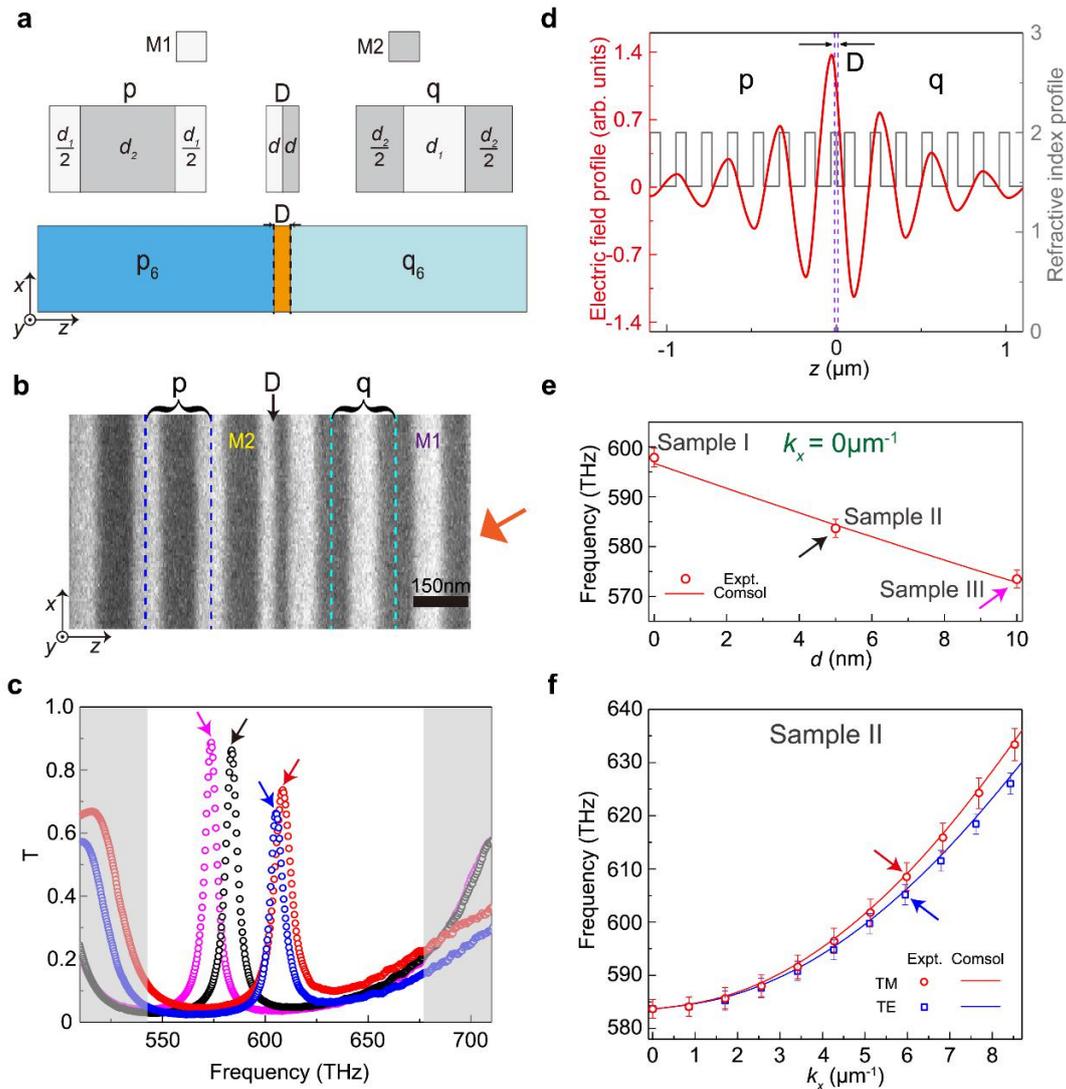


图 2.2 单个 TIM 的构造和调控。(a) 支持单个 TIM 的结构示意图。上部展示了 q 型 PC 和 p 型 PC 的周期单元以及薄层的结构，它们都是由 M1 (白色) 和 M2 (灰色) 两种绝缘体材料交替组成。每一层的厚度都标记在图中。(b) 样品 II 的扫描电镜 (SEM) 照片。橙色箭头表示入射光的方向。这里采用的材料和结构与图 2.1 相同。(c) 实验测量所得的样品 II 透射谱，其中垂直入射、TM 和 TE 偏振的斜入射测量结果分别用黑色、红色和蓝色空心圆表示。这里选用的斜入射角是  $30^\circ$ 。品红色的空心圆表示样品 III 在垂直入射下的测量透射谱。(d) 垂直入射样品 II 所激发的 TIM 的电场分布计算结果，用红色实线表示。灰线表示相应结构的

折射率分布。(e)  $k_x = 0\mu\text{m}^{-1}$  下 TIM 共振频率随  $d$  的变化。(f) 样品 II 中所激发的 TM 偏振(红线)和 TE 偏振(蓝线)的 TIM 的面内色散关系。在 (e) 和 (f) 中, 实线由仿真软件 COMSOL 计算得到, 空心图形表示由实验数据所提取得到的结果。(e) 和 (f) 中黑色、红色、蓝色和品红箭头对应的实验透射谱展示在 (c) 中。误差条反映了实验结果的误差范围。

此外, TIM 存在 TM (横磁场) 和 TE (横电场) 两种偏振模式, 但在垂直入射情况下 ( $k_x = 0\mu\text{m}^{-1}$ ), 两种偏振的 TIMs 是简并的。为了消除这种简并, 我们需要使用两种偏振的斜入射光 ( $k_x \neq 0\mu\text{m}^{-1}$ ) 分别激发 TIM, 于是我们测量了样品 II 在斜入射下 ( $k_x = 6\mu\text{m}^{-1}$ ) 的 TM (TE) 偏振光下的透射谱, 测量结果对应图 2.2f 中红色 (TM) 和蓝色 (TE) 的空心圆, 这证实了斜入射下偏振简并度的消除。值得注意的是, TM (红色) 和 TE (蓝色) 偏振的 TIM 频率之间的劈裂随  $d$  的增加单调增加, 与计算结果 (图 2.2f 中实线) 基本吻合。因此, 斜入射下 (即  $k_x \neq 0\mu\text{m}^{-1}$ ) TM 和 TE 偏振的 TIMs 简并度消除为我们提供了调控 TIM 的另一个自由度。

### 2.2.2 两个拓扑界面模式的耦合强度及符号的调控

为了构造光学超晶格, 我们需要调控 TIMs 之间的耦合。由于 TIM 的局域性, 在这里我们只考虑相邻两个 TIMs 之间的耦合。本节主要介绍两个 TIMs 之间的耦合效应及调控方法。

我们分别研究了 q 型和 p 型 PCs 作为两个界面间结构时的耦合情况。如图 2.3a 所示, 相应两种结构都是由两个薄层分开的 q 型和 p 型 PCs 堆叠组成。和图 2.2a 中的符号使用一致, 图 2.3a 中的两个结构可以分别表示为  $p_6 D q_N D p_6$  和  $q_6 D p_N D p_6$ , 其中下标  $N$  是相应 PC 的单元数量。因此, 图 2.3a 中每个结构的两个界面都存在相同共振频率  $\omega_0$  的 TIMs, 它们的波函数相互重叠, 从而形成两个杂化 TIMs 模式: 一个对称模式 (S) 和一个反对称模式 (AS), 本征频率分别为  $\omega_S$  和  $\omega_{AS}$ 。我们用电场的对称性定义对称类型, 用  $p_N$  ( $q_N$ ) 的中心作为参考点。利用紧束缚模型进行分析, 我们可以得到两个 TIMs 间的归一化耦合系数  $J$ 。

考虑图 2.3a 两种结构的任意一种，可以将哈密顿量写成以下矩阵：

$$H = \begin{pmatrix} \omega_0 & t \\ t & \omega_0 \end{pmatrix}, \quad (2.2)$$

这里  $\omega_0$  是每个单一 TIM 的本征频率而  $t$  对应耦合项。

把式 (2.2) 的哈密顿矩阵对角化，我们得到了两个本征态，其本征频率和波函数如下所示：

$$\omega = \begin{cases} \omega_S \equiv \omega_0 + t, & |\varphi^S\rangle = \frac{\sqrt{2}}{2}(|\phi_1\rangle + |\phi_2\rangle) \\ \omega_{AS} \equiv \omega_0 - t, & |\varphi^{AS}\rangle = \frac{\sqrt{2}}{2}(|\phi_1\rangle - |\phi_2\rangle) \end{cases}, \quad (2.3)$$

$|\phi_1\rangle$  和  $|\phi_2\rangle$  分别是两个界面上 TIM 的波函数。 $|\varphi^S\rangle$  和  $|\varphi^{AS}\rangle$  是上述的对称 (S) 和反对称 (AS) 杂化模式。因此，归一化耦合系数可按定义写为：

$$J \equiv \frac{t}{\omega_0} = \frac{\omega_S - \omega_{AS}}{2\omega_0}, \quad (2.4)$$

接下来，我们将详细说明  $J$  的大小和符号，是直接由两个界面中间的 q 型或 p 型 PC 的单元数量  $N$  所决定的。

我们先用 q 型 PC 作为界面中间结构（“耦合渠道”），即  $p_6 Dq_N Dp_6$ ，考虑水平波矢  $k_x = 0 \mu\text{m}^{-1}$ （正入射）的情况。图 2.3b 展示了  $p_6 Dq_6 Dp_6$  和  $p_6 Dq_7 Dp_6$  的测量透射谱（黑色空心圆）。除了薄层的  $d$  为 0nm 之外，p 型和 q 型 PCs 的参数与图 2.2b 中相同。对于每个样品，我们都看到了两个透射峰，对应于两个杂化 TIMs (S 和 AS 模式，在这里及下文，杂化模式的对称性是用 COMSOL 数值计算得到的本征电场分布确定的)。具体来说，对  $p_6 Dq_6 Dp_6$ ， $\omega_S < \omega_{AS}$  所以  $J < 0$ ；然而对  $p_6 Dq_7 Dp_6$ ， $\omega_S > \omega_{AS}$  所以  $J > 0$ 。我们测量了不同  $N$  的  $p_6 Dq_N Dp_6$  样品的透射谱，然后计算得到相应的  $J$  值，其结果展示在图 2.3c 中（蓝色向下三角形）。可以清楚地看到， $|J|$  与  $N$  呈负相关，而  $J$  的符号完全取决于  $N$  的奇偶性。对  $p_6 Dq_N Dp_6$  来说，如果  $N$  是奇数， $J > 0$ ，否则  $J < 0$ 。这是因为每个周期单元的累积相位是  $\pi$ 。接着我们用 p 型 PC 作为“耦合途径”，即  $q_6 Dp_N Dp_6$ ，同样考虑正入射。对应  $J$  的结果同样展示在图 2.3c 中（红色向上三角形）。可以发现对于特定的  $N$ ， $q_6 Dp_N Dp_6$  和  $p_6 Dq_N Dp_6$  的  $|J|$  基本相等，

但是  $J$  的符号相反。对  $q_6 D p_N D p_6$  来说, 如果  $N$  是奇数,  $J < 0$ , 否则  $J > 0$ 。为了证实这些结果, 我们还将 COMSOL 数值计算的结果绘制在图 2.3c 中, 与实验结果符合良好。

接下来, 我们进一步说明水平波矢不为 0 情况下 ( $k_x > 0 \mu\text{m}^{-1}$ ) 的耦合效应。图 2.3b 还分别展示了 TM (红色空心圆) 和 TE (蓝色空心圆) 偏振光斜角度激发下的两个样品  $p_6 D q_6 D p_6$  和  $p_6 D q_7 D p_6$  的测量透射谱, 其中  $k_x = 6 \mu\text{m}^{-1}$ , 从而显示了杂化 TIMs 的偏振依赖特性。更进一步地, 我们在图 2.3d 中绘制  $J$  关于  $k_x$  的函数, 其中采用  $p_6 (q_6)$  和  $p_7 (q_7)$  作为偶数和奇数情况的代表。结果清楚地表明,  $J$  的符号变化与  $k_x = 0 \mu\text{m}^{-1}$  情况相同。然而, 对于一个特定  $p_N (q_N)$ , 随着  $k_x$  的增加, TM 模式和 TE 模式对应的  $J$  的变化趋势有明显的区别: 前者几乎保持不变, 而后者则显著减小。COMSOL 的计算结果在图 2.3d 用线展示了出来, 与实验结果相符。

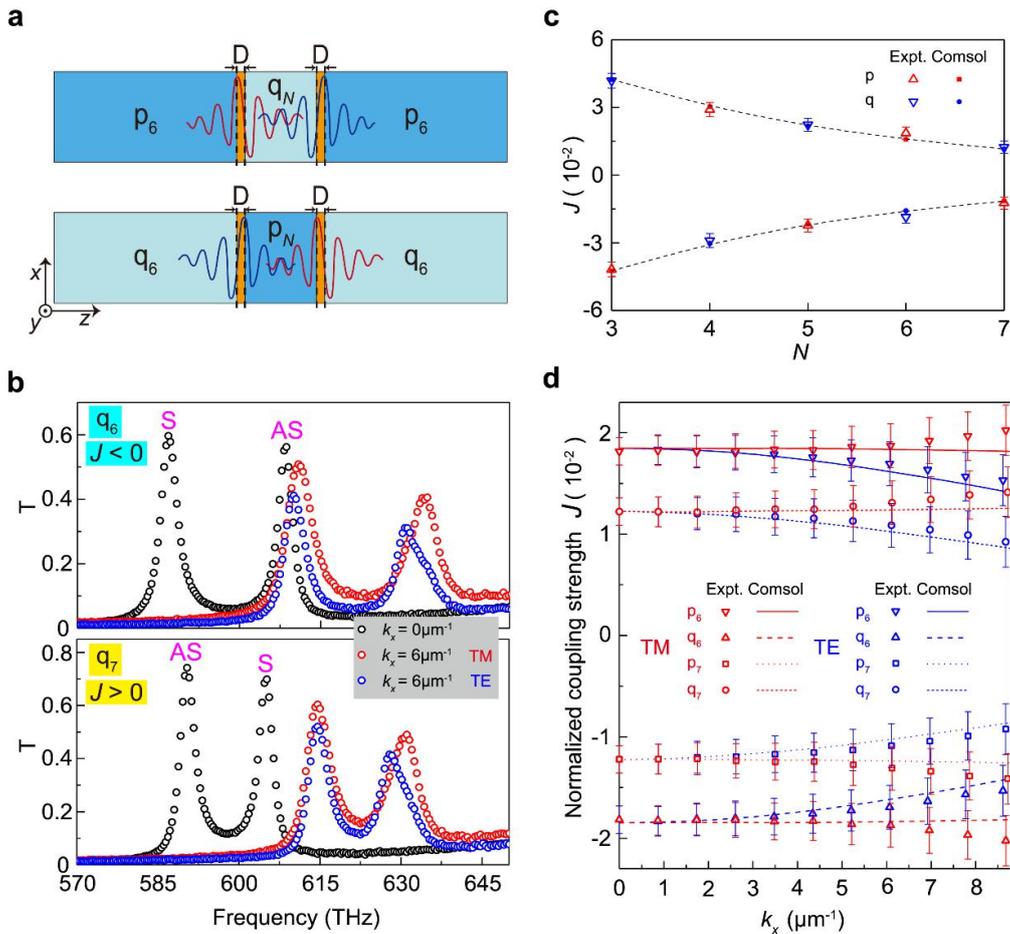


图 2.3 相邻两个 TIMs 之间的耦合。(a) 两种存在耦合 TIMs 的结构设计图。红色和蓝色曲

线展示了两个单独 TIM 的电场分布图。(b)  $p_6Dq_6Dp_6$  (上部)和  $p_6Dq_7Dp_6$  (下部) 的测量透射谱, 黑色、红色和蓝色空心圆分别表示垂直入射 ( $k_x = 0\mu\text{m}^{-1}$ )、TM 和 TE 偏振光  $30^\circ$  角入射 ( $k_x = 6\mu\text{m}^{-1}$ ) 的测量结果。(c) 归一化耦合系数  $J$  随  $N$  的变化规律。蓝色和红色图形分别对应 q 型和 p 型 PC 的情形, 其中实心圆形 (q 型) 和方形 (p 型) 是通过 COMSOL 仿真所得, 而空心向下 (q 型) 和向上 (p 型) 的三角形是实验获取的结果。虚线表明  $|J|$  的变化趋势, 它随  $N$  的增大而变小。(d) TM 和 TE 偏振下  $J$  随水平波矢  $k_x$  的变化规律。图中的线是由 COMSOL 计算得到, 而空心图形由实验数据提取所得。(c) 和 (d) 中的误差条表示出了实验结果的误差范围。

### 2.2.3 光子晶体超晶格拓扑能带的实现

在 2.2.1 中, 我们验证了单个 TIM 的共振频率可以通过界面薄层厚度 (即 PCs 截断位置) 精密调控, 且其对 TM 和 TE 偏振光响应不同; 在 2.2.2 中, 我们论证了两个相邻 TIMs 之间的耦合系数 (包括大小和符号), 可以通过它们之间的 PC 类型和单元数量  $N$  来调节, 且也对不同偏振响应不同。这些足以使我们利用光子晶体结构, 构造一个类似于二聚原子链的一维拓扑超晶格。在这里我们把 TIMs 看作光子轨道, 而它们耦合形成的集体共振模式, 我们称之为超模式 (super-modes)。因此, 我们特意设计了一个光学超晶格, 以得到一个周期性的 TIMs 序列, 它由  $p_m$ 、 $D_A$ 、 $q_n$  和  $D_B$  的交替结构组成 如图 2.4 所示。其第  $i$  个元胞 (unit dimer) 被紫色虚线矩形框圈出, 包含两个子晶格点  $A_i$  和  $B_i$ , 它的结构可表示为  $[p_{m/2}D_Aq_nD_Bp_{m/2}]$  (下标 A 和 B 表示两个不同的薄层, 其介质层厚度分别为  $d_A$  和  $d_B$ ; 下标  $m(n)$  表示 q (p) 型 PC 的单元数量)。然后将两个相邻 TIMs 的共振频率分别表示为  $\omega_{A,s} = \omega_s + \Delta_s$  和  $\omega_{B,s} = \omega_s - \Delta_s$ , 其中  $s = \uparrow\downarrow$  表示偏振自由度,  $\omega_s \equiv (\omega_{A,s} + \omega_{B,s})/2$  而  $\Delta_s \equiv (\omega_{A,s} - \omega_{B,s})/2$ 。这里, 偏振可以视为 TIM 的赝自旋 (pseudospin) 自由度, 自旋向上 ( $s = \uparrow$ ) 和向下 ( $s = \downarrow$ ) 分别对应 TM 和 TE 偏振。 $\omega_s$  表示两个 TIMs 的平均共振频率,  $\Delta_s$  表示对称和反对称模式相对于  $\omega_s$  的频率偏移大小。正如图 2.2 所示,  $\Delta_s$  的大小取

决于  $(d_A - d_B)$ 。“耦合渠道”  $q_n (p_m)$  直接决定了元胞内 (间) 的耦合系数, 我们用  $J_{1,s} (J_{2,s})$  来表示。另外, 耦合系数符号的可调性是我们超晶格系统的一个显著特性: 如果  $m$  和  $n$  同时为奇数或者偶数, 会使得  $J_{1,s} J_{2,s} < 0$ ; 如果  $m$  和  $n$  一奇一偶,  $J_{1,s} J_{2,s} > 0$ 。考虑到这一点, 我们额外引入参数  $g \equiv \text{sgn}\left(\frac{J_{2,s}}{J_{1,s}}\right)$  来表征耦合的符号特性, 以及参数  $J_s \equiv (-gJ_{1,s} - J_{2,s}) / 2g$  和  $\delta_s \equiv (-gJ_{1,s} + J_{2,s}) / 2g$  用于进一步讨论。 $\delta_s$  的大小反映元胞内和元胞间耦合强度的差别, 从图 2.3 可以看出, 它取决于  $(m - n)$ 。因此, 多个 TIMs 耦合形成的超模式的哈密顿量可以用一个有效二聚体模型 (effective dimerized model) 来表示:

$$H = \sum_{i,s=\uparrow,\downarrow} \left( -(J_s + \delta_s) a_{i,s}^\dagger b_{i,s} - g(J_s - \delta_s) a_{i+1,s}^\dagger b_{i,s} + h.c. + (\omega_s + \Delta_s) a_{i,s}^\dagger a_{i,s} + (\omega_s - \Delta_s) b_{i,s}^\dagger b_{i,s} \right) \quad (2.5)$$

这里,  $a_{i,s}^\dagger (b_{i,s}^\dagger)$  和  $a_{i,s} (b_{i,s})$  分别是晶格点  $A_i (B_i)$  上 TIM 的产生和湮灭算符。值得注意的是, 耦合系数依赖于相邻 TIMs 波函数在空间上的交叠积分, 而薄层厚度 (不超过 20nm) 比界面之间 PC 厚度 (不小于 600nm) 小很多, 所以  $D_A$  和  $D_B$  对耦合系数的影响可以忽略不计。为了验证这一点, 我们用 COMSOL 做了一系列数值模拟, 除了薄层厚度, 其他条件设置完全相同。结果展示在图 2.5 中, 可以看出耦合系数基本不受薄层介质厚度影响。因此, 把  $\delta_s$  和  $\Delta_s$  视作两个相互独立的参数是合理的, 我们可以分别对它们进行调控。

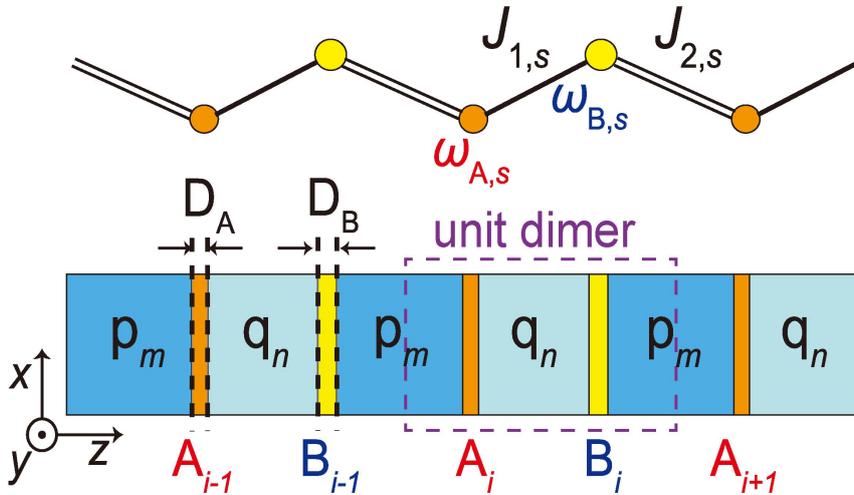


图 2.4 TIMs 构成的光子晶体超晶格系统。下部为超晶格结构示意图, 上部为对应有效二聚

体模型。

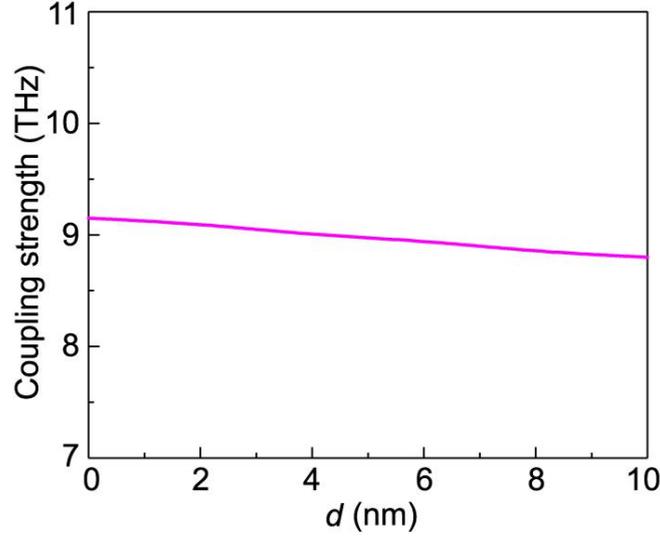


图 2.5 耦合系数随  $d$  而变化的计算结果。我们选用的结构为  $q_6 D p_6 D q_6$ ，参数设置除变量  $d$  外与图 2.3 中一致。耦合系数的值由 COMSOL 计算得到，并设置水平波矢  $k_x = 0 \mu\text{m}^{-1}$ 。这里耦合系数的变化不超过 0.2 THz，考虑到共振频率范围（550–650 THz），可以认为耦合系数与  $d$  无关。

容易看出，从式 (2.5) 得到的超晶格能带具备拓扑特性。如果我们只考虑水平波矢为零 ( $k_x = 0 \mu\text{m}^{-1}$ )，并且不考虑偏振自由度，式 (2.5) 中哈密顿既能得到一维 Su-Schrieffer-Heeger [47] (SSH-like) 型色散，也能得到一维 Rice-Mele [48] (RM-like) 型色散。前者满足  $d_A = d_B$  (即  $\Delta_s = 0$ )，而后者需要  $d_A \neq d_B$  (即  $\Delta_s \neq 0$ )。接下来分别探讨了这两种情况在我们超晶格系统中的实现和调控手段。

### A. 光学 SSH-like 色散的实现

首先考虑最经典的双带拓扑模型——SSH 模型，该模型最初用于描述一维二聚晶格中耦合的无自旋费米子系统。在我们的超晶格系统中，它的紧束缚哈密顿可以写为：

$$H = \sum_i \left( -(J_0 + \delta_0) a_i^\dagger b_i - g (J_0 - \delta_0) a_{i+1}^\dagger b_i + h.c. + \omega_0 (a_i^\dagger a_i + b_i^\dagger b_i) \right), \quad (2.6)$$

在这里，由于这里只考虑  $k_x = 0 \mu\text{m}^{-1}$  且不考虑偏振，我们略去式 (2.5) 中算符

脚标中的  $s$ ，并把  $J_s$ 、 $\delta_s$  和  $\omega_s$  分别换做  $J_0$ 、 $\delta_0$  和  $\omega_0$ 。傅里叶变换到动量空间后，得到双能带色散：

$$\omega(\xi) = \omega_0 \pm \sqrt{2(J_0^2 + \delta_0^2) + 2g(J_0^2 - \delta_0^2)\cos(\xi\Lambda)}, \quad (2.7)$$

其中  $\xi$  是超晶格系统布洛赫波矢， $\Lambda$  是超晶格元胞长度。可见，只有  $|J_0 + \delta_0| = |J_0 - \delta_0|$  ( $\delta_0 = 0$ ) 时，带隙等于零，否则带隙为  $4|\delta_0|$ 。从  $|J_0 + \delta_0| < |J_0 - \delta_0|$  平滑转变到  $|J_0 + \delta_0| > |J_0 - \delta_0|$ ，只能通过关闭和重新打开  $\delta_0 = 0$  附近的带隙来实现，反之亦然。这是  $|J_0 + \delta_0| < |J_0 - \delta_0|$  和  $|J_0 + \delta_0| > |J_0 - \delta_0|$  对应能带属于不同拓扑相的明显证据。如果采用环绕数作为  $Z_2$  拓扑不变量来判断拓扑相，前者对应  $Z_2 = 1$ ，为拓扑非平庸相；而后者对应  $Z_2 = 0$ ，为拓扑平庸相。拓扑相变点即为  $|J_0 + \delta_0| = |J_0 - \delta_0|$  ( $\delta_0 = 0$ ) 处。此外，与传统 SSH 链不同，在我们的拓扑超晶格系统中耦合系数的符号是可调的，故超模式带隙的位置可变。它完全依赖于  $g$  的值，而这是由两个耦合系数的符号所决定的。具体来说，若  $g = -1$ ，带隙位于布里渊区中心  $\xi = 0$  处；若  $g = 1$ ，带隙位于布里渊区边界  $\xi = \pm \frac{\pi}{\Lambda}$  处。

图 2.6 展示了一系列具有不同元胞的超晶格色散，对应于不同拓扑相。为方便起见，我们用结构参数  $(m, n)$  来代表周期单元为  $[p_{m/2}Dq_nDp_{m/2}]$  的光学超晶格。在图 2.6a 中，我们给出了紧束缚分析和模拟计算得到的  $(m, n) = (4, 6)$ 、 $(6, 6)$  和  $(6, 4)$  的色散结果，完美对应 SSH 色散  $\omega(\xi)$  的  $|J_0 + \delta_0| < |J_0 - \delta_0|$ 、 $|J_0 + \delta_0| = |J_0 - \delta_0|$  和  $|J_0 + \delta_0| > |J_0 - \delta_0|$  三种情况。图 2.6a 也表明这三种超晶格能带对应  $g = -1$ ，因为带隙或能带交叉点位于  $\xi = 0$ ，这是  $m$  和  $n$  同为偶数的结果。另一方面，我们看到  $(4, 6)$  和  $(6, 4)$  有着完全相同的色散，这也与式 (2.7) 吻合。然而，我们仍然可以通过研究能带带边的超模式的对称性来区分它们。由于他们的元胞  $[p_2Dq_6Dp_2]$  和  $[p_3Dq_4Dp_3]$  具有空间反演对称性，带边超模式关于它们各自的中心（即  $q_n$  的中心）是对称的或者反对称的（利用电场关于中心的对称性定义对称类型）。在图 2.6a 中，我们标出了能带带边以及能带中心超模式的对称性，因而上下能带各自的带边超模式的不同对称类型表明  $(4, 6)$  和  $(6, 4)$  确实

属于不同的拓扑相：前者为拓扑非平庸相，后者为拓扑平庸相。对称性可由 COMSOL 模拟得到，进而我们能够轻易判定不同结构的拓扑性质。另外，对于  $g=1$  的情况，我们在图 2.6b 中给出了  $(m,n)=(5,6)$  和  $(6,5)$  的色散结果，果然带隙位于布里渊区边界  $\xi = \pm \frac{\pi}{\Lambda}$ ，这是  $m$  和  $n$  一奇一偶所保证的。同样，根据图 2.6b 所示的能带色散以及带边超模式的对称类型， $(5,6)$  和  $(6,5)$  具有相同的能带结构，但属于不同的拓扑相，与我们建立的理论吻合。图 2.6 中计算和模拟的一致性有力地说明了我们的光学超晶格系统可以作为实现 SSH-like 能带的理想平台，并且具有高度的可调性。

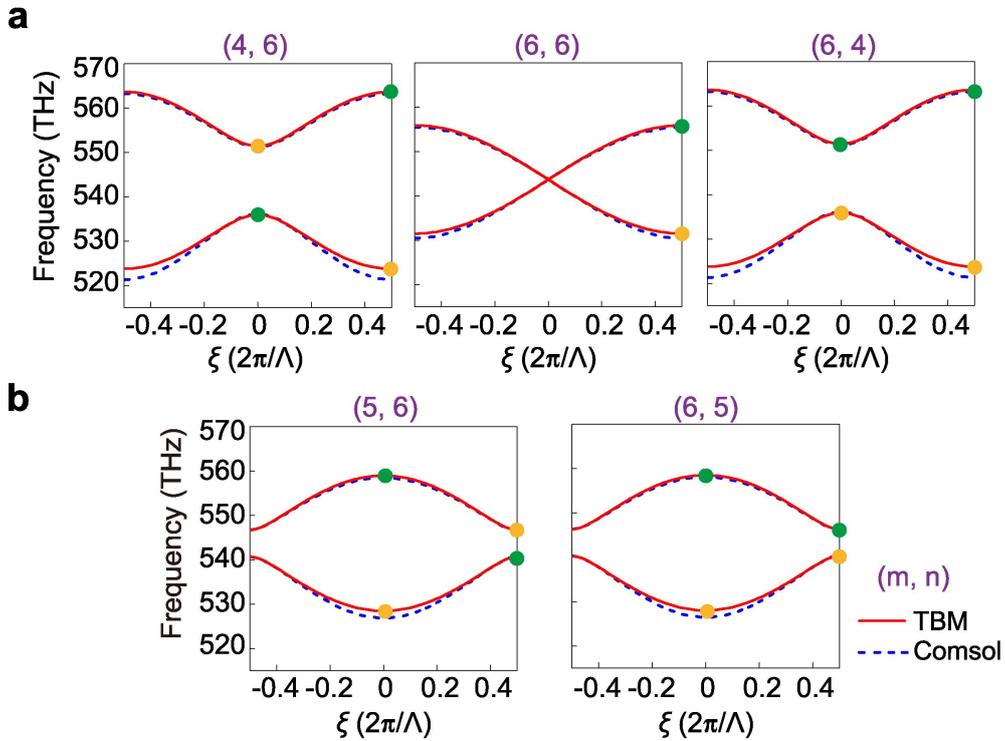


图 2.6 SSH-like 超模式的能带色散。(a) 和 (b) 分别为光子晶体超晶格元胞结构参数  $(m,n)=(4,6)$ 、 $(6,6)$  和  $(6,4)$  以及  $(m,n)=(5,6)$  和  $(6,5)$  的色散图。红色实线为有效哈密顿量计算结果，蓝色虚线为 COMSOL 模拟结果。此外，能带带边和能带中心的超模式的对称性分别用黄色(S)和绿色(AS)的圆来标记。在这里，介质材料 M1 是  $\text{Ta}_2\text{O}_5$ ，厚度  $d_1=60\text{nm}$ ；M2 是  $\text{SiO}_2$ ，厚度  $d_2=92\text{nm}$ 。两种材料在研究频段的折射率分别约为 2.23 和 1.46（色散可以忽略）。 $d=0\text{nm}$ ，相当于界面不加薄层，但跟每个界面加相同厚度薄层一样可以保证每个 TIM 共振频率相等。

## B. 光学 RM-like 色散的实现

接下来考虑用我们的超晶格系统实现 RM-like 能带，这时周期单元结构为  $[p_{m/2}D_A q_n D_B p_{m/2}]$ ，满足  $d_A \neq d_B$ 。由于我们仍然研究  $k_x = 0 \mu\text{m}^{-1}$  的情况，所以用  $\Delta_0$  代替  $\Delta_s$ ，其他符号用法与 A 中一致。因此，相应紧束缚哈密顿可以写为：

$$H = \sum_i \left( -(J_0 + \delta_0) a_i^\dagger b_i - g (J_0 - \delta_0) a_{i+1}^\dagger b_i + h.c. \right. \\ \left. + (\omega_0 + \Delta_0) a_i^\dagger a_i + (\omega_0 - \Delta_0) b_i^\dagger b_i \right) \quad (2.8)$$

经过傅里叶变换，我们得到色散方程：

$$\omega(\xi) = \omega_0 \pm \sqrt{4J_0^2 \cos^2 \frac{\xi\Lambda}{2} + 4\delta_0^2 \sin^2 \frac{\xi\Lambda}{2} + \Delta_0^2} \quad (2.9)$$

对应  $g = 1$ ，带隙在布里渊区边界  $\xi = \pm \frac{\pi}{\Lambda}$  的情况：

$$\omega(\xi) = \omega_0 \pm \sqrt{4J_0^2 \sin^2 \frac{\xi\Lambda}{2} + 4\delta_0^2 \cos^2 \frac{\xi\Lambda}{2} + \Delta_0^2} \quad (2.10)$$

对应  $g = -1$ ，带隙在布里渊区中心  $\xi = 0$  的情况。对这两种情况，带隙的大小都为  $2\sqrt{(2\delta_0)^2 + \Delta_0^2}$ 。如果  $d_A = d_B$  即  $\Delta_0 = 0$ ，则变回 SSH 能带，其能隙宽度为  $4|\delta_0|$ 。

与 A 中研究 SSH-like 能带一样，我们也计算了不同元胞的超晶格色散，如图 2.7 所示。在这里我们用  $(d_A, d_B)$ （单位为 nm）来表示缺陷层的介质厚度，依然用  $(m, n)$  来表示超晶格的 PC 周期单元数。在图 2.7 中，我们给出了紧束缚计算和 COMSOL 模拟得到的  $(d_A, d_B) = (5, 3)$ 、 $(m, n) = (6, 6)$  和  $(d_A, d_B) = (5, 3)$ 、 $(m, n) = (4, 6)$  的两种超晶格色散，可以看出计算结果与模拟结果基本一致，说明用我们的光学超晶格系统实现 RM-like 色散的手段是可行且可靠的。

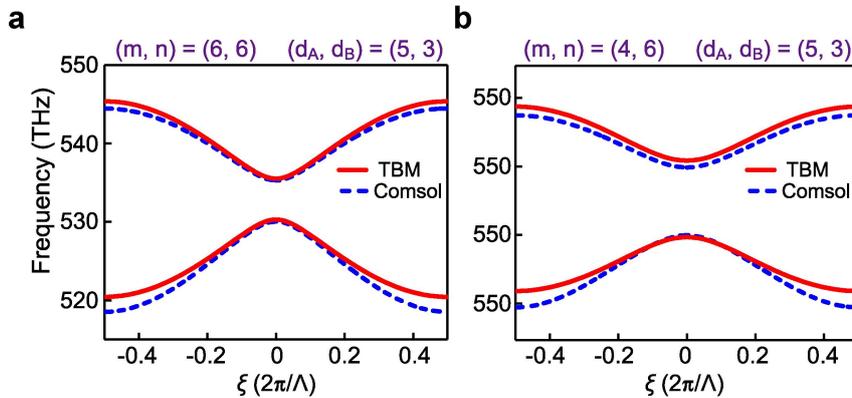


图 2.7 RM-like 超模式的能带色散。(a) 和 (b) 分别为超晶格元胞结构参数  $(m, n) = (6, 6)$  以及

$(m, n) = (4, 6)$  的色散图，且两个结构界面薄层参数都为  $(d_A, d_B) = (5, 3)$ 。红色实线为有效哈密顿量计算结果，蓝色虚线为 COMSOL 模拟结果。除了界面薄层厚度以外，材料和结构参数与图 2.6 中选用的相同。

## 2.3 合成空间中的 charge-2 狄拉克半金属及其衍生外尔半金属的实现和探测

在 2.2 中，我们构造了一维光子晶体超晶格，并讨论了能带拓扑性。在本节中，我们基于式 (2.5) 的哈密顿，详细阐述实现三维光学 charge-2 狄拉克半金属的方法以及实验探测。

考虑一般情况，TM 和 TE 偏振的 TIMs 的简并性会在  $k_x \neq 0 \mu\text{m}^{-1}$  时消除，此时  $\omega_s$  是  $k_x$  的函数，可以写为  $\omega_s(k_x) = \omega_0 + \tau_s(k_x)$ 。其中  $\omega_0 \equiv \omega_s(0)$  表示  $k_x = 0 \mu\text{m}^{-1}$  时 TIM 的本征频率， $\tau_s(k_x)$  指的是水平波矢不为零时 TIM 本征频率相对于  $\omega_0$  的偏移。由于偏振可以作为 TIM 的内禀自旋自由度，这里 TM 偏振对应自旋向上 ( $s = \uparrow$ )，而 TE 偏振对应自旋向下 ( $s = \downarrow$ )，式 (2.5) 的哈密顿量变换到布洛赫动量空间后可表示为：

$$H = \tilde{\tau} \sigma_z \otimes \sigma_0 + \begin{pmatrix} \tilde{d}_\uparrow \cdot \sigma & 0 \\ 0 & \tilde{d}_\downarrow \cdot \sigma \end{pmatrix}. \quad (2.11)$$

上式中  $(\tilde{d}_s)_x = -(J_s + \delta_s) - g(J_s - \delta_s) \cos \xi \Lambda$ ， $(\tilde{d}_s)_y = -g(J_s - \delta_s) \sin \xi \Lambda$ ， $(\tilde{d}_s)_z = \Delta_s$ ， $\tilde{\tau} = \frac{1}{2}(\tau_\uparrow(k_x) - \tau_\downarrow(k_x))$ ， $\sigma$  代表泡利矩阵。与 2.2.3 中一样， $\xi$  是  $z$  方向超晶格布洛赫波矢， $\Lambda$  是超晶格元胞长度。我们可以用  $\tilde{\omega} \equiv \omega - \overline{\omega_0}$  表示所求出的哈密顿量 (式 (2.11)) 本征值，其中  $\overline{\omega_0} = \omega_0 + \frac{1}{2}(\tau_\uparrow(k_x) + \tau_\downarrow(k_x))$ 。

对于  $k_x = 0 \mu\text{m}^{-1}$  的情况，由于  $\tilde{\tau} = 0$  并且  $\tilde{d}_\uparrow = \tilde{d}_\downarrow$ ，TM 和 TE 偏振的超模式是简并的。于是，我们引入两个参数： $\delta \equiv \delta_\uparrow = \delta_\downarrow(k_x = 0 \mu\text{m}^{-1})$  和  $\Delta \equiv \Delta_\uparrow = \Delta_\downarrow(k_x = 0 \mu\text{m}^{-1})$ ，加上超晶格原有的布洛赫波矢  $\xi$ ，构造出了一个三维合成空间

$(\delta, \xi, \Delta)$ 。此时式(2.11)的哈密顿可以写作  $H(\delta, \xi, \Delta) = (H_{\uparrow}, 0; 0, H_{\downarrow})$ ，其中  $H_{s=\uparrow,\downarrow} \equiv \tilde{d}_{s=\uparrow,\downarrow} \cdot \sigma$ 。因此，对应的四条能带会在简并点  $(\delta, \xi, \Delta) = (0, 0, 0)$  相交。为了描述该简并点的特性，接下来我们将其中的  $2 \times 2$  哈密顿  $H_s$  在简并点附近展开。注意到  $\delta = 0$  意味着元胞中  $m = n$ ，从而  $g = -1$ 。保留展开中一阶的  $\delta$ 、 $\xi$  和  $\Delta$ ，在简并点  $(0, 0, 0)$  附近有  $(\tilde{d}_s)_x = -(J_s + \delta) + (J_s - \delta) = -2\delta$ ， $(\tilde{d}_s)_y = (J_s - \delta) \cdot \xi \Lambda = -\Lambda J_s \xi$  以及  $(\tilde{d}_s)_z = \Delta$ 。因而， $H_s$  可以展开为：

$$H_s = \delta v_{\delta x, s} \sigma_x + \xi v_{\xi y, s} \sigma_y + \Delta v_{\Delta z, s} \sigma_z, \quad (2.12)$$

式中  $v_{\delta x, s} = -2$ ， $v_{\xi y, s} = \Lambda J_s$ ， $v_{\Delta z, s} = 1$ 。式(2.12)是标准的外尔半金属哈密顿，故 TM 偏振或者 TE 偏振的超模式能带简并点可以视作合成空间中的 WP。WP 的一个重要性质是携带拓扑荷  $c_s$  ( $= \pm 1$ )，拓扑荷的值取决于它的手性。对于标准的外尔哈密顿  $H(q) = q_i v_{ij} \sigma_j$ ， $c_s = \text{sgn}(\det[v_{ij, s}])$ 。所以由式(2.12)， $c_s = -\text{sgn}(J_s)$ ，即 WP 的拓扑荷由  $J_s$  的符号决定。由于 TM 和 TE 偏振的超模式能带在  $k_x = 0 \mu\text{m}^{-1}$  时是简并的，式(2.11)也就对应合成空间中具有相同拓扑荷的两个 WPs 哈密顿的重叠。如图 2.8a 所示，该四能带结构在  $\xi = 0$  下的  $\delta - \Delta$  空间中用一个透明的蓝色锥体描绘，在  $(\delta, \xi, \Delta) = (0, 0, 0)$  处相交，这种类型的能带简并点被称 charge-2 狄拉克点 (CDP)，其哈密顿量是布里渊区中心两个相同自旋 WPs 的直接相加，因此具有  $c = \sum_s c_s = \pm 2$  的陈数，与由两个陈数互为相反数的 WPs 重叠而成的传统三维 DP (陈数为 0) 不同。我们把  $(\delta, \Delta) = (0, 0)$  面的能带色散(图 2.8a 中黑色实线)画在图 2.8b 中，以展示简并点附近色散的线性特性。综上，我们利用合成空间在一维光子晶体拓扑超晶格中首次实现了可见光频域的 charge-2 狄拉克半金属。

通过实验，我们直接探测了这种能带结构，验证了上述理论结果。首先我们制作了五个样品，结构参数分别为  $(m, n) = (4, 4)$ 、 $(4, 6)$ 、 $(4, 8)$ 、 $(6, 4)$  和  $(8, 4)$ ，并且都满足  $d_A = d_B$  即  $\Delta = 0$ 。接着我们测量了这五个样品在垂直入射下的透射谱，以得到  $\tilde{\omega}$ 。图 2.8c 展示了样品  $(m, n) = (6, 4)$  在不同  $\Delta f$  下(以  $\overline{\omega_0}$  为参考)的透射谱，其中黑色虚线用来标记超模式能带带边。在图 2.8a 和图 2.8b 中，我们使用黑色

正方形来标记这些带边的位置，这些带边几乎位于线性能带交叉线上，这与理论吻合。通过透射谱得到的另外四个样品的  $\tilde{\omega}$  的位置也在图 2.8a 和图 2.8b 中用不同点绘制出来，它们都位于线性能带上，因而体现出了 charge-2 狄拉克半金属的线性色散特性，与理论相符。此外，我们制作了另外两个样品  $(m, n)=(4, 6)$  和  $(6, 4)$ ，但  $d_A \neq d_B$  所以  $\Delta \neq 0$ 。从透射实验得到的结果也展示在图 2.8c 中，可见它们都位于蓝色锥体表面附近。由此可见，实验结果验证了我们关于 CDP 的理论，实现了可见光频域的 CDP。

当水平波矢  $k_x \neq 0 \mu\text{m}^{-1}$  时，TM 和 TE 偏振超模式的简并会消除，导致  $\tilde{\tau} \neq 0$  以及  $\tilde{d}_\uparrow \neq \tilde{d}_\downarrow$ 。因此，在非零  $k_x$  的情况下，原本  $k_x = 0 \mu\text{m}^{-1}$  下的 CDP 会劈裂成两个 WPs，分别对应 TM 和 TE 偏振的超模式能带。图 2.8d 中的两个曲面即为理论计算得到的  $\xi = 0$  时  $\delta - \Delta$  空间中的两个外尔半金属能带，这里选取  $k_x = 6 \mu\text{m}^{-1}$ 。而在图 2.8e 中，我们用红色和蓝色实线分别描绘了 TM 和 TE 偏振超模式在  $(\delta, \Delta) = (0, 0)$  面上的色散。实验上，我们测量了图 2.8a 中相应的七个样品在不同偏振斜入射光下的透射谱。我们将  $(m, n)=(4, 6)$  且  $d_A = d_B$  样品的结果展示在图 2.8c 中，并用红色和蓝色垂线来分别强调 TM 和 TE 偏振的超模式带边位置。可以看到，TE (TM) 偏振的带边红移(蓝移)，这与图 2.8d 中的理论结果一致。在图 2.8d 和图 2.8e 中，我们进一步用红线 (TM) 和蓝线 (TE) 标记了所有样本相应  $\tilde{\omega}$  的位置，可看出理论与实验的一致性。因此，我们验证了在合成空间中由于  $k_x \neq 0 \mu\text{m}^{-1}$ ，CDP 劈裂衍生出两个 WPs。值得注意的是，两个 WPs 之间的频率差为  $2\tilde{\tau}$ ，它可以被视作有效“赛曼项”，随着“磁场”的增强（即  $k_x$  的增大）而增大。这使得我们可以在合成空间灵活调控衍生外尔半金属的能带位置。

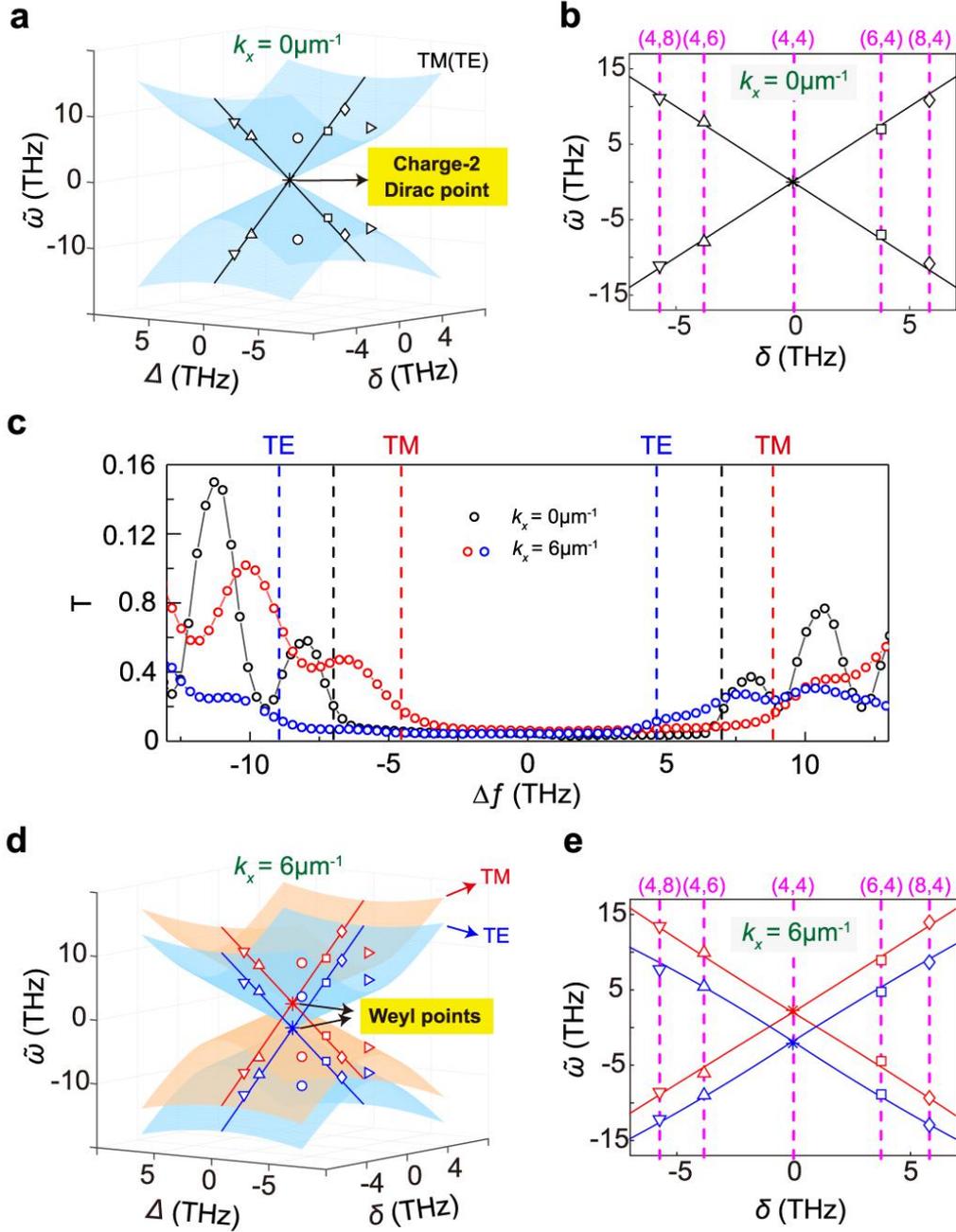


图 2.8 合成空间中光学 charge-2 狄拉克半金属及其衍生外尔半金属的实现和探测。(a) 和 (d) 分别描绘了超模式在  $k_x = 0\mu\text{m}^{-1}$  和  $k_x = 6\mu\text{m}^{-1}$  的  $\delta - \Delta$  空间 ( $\xi = 0$ ) 中本征频率面, 其中黑色实线对应  $\Delta = 0$ 。向上三角形、向下三角形、正方形和菱形分别标出了  $(m, n) = (4, 6)$ 、 $(4, 8)$ 、 $(6, 4)$  和  $(8, 4)$  四个样品的实验数据所得到的能带带边位置。星号标出了能带中心位置, 是通过提取样品  $(m, n) = (4, 4)$  透射谱的带中心频率获得 (此时无带隙)。五个样品的界面薄层介质厚度  $(d_A, d_B) = (0, 0)$  (以 nm 为单位), 在合成空间中的坐标  $(\delta, \xi, \Delta)$  为  $(0, 0, 0)$ 、 $(-3.8, 0, 0)$ 、 $(-5.7, 0, 0)$ 、 $(3.8, 0, 0)$  和  $(5.7, 0, 0)$  (以  $(\text{THz}, \mu\text{m}^{-1}, \text{THz})$  为单位)。此外, 空心

圆和向右三角形指出了另外两个样品  $(m, n) = (4, 6)$  和  $(6, 4)$  且都有  $(d_A, d_B) = (3, 0)$  的能带带边测量频率，坐标分别是  $(\delta, \xi, \Delta) = (-3.8, 0, -4.1)$  和  $(3.8, 0, -4.1)$ 。(c)  $(m, n) = (6, 4)$  且  $(d_A, d_B) = (0, 0)$  (即  $(\delta, \xi, \Delta) = (3.8, 0, 0)$ ) 样品在垂直入射 ( $k_x = 0 \mu\text{m}^{-1}$ ) 和 TM/TE 偏振斜入射 ( $k_x = 6 \mu\text{m}^{-1}$ ) 下的透射谱。(b) 和 (c) 分别展现了  $\xi = 0$  且  $\Delta = 0$  时超模式在  $k_x = 0 \mu\text{m}^{-1}$  和  $k_x = 6 \mu\text{m}^{-1}$  的本征频率。实线是有效哈密顿计算的能带色散，空心图形为实验结果 (对应样品参数标记在顶部)。

在本节的最后，我们想要说明该超晶格平台可以用来灵活实现  $c_s = 2$  或  $c_s = -2$  的 CDP，以及其劈裂成的两个 WPs 的拓扑荷不会由于  $k_x \neq 0 \mu\text{m}^{-1}$  而变。考虑到  $k_x = 0 \mu\text{m}^{-1}$  时简并点满足  $\delta = 0$ ，因而  $m = n$  所以  $m$  和  $n$  必须奇偶性相同。根据图 2.3 中计算结果， $m(n)$  为奇数会使得元胞间 (内) 的耦合系数  $J_{2,s} < 0$  ( $J_{1,s} > 0$ )，而  $m(n)$  为偶数会使得元胞间 (内) 的耦合系数  $J_{2,s} > 0$  ( $J_{1,s} < 0$ )。于是， $J_s \equiv (-gJ_{1,s} - J_{2,s}) / 2g = J_{2,s} - J_{1,s}$  在奇数情况下为负而在偶数情况下为正。因而，我们可以得出结论： $m(n)$  的奇偶性决定了  $J_s$  的正负，进而决定了相应 WP 的拓扑荷  $c_s = -\text{sgn}(J_s)$ 。而  $k_x = 0 \mu\text{m}^{-1}$  时  $c_\uparrow = c_\downarrow$ ，所以四重简并点 CDP 对应两个相同拓扑荷的 WPs 的叠加，由上述可知若  $m(n)$  为奇数，CDP 的拓扑荷  $c = \sum_s c_s = +2$ ，若  $m(n)$  为偶数，CDP 的拓扑荷  $c = \sum_s c_s = -2$ 。在图 2.9a 中我们作出了不同的  $m(n)$  值的 CDP 拓扑荷大小。我们的实验中简并点对应样品的  $m(n)$  为 4，故 CDP 拓扑荷为  $-2$ 。然而通过上述分析，我们可以控制  $m(n)$  的奇偶性来灵活实现不同拓扑荷的 CDP。当  $k_x \neq 0 \mu\text{m}^{-1}$  时，TM 和 TE 偏振的简并消除，对应超模式能带形状会随着  $k_x$  的变化而变 (但保持线性)。然而计算表明，改变  $k_x$  的值不会对  $J_s$  的正负产生影响，从而 WPs 的拓扑荷不会发生改变。在图 2.9b 中我们给出了  $m = n = 4$  且  $d_A = d_B = 0$  时  $J_s$  的大小，验证了当  $k_x$  变化时  $c_\uparrow = c_\downarrow$  保持不变的结论。

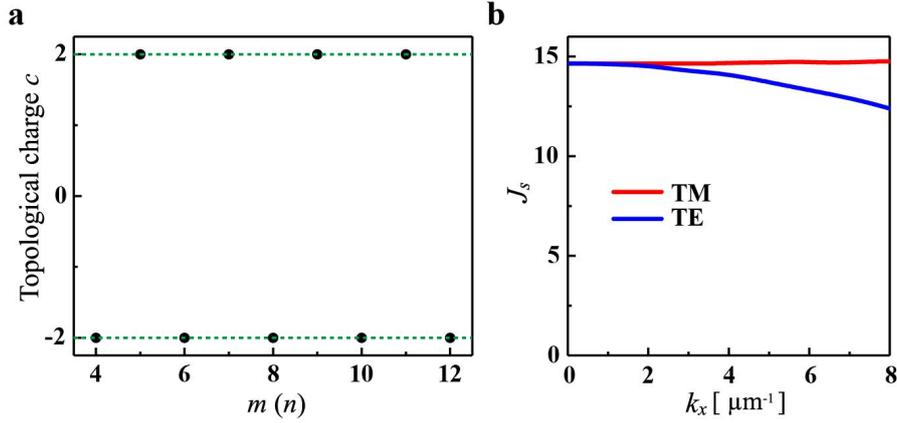


图 2.9 拓扑荷的确定。(a) CDP 拓扑荷与  $m(n)$  的关系。(b) TM 和 TE 偏振下  $J_s$  (以 THz 为单位) 随水平波矢  $k_x$  的变化规律, 由 COMSOL 计算得到。b 中选取的超晶格参数为  $(m, n) = (4, 4)$  且  $(d_A, d_B) = (0, 0)$  (和图 2.8 中相应样品材料和结构一样)。可见, 增大水平波矢依然无法改变  $J_s$  的符号, 进而无法改变拓扑荷的值。

## 2.4 拓扑边界态的调控

与传统的因净拓扑荷为零而缺乏拓扑表面态的三维 DPs 不同, 我们系统中 CDP 的陈数等于  $\pm 2$ , 意味着在有限的超晶格端面存在着新奇的拓扑边界态 (topological boundary states)。它们拓扑保护的存在是由两个 WPs 的体边关系 (bulk-edge correspondence) 所保证的, 这是 WPs 最重要的特性之一。在我们的合成空间中, 由于存在 TM 和 TE 偏振两种超模式, 这些拓扑保护模式可以分为两组, 每一组都可以在不同的偏振下独立调控。接下来, 我们从理论和实验上展示了它们在有限超晶格系统中的存在和可调性。有限超晶格系统的结构可以用  $p_s [p_{m/2} D_A q_n D_B p_{m/2}]_5 p_s$  表示, 由 5 个周期单元沿  $z$  轴方向堆叠, 并在两端额外加了  $s$  个  $p$  型 PC 单元, 以避免与外部环境发生相互作用。需要说明的是, 存在拓扑保护边界态的超晶格必须满足元胞内耦合系数大小小于元胞间耦合系数大小, 而与  $\Delta$  无关: 如果  $\Delta \neq 0$ , 则对于任意偏振都存在两个非简并的边界态, 如果  $\Delta = 0$ , 这两个边界态是简并的。图 2.10a 描绘了一个特定超晶格样品, 其结构  $(m, n, s) = (4, 6, 5)$  且  $d_A \neq d_B$ , 因而  $\delta < 0$  且  $\Delta \neq 0$ , 满足对于任一偏振存在两个非

简并边界态的条件。样品底部衬底由  $\text{SiO}_2$  构成。我们将从样品前部(底部)入射的光记为  $F(B)$ 。无论  $\Delta$  的值为多少, 拓扑边界态都应该成对出现, 但正是  $\Delta$  决定了这两个态在合成空间中的位置, 如图 2. 10b 和 2. 10c 所示。为了说明这一点, 在图 2. 10d 中, 我们在  $\delta$ - $\Delta$  空间中 (不失一般性, 这里  $k_x = 6\mu\text{m}^{-1}$ ) 描绘了理论上 TM 和 TE 偏振超模式对应的外尔半金属能带面和拓扑边界态对应曲面。其中, 紫色平面上的拓扑边界态只能被  $F$  激发, 能量局域在有限超晶格的前端; 而橙色平面上的拓扑边界态只能被  $B$  激发, 局域在有限超晶格的底部。前者的频率为  $\tilde{\omega} = \pm\tilde{\tau} + \Delta$ , 而后者的频率  $\tilde{\omega} = \pm\tilde{\tau} - \Delta$ , 两个等式中第一个正(负)号适用于 TM (TE) 偏振模式。值得注意的是, 面交线对应的拓扑边界态与 WPs 相连, 它们与传统外尔半金属中的费米弧表面态 [1, 3, 6] 具有相同的数学来源。我们用洋红色的虚线将它们在合成空间中标出, 满足  $\Delta = 0$  且  $\tilde{\omega} = \pm\tilde{\tau}$ , 因此它们既可以被  $F$  也可以被  $B$  激发。然而, 在此必须强调的是, 传统的费米弧连接周期性晶格中的两个 WPs, 而我们系统中的类费米弧 (Fermi-arc-like) 拓扑边界态将 WP 连接到合成空间边界 (净拓扑荷不为零所致)。

图 2. 10b 展示了图 2. 10a 中所示样品的反射谱, 由 TM 和 TE 两种偏振的  $F$  和  $B$  以  $30^\circ$  的斜入射角所激发, 我们在超模式能带带隙中观察到了四个低谷。这些模式被分别标记为 1 到 4, 其电场强度分布如图 2. 10a 所示。注意到, 对于 TM 和 TE 两种偏振的超模式,  $F$  (1 和 3) 和  $B$  (2 和 4) 激发的拓扑边界态分别位于样品的前端和底部。我们研究了另一个超晶格样品, 其结构参数  $(m, n, s) = (4, 6, 5)$  且  $d_A = d_B$ , 从而  $\delta < 0$  且  $\Delta = 0$ 。图 2. 10c 分别给出了 TM 和 TE 偏振  $F$  以  $30^\circ$  角斜入射所获得的反射谱, 其中超模式能带带隙中的每一个低谷都对应两个简并的拓扑边界态, 每个拓扑边界态的场都局域在样品的两端。在图 2. 10b 和图 2. 10c 中, 透明灰色区域对应  $q$  型 PC 和  $q$  型 PC 共同的体能带, 而由向下和向上倾斜的线标出的灰色区域分别代表 TM 和 TE 偏振的超模式能带。此外, 由于引入非零水平波矢消除了其等于零时 TM 和 TE 偏振下拓扑边界态的简并性, 故每个简并模式分裂成两个态, 且它们之间的劈裂随着  $k_x$  的增加迅速增大。如图 2. 10e 所示, 我们展示了图 2. 10a 中样品拓扑边界态频率随  $k_x$  的变化图像。图 2. 10f 和图 2. 10g 画出了不同  $\Delta$  平面内的投影能带, 并将拓扑边界态的本征频率面投影为虚线, 然后把上述测量边界态的位置标在了相应的平面上。由此可见, 理论计算与实验结

果基本一致,进一步证实我们构造的有限光学超晶格结构存在高度可调的拓扑边界态。

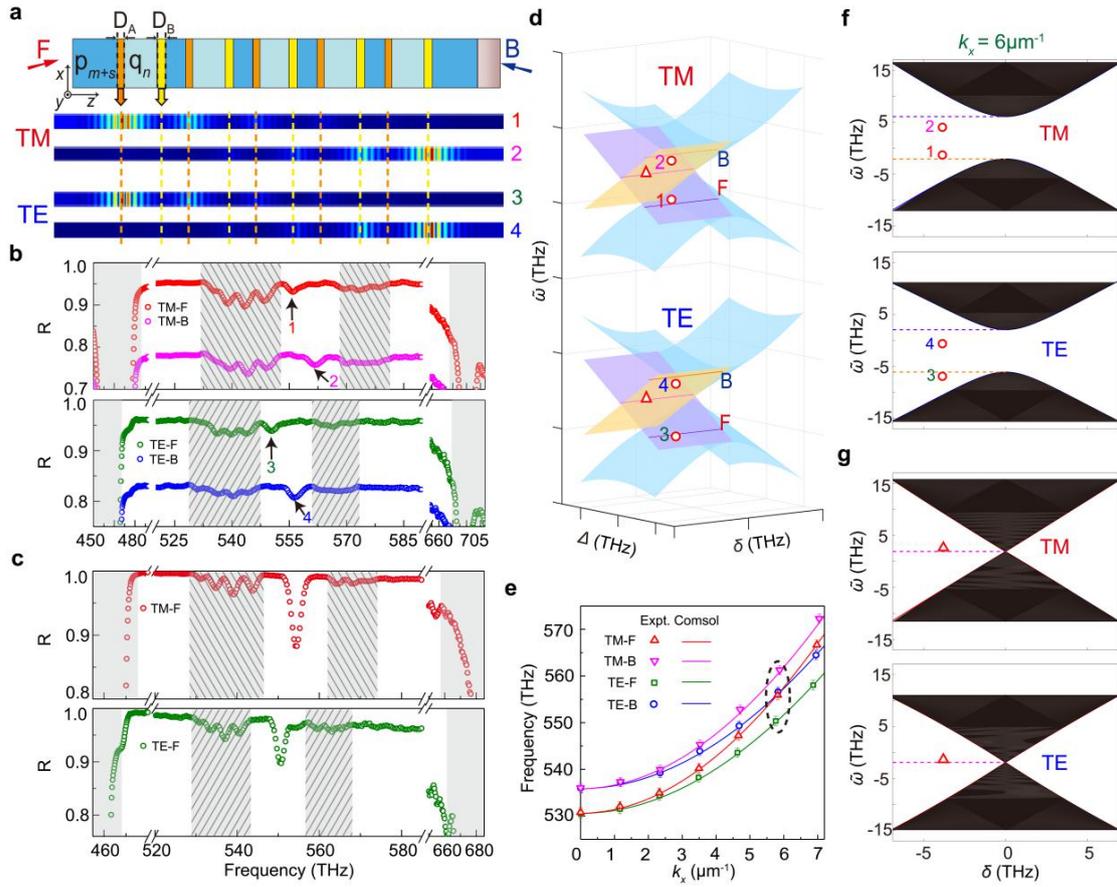


图 2.10 有限超晶格中的拓扑边界态。(a) (上部)有限超晶格  $p_5[p_2D_Aq_6D_Bp_2]_5p_5$  的结构示意图, 这里,  $(d_A, d_B) = (3, 0)$  (以 nm 为单位) 所以  $(\delta, \xi, \Delta) = (-3.8, 0, -4.1)$  (以  $(\text{THz}, \mu\text{m}^{-1}, \text{THz})$  为单位)。(下部)拓扑边界态 1 到 4 的电场分布。(b) TM 和 TE 两种偏振的 F 和 B 以  $30^\circ$  角斜入射到(a)中样品时的反射谱, 其中黑色箭头所指的四个低谷对应拓扑边界态 1 到 4。(c) TM 和 TE 偏振的 F 以  $30^\circ$  角斜入射到另一样品  $p_5[p_2D_Aq_6D_Bp_2]_5p_5$  时的测量反射谱, 此时  $((d_A, d_B) = (0, 0))$  所以  $(\delta, \xi, \Delta) = (-3.8, 0, 0)$ 。(d)  $\delta - \Delta$  空间 ( $\xi = 0$ ,  $k_x = 6\mu\text{m}^{-1}$ ) 中 TM 和 TE 偏振所对应的 WPs(透明蓝色锥体)和拓扑边界态(紫色和橙色平面)的本征频率面。(b)和(c)中的测量低谷位置分别用空心圆和向上三角形标记在(d)中, 并且为了清楚展示, 两个 WPs 之间的垂直距离被故意放大。(e) (a)和(b)中样品的拓扑边界态频率随  $k_x$  的变化图。实线是数值计算的结果, 空心图形位置是直接来自实验数据得到的, 误差条展示了实验误差范围。(b)中所示的拓扑边界态 1 到 4 被黑色虚线椭圆所围。(f, g)  $\Delta = -4.1$  和  $\Delta = 0$  时 TM 及 TE 偏振对应拓扑边界态的本征频率面。(f)和(g)中的黑色区域表示超模式投影能带, 而(d, f, g)中的虚线用来表示计算得到的拓扑边界态色散。

## 2.5 本章小结

在本章中，我们首先通过设计一维光子晶体超晶格，第一次实现了光频的三维 charge-2 狄拉克半金属。具体来说，我们交替堆叠了两种拓扑性质不同的一维 PCs 而得到了超晶格结构。因而，在每个 PC 界面处都存在拓扑界面模式 (TIM)，它们作为“人工光子轨道”，彼此杂化耦合形成集体模式 (即 super-modes, 超模式)，得到全新的人工拓扑超晶格能带。在这个系统中，TIM 的共振频率可以通过调整界面介质层厚度轻易调节，相邻两个 TIMs 的耦合系数 (包括强度和符号) 可以由改变 PC 的周期数灵活调控。因此，我们巧妙地引入与 TIM 共振频率和耦合系数相关的两个合成维度，在一维超晶格实现了高度可调的三维拓扑能带，大大降低了实验难度并带来新的效应。进一步考虑光子的偏振特性，每个光子轨道都存在 TE 和 TM 两种模式，所以还具备自旋自由度。于是，不同自旋的拓扑能带可以由不同偏振的入射光来激发，并通过透射谱直接进行观测。当入射角为零度时，水平波矢为零，TE 和 TM 模式简并，它们各自对应相同拓扑荷的外尔半金属，在合成空间重叠而构成了 charge-2 狄拉克半金属；当入射角度逐渐增大，水平波矢不再为零，TE 和 TM 模式简并解除导致对应外尔点 (WP) 在合成空间相互分离。这种简并解除类似电子系统中的塞曼效应，其中水平波矢充当了有效磁场，而通过对不同偏振入射角的控制实现了对衍生 WPs 的任意调控。

另一方面，charge-2 狄拉克点 (CDPs) 拓扑荷不为零的特性保证了有限超晶格系统中的拓扑边界态的存在。每个偏振下的拓扑边界态都可以分成两组，分别位于合成空间的两个相交平面。在本章中，我们利用不同入射方向的两种偏振光，激发并通过反射谱观测到了位于不同平面的拓扑边界态。由于该超晶格系统中的拓扑边界态依赖于偏振模式、入射角大小以及入射方向，进而可以用来实现局域场增强 [49, 50]，很有利于实际应用。

本章的结果表明光子晶体超晶格系统可作为实现各种拓扑效应的良好平台，它不仅可以实现光学 charge-2 狄拉克半金属，也已被证明能实现 SSH、RM 等等拓扑模型。接下来，如果利用损耗材料或者非线性折射率材料来构造超晶格系统，可以进一步去探索非厄米 [51-56] 或非线性 [57, 58] 等拓扑现象。

## 参考文献

- [1] Wan, X. G., Turner, A. M., Vishwanath, A., Savrasov, S. Y. Topological semimetal and Fermi-arc surface states in the electronic structure of pyrochlore iridates. *Physical Review B*, **83** 205101(2011).
- [2] Lv, B. Q., Weng, H. M., Fu, B. B., Wang, X. P., Miao, H., Ma, J., *et al.* Experimental Discovery of Weyl Semimetal TaAs. *Physical Review X*, **5** 031013(2015).
- [3] Xu, S. Y., Belopolski, I., Alidoust, N., Neupane, M., Bian, G., Zhang, C. L., *et al.* Discovery of a Weyl fermion semimetal and topological Fermi arcs. *Science*, **349** 613(2015).
- [4] Lu, L., Wang, Z. Y., Ye, D. X., Ran, L. X., Fu, L., Joannopoulos, J. D., *et al.* Experimental observation of Weyl points. *Science*, **349** 622(2015).
- [5] Soluyanov, A. A., Gresch, D., Wang, Z. J., Wu, Q. S., Troyer, M., Dai, X., *et al.* Type-II Weyl semimetals. *Nature*, **527** 495(2015).
- [6] Deng, K., Wan, G. L., Deng, P., Zhang, K. N., Ding, S. J., Wang, E. Y., *et al.* Experimental observation of topological Fermi arcs in type-II Weyl semimetal MoTe<sub>2</sub>. *Nature Physics*, **12** 1105(2016).
- [7] Liu, Z. K., Zhou, B., Zhang, Y., Wang, Z. J., Weng, H. M., Prabhakaran, D., *et al.* Discovery of a Three-Dimensional Topological Dirac Semimetal, Na<sub>3</sub>Bi. *Science*, **343** 864(2014).
- [8] Xu, S. Y., Alidoust, N., Belopolski, I., Yuan, Z. J., Bian, G., Chang, T. R., *et al.* Discovery of a Weyl fermion state with Fermi arcs in niobium arsenide. *Nature Physics*, **11** 748(2015).
- [9] Fang, C., Gilbert, M. J., Dai, X., Bernevig, B. A. Multi-Weyl Topological Semimetals Stabilized by Point Group Symmetry. *Physical Review Letters*, **108** 266802(2012).
- [10] Bradlyn, B., Cano, J., Wang, Z. J., Vergniory, M. G., Felser, C., Cava, R. J., *et al.* Beyond Dirac and Weyl fermions: Unconventional quasiparticles in conventional crystals. *Science*, **353** (2016).
- [11] Tang, P. Z., Zhou, Q., Zhang, S. C. Multiple Types of Topological Fermions in Transition Metal Silicides. *Physical Review Letters*, **119** 206402(2017).
- [12] Lv, B. Q., Feng, Z. L., Xu, Q. N., Gao, X., Ma, J. Z., Kong, L. Y., *et al.*

Observation of three-component fermions in the topological semimetal molybdenum phosphide. *Nature*, **546** 627(2017).

[13] Zhang, T. T., Song, Z. D., Alexandradinata, A., Weng, H. M., Fang, C., Lu, L., *et al.* Double-Weyl Phonons in Transition-Metal Monosilicides. *Physical Review Letters*, **120** 016401(2018).

[14] Miao, H., Zhang, T. T., Wang, L., Meyers, D., Said, A. H., Wang, Y. L., *et al.* Observation of Double Weyl Phonons in Parity-Breaking FeSi. *Physical Review Letters*, **121** 035302(2018).

[15] Sanchez, D. S., Belopolski, I., Cochran, T. A., Xu, X. T., Yin, J. X., Chang, G. Q., *et al.* Topological chiral crystals with helicoid-arc quantum states. *Nature*, **567** 500(2019).

[16] Schroter, N. B. M., Pei, D., Vergniory, M. G., Sun, Y., Manna, K., De Juan, F., *et al.* Chiral topological semimetal with multifold band crossings and long Fermi arcs. *Nature Physics*, **15** 759(2019).

[17] Rao, Z. C., Li, H., Zhang, T. T., Tian, S. J., Li, C. H., Fu, B. B., *et al.* Observation of unconventional chiral fermions with long Fermi arcs in CoSi. *Nature*, **567** 496(2019).

[18] Dubcek, T., Kennedy, C. J., Lu, L., Ketterle, W., Soljacic, M., Buljan, H. Weyl Points in Three-Dimensional Optical Lattices: Synthetic Magnetic Monopoles in Momentum Space. *Physical Review Letters*, **114** 225301(2015).

[19] Xu, Y., Zhang, F., Zhang, C. W. Structured Weyl Points in Spin-Orbit Coupled Fermionic Superfluids. *Physical Review Letters*, **115** 265304(2015).

[20] Xiao, M., Lin, Q., Fan, S. H. Hyperbolic Weyl Point in Reciprocal Chiral Metamaterials. *Physical Review Letters*, **117** 057401(2016).

[21] Chen, W. J., Xiao, M., Chan, C. T. Photonic crystals possessing multiple Weyl points and the experimental observation of robust surface states. *Nature Communications*, **7** 13038(2016).

[22] Noh, J., Huang, S., Leykam, D., Chong, Y. D., Chen, K. P., Rechtsman, M. C. Experimental observation of optical Weyl points and Fermi arc-like surface states. *Nature Physics*, **13** 611(2017).

[23] Yang, B., Guo, Q. H., Tremain, B., Liu, R. J., Barr, L. E., Yan, Q. H., *et al.* Ideal Weyl points and helicoid surface states in artificial photonic crystal structures. *Science*, **359** 1013(2018).

[24] Saba, M., Hamm, J. M., Baumberg, J. J., Hess, O. Group Theoretical Route to

- Deterministic Weyl Points in Chiral Photonic Lattices. *Physical Review Letters*, **119** 227401(2017).
- [25] Wang, Q., Xiao, M., Liu, H., Zhu, S. N., Chan, C. T. Optical Interface States Protected by Synthetic Weyl Points. *Physical Review X*, **7** 031032(2017).
- [26] Xiao, M., Chen, W. J., He, W. Y., Chan, C. T. Synthetic gauge flux and Weyl points in acoustic systems. *Nature Physics*, **11** 920(2015).
- [27] Yang, Z. J., Zhang, B. L. Acoustic Type-II Weyl Nodes from Stacking Dimerized Chains. *Physical Review Letters*, **117** 224301(2016).
- [28] He, H. L., Qiu, C. Y., Ye, L. P., Cai, X. X., Fan, X. Y., Ke, M. Z., *et al.* Topological negative refraction of surface acoustic waves in a Weyl phononic crystal. *Nature*, **560** 61(2018).
- [29] Fan, X. Y., Qiu, C. Y., Shen, Y. Y., He, H. L., Xiao, M., Ke, M. Z., *et al.* Probing Weyl Physics with One-Dimensional Sonic Crystals. *Physical Review Letters*, **122** 136802(2019).
- [30] Roushan, P., Neill, C., Chen, Y., Kolodrubetz, M., Quintana, C., Leung, N., *et al.* Observation of topological transitions in interacting quantum circuits. *Nature*, **515** 241(2014).
- [31] Schroer, M. D., Kolodrubetz, M. H., Kindel, W. F., Sandberg, M., Gao, J., Vissers, M. R., *et al.* Measuring a Topological Transition in an Artificial Spin-1/2 System. *Physical Review Letters*, **113** 050402(2014).
- [32] Riwar, R. P., Houzet, M., Meyer, J. S., Nazarov, Y. V. Multi-terminal Josephson junctions as topological matter. *Nature Communications*, **7** 11167(2016).
- [33] Yuan, L. Q., Lin, Q., Xiao, M., Fan, S. H. Synthetic dimension in photonics. *Optica*, **5** 1396(2018).
- [34] Dutt, A., Lin, Q., Yuan, L. Q., Minkov, M., Xiao, M., Fan, S. H. A single photonic cavity with two independent physical synthetic dimensions. *Science*, **367** 59(2020).
- [35] Mei, F., Xue, Z. Y., Zhang, D. W., Tian, L., Lee, C. H., Zhu, S. L. Witnessing topological Weyl semimetal phase in a minimal circuit-QED lattice. *Quantum Science and Technology*, **1** 015006(2016).
- [36] Lin, Q., Xiao, M., Yuan, L. Q., Fan, S. H. Photonic Weyl point in a two-dimensional resonator lattice with a synthetic frequency dimension. *Nature Communications*, **7** 03731(2016).
- [37] Yang, Y. H., Sun, H. X., Xia, J. P., Xue, H. R., Gao, Z., Ge, Y., *et al.* Topological

- triply degenerate point with double Fermi arcs. *Nature Physics*, **15** 645(2019).
- [38] Yablonovitch, E. Inhibited Spontaneous Emission in Solid-State Physics and Electronics. *Physical Review Letters*, **58** 2059(1987).
- [39] John, S. Strong Localization of Photons in Certain Disordered Dielectric Superlattices. *Physical Review Letters*, **58** 2486(1987).
- [40] Bradlyn, B., Elcoro, L., Cano, J., Vergniory, M. G., Wang, Z. J., Felser, C., *et al.* Topological quantum chemistry. *Nature*, **547** 298(2017).
- [41] Mourik, V., Zuo, K., Frolov, S. M., Plissard, S. R., Bakkers, E. P. A. M., Kouwenhoven, L. P. Signatures of Majorana Fermions in Hybrid Superconductor-Semiconductor Nanowire Devices. *Science*, **336** 1003(2012).
- [42] Groning, O., Wang, S. Y., Yao, X. L., Pignedoli, C. A., Barin, G. B., Daniels, C., *et al.* Engineering of robust topological quantum phases in graphene nanoribbons. *Nature*, **560** 209(2018).
- [43] Rizzo, D. J., Veber, G., Cao, T., Bronner, C., Chen, T., Zhao, F. Z., *et al.* Topological band engineering of graphene nanoribbons. *Nature*, **560** 204(2018).
- [44] Belopolski, I., Xu, S. Y., Koirala, N., Liu, C., Bian, G., Strocov, V. N., *et al.* A novel artificial condensed matter lattice and a new platform for one-dimensional topological phases. *Science Advances*, **3** e1501692(2017).
- [45] Xiao, M., Zhang, Z. Q., Chan, C. T. Surface Impedance and Bulk Band Geometric Phases in One-Dimensional Systems. *Physical Review X*, **4** 031005(2014).
- [46] Choi, K. H., Ling, C. W., Lee, K. F., Tsang, Y. H., Fung, K. H. Simultaneous multi-frequency topological edge modes between one-dimensional photonic crystals. *Optics Letters*, **41** 1644(2016).
- [47] Su, W. P., Schrieffer, J. R., Heeger, A. J. Solitons in Polyacetylene. *Physical Review Letters*, **42** 1698(1979).
- [48] Rice, M. J., Mele, E. J. Elementary Excitations of a Linearly Conjugated Diatomic Polymer. *Physical Review Letters*, **49** 1455(1982).
- [49] Gazzano, O., de Vasconcellos, S. M., Gauthron, K., Symonds, C., Voisin, P., Bellessa, J., *et al.* Single photon source using confined Tamm plasmon modes. *Applied Physics Letters*, **100** 232111(2012).
- [50] Chen, Y. K., Zhang, D. G., Qiu, D., Zhu, L. F., Yu, S. S., Yao, P. J., *et al.* Back focal plane imaging of Tamm plasmons and their coupled emission. *Laser & Photonics Reviews*, **8** 933(2014).
- [51] Feng, L., Wong, Z. J., Ma, R. M., Wang, Y., Zhang, X. Single-mode laser by

- parity-time symmetry breaking. *Science*, **346** 972(2014).
- [52] Zeuner, J. M., Rechtsman, M. C., Plotnik, Y., Lumer, Y., Nolte, S., Rudner, M. S., *et al.* Observation of a Topological Transition in the Bulk of a Non-Hermitian System. *Physical Review Letters*, **115** 040402(2015).
- [53] Ding, K., Ma, G. C., Xiao, M., Zhang, Z. Q., Chan, C. T. Emergence, Coalescence, and Topological Properties of Multiple Exceptional Points and Their Experimental Realization. *Physical Review X*, **6** 021007(2016).
- [54] Shen, H. T., Zhen, B., Fu, L. Topological Band Theory for Non-Hermitian Hamiltonians. *Physical Review Letters*, **120** 146402(2018).
- [55] Gong, Z. P., Ashida, Y., Kawabata, K., Takasan, K., Higashikawa, S., Ueda, M. Topological Phases of Non-Hermitian Systems. *Physical Review X*, **8** 031079(2018).
- [56] Kremer, M., Biesenthal, T., Maczewsky, L. J., Heinrich, M., Thomale, R., Szameit, A. Demonstration of a two-dimensional PT-symmetric crystal. *Nature Communications*, **10** 435(2019).
- [57] Hadad, Y., Khanikaev, A. B., Alu, A. Self-induced topological transitions and edge states supported by nonlinear staggered potentials. *Physical Review B*, **93** 155112(2016).
- [58] Leykam, D., Chong, Y. D. Edge Solitons in Nonlinear-Photonic Topological Insulators. *Physical Review Letters*, **117** 143901(2016).

## 第三章 光子晶体超晶格中的次级拓扑界面态

### 3.1 引言

自从量子霍尔效应在凝聚态系统中被发现后,类似的拓扑效应在很多系统中都得到了证实,包括超冷原子系统[1-3]、声学系统[4]、光学系统[5-11]和经典力学结构[12-14]。在这些系统中,拓扑界面态的存在引起了人们极大的兴趣[15],它作为一种存在于不同拓扑相物质界面上的鲁棒量子态,近年来被广泛研究且在各个领域的具备应用潜能。其中,在光学系统中构造并调控拓扑界面态[5, 9, 16-19],成为当前拓扑光子学研究的焦点。相关的前沿应用包括局部场增强[17]、量子发射器[19]拓扑激光器[20-22]。

光的本质赋予人们探索光子体系[23]独有的拓扑现象的能力。因此,当在光学系统研究拓扑界面态时,可以利用光子的 TM (横磁场) 和 TE (横电场) 两种偏振所对应的赝自旋自由度。在光子体系中,相互正交的 TM 和 TE 偏振模式[24]的能量往往不同,而为人们熟知的 TE-TM 分裂效应(TE-TM splitting effect)可以用作用于光子赝自旋的有效磁场来描述。受此启发,我们可以创建合适的平台并运用可行的方法来实现灵活可调、偏振相关的拓扑界面态。

另一方面,一维超晶格系统可被视为一个良好的平台,用于构造并调控各类集体模式能带色散[25-30],同时实现可调的拓扑界面态[17, 31]。事实上,这些集体共振模式的出现,是各个系统中“原子(光子/声)轨道”的杂化耦合引起的。然而,在这些系统中,由于“轨道”本身往往不是拓扑起源的,因而不受拓扑性保护,它们也就容易因扰动被破坏。因此,我们迫切需要具有拓扑保护的“轨道”。于是,由这些拓扑起源的“轨道”相互杂化形成的集体模式所构成的拓扑界面态可以看作是一种次级拓扑现象,我们称为次级拓扑界面态(secondary topological interface states, 记作 STISs),进而为研究新奇拓扑现象开辟了一条新的道路。

在本章中,我们第一次从理论上提出了 STIS,并提出一种实验上可行的在一维光子晶体复合超晶格(complex superlattice)系统中实现自旋依赖的 STISs 的方案。该复合系统是由两个拓扑性质不同的子超晶格(component superlattice)拼接构成,其中 STISs 位于可见光波段,能量局域于两个子超晶格界面上。具体

来说, 两个子超晶格都是由不同能带拓扑性质的两种光子晶体 (photonic crystals, 记作 PCs) 交替堆叠而构成的, 因此每个相邻 PC 界面都存在拓扑保护的量子态。这些量子态作为“人工光子轨道”相互耦合形成超晶格能带, 它们的拓扑起源验证了上文对 STISs 的定义, 故被命名为初级拓扑界面态 (elementary topological interface states, 记作 ETISs)。由于 STIS 的出现和调控依赖于光的偏振 (光子赝自旋), 这些 STISs 可以根据赝自旋自由度分为两组, 其中每一组都可以用不同水平波矢的入射光单独激发和操控。此外, 通过人为设计, STIS 能不受有限尺寸效应 (finite-size effect) 影响, 从而其频率始终固定在超晶格能带带隙的中点。利用透射谱, 我们可以直接获取 STISs 的共振频率, 进而验证我们的理论。我们的工作提出了一种全新的机制来调控和增强局域模式, 有助于设计具备自旋控制的新型光学器件。

## 3.2 复合光子晶体超晶格的构造

在本节中, 我们先介绍可调的“光子轨道” ETISs 的实现, 这与第二章中实现 TIMs 的方法类似, 但采用的实际结构不同。接着主要介绍复合光子晶体超晶格的具体结构及其中 STISs 的实现。

作为人工“光子轨道”, ETIS 的实现以及拓扑保护的机理与第二章中的 TIM 一致, 但本章我们不采用第二章里通过加入薄层的方法来改变 ETIS 共振频率。ETIS 存在于两种能带结构相同, 但拓扑特性不同的 PCs 界面上。这里设计的两种 PCs, 我们也用 q 型 PC 和 p 型 PC 命名, 因为它们与第二章中 PCs 单元的对称性一样 (即都是由 M1 和 M2 两种介质材料交替堆叠而成。q(p) 型 PC 的中心对称单元由一层厚度为  $d_1$  ( $d_2$ ) 的 M1(M2) 介质层夹在厚度为  $d_2/2$  ( $d_1/2$ ) 的半层 M2(M1) 介质层之间所构成, 单元周期都是  $T = d_1 + d_2$ ), 但厚度参数不同。我们用图 3.1 展示了两种 PCs 的带隙和相应的 Zak 相位计算结果, 满足第一个能隙中出现拓扑保护态的条件 (详见 2.2.1), 从而保证了 ETISs 的拓扑起源。

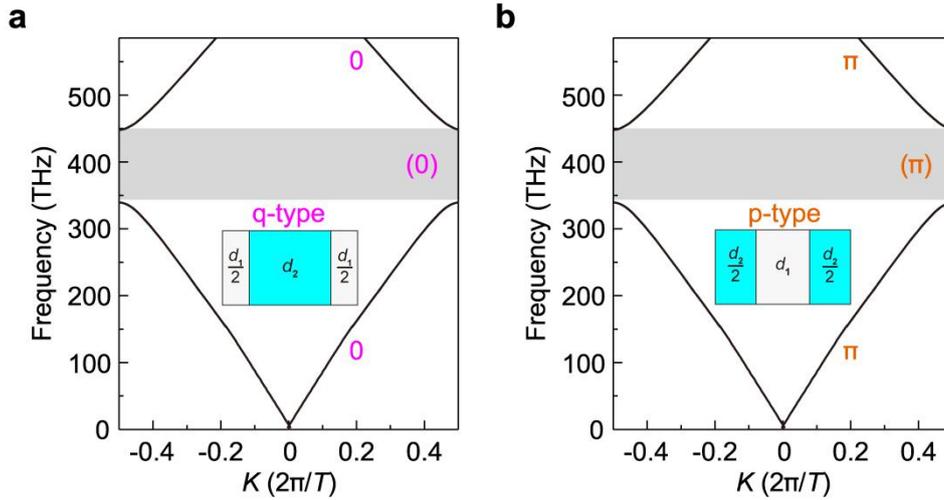


图 3.1 q 型 PC 和 p 型 PC 的能带以及相应 Zak 相位。插图显示了两种 PCs 的结构， $K$  是布洛赫波矢。(a)和(b)分别是 q 型 PC 和 p 型 PC 的能带。这里，介质材料 M1（插图白色区域）是  $Ta_2O_5$ ，厚度  $d_1=88\text{nm}$ ；M2（插图青色区域）是  $SiO_2$ ，厚度  $d_2=130\text{nm}$ 。两种材料在研究频段的折射率分别约为 2.2 和 1.46（色散很小可以忽略）。每个能带的 Zak 相位都标注它旁边，第一个带隙以下的 Zak 相位之和为带隙区域(灰色阴影区域)的括号中数值。

同样，通过交替叠加两种 PC 构造超晶格结构，会使得 ETISs 与它们最近邻耦合而形成集体超模式（super-modes），并得到超晶格色散。由于 ETISs 的共振频率和耦合效应决定了超模式的色散，故能够灵活调控 ETISs 是必要的。另一方面，ETISs 对 TM 和 TE 偏振光激发的响应不同，进而具备一个赝自旋自由度，使得 ETISs 的共振和耦合依赖于偏振。图 3.2a 中展示了 COMSOL 计算得到的不同偏振 ETISs 共振频率对水平波矢的响应情况，为此我们把 q 型 PC 和 p 型 PC（两种 PCs 周期单元数都设置成 20，分别用  $q_{20}$  和  $p_{20}$  表示。这里及以后用脚标来表示重复单元个数）拼接以形成支持 ETISs 的界面，如图 3.2a 上部所示结构。在  $k_x = 0\mu\text{m}^{-1}$  的情况下，ETISs 是简并的；而在  $k_x \neq 0\mu\text{m}^{-1}$  的情况下，这种简并被消除。为了深入研究 ETISs 间的耦合，我们用 COMSOL 设计了一系列具有两个界面的对称结构，以确保两个界面上的 ETISs 具有相同的共振频率。在此基础上充分研究最近邻 ETISs 间的耦合效应。如图 3.2b 所示，每个结构由特定周期单元数  $N$  的 q 型(p 型)PC(记作  $q_N$  ( $p_N$ ))的夹在两个具有 20 个周期单元的 p 型(q 型)PC(记作  $p_{20}$  ( $q_{20}$ ))中所构成。在此情形下，两个界面中间的 q 型(p 型)PC 可看作相邻 ETISs 的“耦合渠道”。由于耦合强度取决于两个态波函数在空间上

的交叠，故  $N$  越大耦合系数  $J$  的强度越小，反之亦然。通过 COMSOL 数值计算，我们可以定量地研究  $J$ ，不仅能得到  $J$  的强度随  $N$  变化的规律，还得出  $J$  的符号与  $N$  的奇偶性以及作为“耦合渠道”的 PC 类型有关的结论。我们发现， $N$  是偶数时， $J < 0$  ( $q_N$  为“耦合渠道”) 而  $J > 0$  ( $p_N$  为“耦合渠道”); 而  $N$  是奇数时  $J$  的符号情况恰好相反。若其他设置一致，“耦合渠道”分别为  $q_N$  和为  $p_N$  时  $J$  的大小相同，符号相反。图 3.2b 给出了两种偏振下的  $J$  随  $k_x$  变化的数值结果，我们利用  $q_5$  ( $p_5$ ) 和  $q_6$  ( $p_6$ ) 作为耦合渠道来分别展示  $N$  为奇数和偶数情况下  $J$  的性质。值得注意的是，图 3.2b 清楚地显示了 ETISs 耦合的偏振依赖特性：对于四个“耦合渠道”中的任意一个，TM 模式对应的  $|J|$  与 TE 模式的变化趋势相反，即随着  $k_x$  的增加，前者缓慢上升，而后者显著下降。因此，ETIS 的赝自旋自由度对于我们能够灵活调控超模式色散以及复合超晶格系统中的 STIS 至关重要。

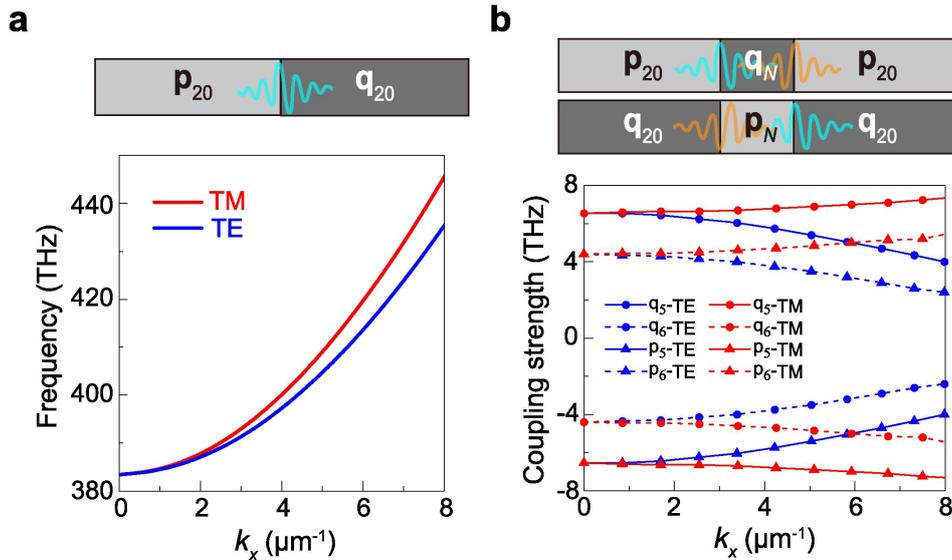


图 3.2 ETISs 的实现和调控。(a) TM 和 TE 偏振的 ETISs 频率随  $k_x$  的变化关系。(b) 耦合系数随  $k_x$  的变化关系。下标表示作为“耦合渠道”的 q(p) 型 PC 的周期单元数。(a) 和 (b) 上部分别给出了相应的结构示意图。

接下来介绍我们的复合超晶格系统，它是由两个子超晶格（分别命名为  $\alpha$  和  $\beta$ ）构成。我们先介绍  $\alpha$  和  $\beta$  超晶格的结构以及色散。 $\alpha$  超晶格由一系列  $p_m$  和  $q_n$  交替组成，而  $\beta$  超晶格是由  $p_n$  和  $q_m$  交替组成。这里的下标  $m$  ( $n$ ) 表示对应

PC 的周期单元数，由之前的讨论可知  $m(n)$  直接控制相邻 ETISs 之间的耦合。因此， $\alpha$  和  $\beta$  超晶格都可以类比为一维二聚原子链，其中 ETISs 作为“光子轨道”，其元胞（unit dimer）可分别用  $[p_{m/2} q_n p_{m/2}]$  和  $[p_{n/2} q_m p_{n/2}]$  表示，长度都为  $\Lambda \equiv (m+n)T$ ，如图 3.3 所示。对于  $\alpha$  超晶格，其中的超模式满足哈密顿：

$$H = \sum_{i,s=\uparrow,\downarrow} \left( J_{1,s} a_{i,s}^\dagger b_{i,s} + J_{2,s} a_{i+1,s}^\dagger b_{i,s} + h.c. + \omega_{e,s} a_{i,s}^\dagger a_{i,s} + \omega_{e,s} b_{i,s}^\dagger b_{i,s} \right), \quad (3.1)$$

其中， $a_{i,s}^\dagger$  ( $b_{i,s}^\dagger$ ) 和  $a_{i,s}$  ( $b_{i,s}$ ) 分别是第  $i$  个元胞里第一（二）个界面上 ETIS 的产生和湮灭算符。 $J_{1,s}$  ( $J_{2,s}$ ) 表示元胞内（间）的耦合系数， $\omega_{e,s}$  是 ETIS 的共振频率。其中下标  $s = \uparrow\downarrow$  表示偏振（赝自旋）自由度，自旋向上 ( $s = \uparrow$ ) 和向下 ( $s = \downarrow$ ) 分别对应 TM 和 TE 偏振。和第二章 TIMs 的耦合情况类似，耦合符号的可调性是我们系统的有趣的地方所在。通过计算可知，当  $m$  和  $n$  的奇偶性相同时， $J_{1,s} J_{2,s} < 0$ ；而当  $m$  和  $n$  奇偶性不同时，有  $J_{1,s} J_{2,s} > 0$ 。考虑到这一点，我们

采用与第二章中一样的处理方式，额外引入参数  $g \equiv \text{sgn}\left(\frac{J_{2,s}}{J_{1,s}}\right)$  并且用  $J_s \equiv (-gJ_{1,s} - J_{2,s})/2g$  和  $\delta_s \equiv (-gJ_{1,s} + J_{2,s})/2g$  做进一步讨论。所以， $\alpha$  超晶格哈密顿可以写作：

$$H = \sum_{i,s=\uparrow,\downarrow} \left( -(J_s + \delta_s) a_{i,s}^\dagger b_{i,s} - g(J_s - \delta_s) a_{i+1,s}^\dagger b_{i,s} + h.c. + \omega_{e,s} a_{i,s}^\dagger a_{i,s} + \omega_{e,s} b_{i,s}^\dagger b_{i,s} \right). \quad (3.2)$$

对于  $\beta$  超晶格，根据图 3.2 给出的耦合系数大小和符号的变化规律，其哈密顿量：

$$H = \sum_{i,s=\uparrow,\downarrow} \left( g(J_s - \delta_s) a_{i,s}^\dagger b_{i,s} + (J_s + \delta_s) a_{i+1,s}^\dagger b_{i,s} + h.c. + \omega_{e,s} a_{i,s}^\dagger a_{i,s} + \omega_{e,s} b_{i,s}^\dagger b_{i,s} \right). \quad (3.3)$$

因此，两种超晶格具有相同的色散，由超模式形成的能带带隙宽度应为  $4|\delta_s|$ ，取决于  $|m-n|$  的值。在实验中，我们用  $m=4$  和  $n=6$  作为我们的超晶格样品参数（所以有  $g=-1$ ）。图 3.3 中分别绘制了  $\alpha$  和  $\beta$  超晶格在  $k_x = 0\mu\text{m}^{-1}$  和  $k_x = 5\mu\text{m}^{-1}$  下两种偏振的超模式能带色散，其中  $\xi \equiv 2\pi/\Lambda$  为布洛赫波矢，纵坐标频率是减去  $\omega_{e,\uparrow}$  和  $\omega_{e,\downarrow}$  的平均值后的结果。这里  $m$  和  $n$  和选择是为了使得带隙足够大，方便之后 STISs 的调控。

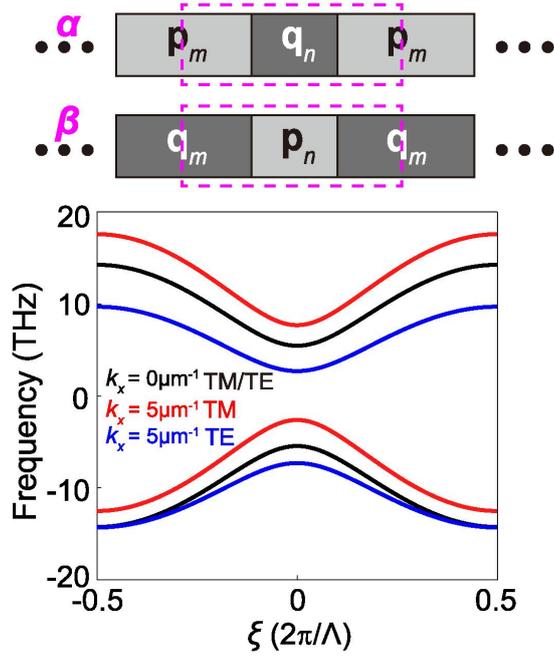


图 3.3  $\alpha$  和  $\beta$  超晶格的元胞结构，以及 COMSOL 计算得到的在  $k_x = 0\mu\text{m}^{-1}$  和  $k_x = 5\mu\text{m}^{-1}$  下两种偏振的超模式能带色散。

我们的复合超晶格系统是由两个子超晶格  $\alpha$  和  $\beta$  拼接而成，其结构示意图展示在图 3.4a 中。由于  $m < n$ ，进而  $\alpha$  ( $\beta$ ) 对应弱（强）元胞内耦合，其能带是拓扑非平庸（平庸）的。因此，两个子晶格的不同能带拓扑性保证了二者界面上、位于超模式能带带隙中间的拓扑保护态的形成，即 STISs。不失一般性，复合超晶格系统中  $m$  和  $n$  既可以是偶数，也可以是奇数。于是，我们用  $\lceil m/2 \rceil (\lceil n/2 \rceil)$  个  $p$  型 PC 周期单元作为  $\alpha$  ( $\beta$ ) 超晶格的界面结构，以确保拼接处  $p_{\lceil m/2 \rceil + \lceil n/2 \rceil}$  只包含完整的 PC 周期单元 ( $\lceil \cdot \rceil$  表示向上取整函数 (ceiling function))，如图 3.4a 所示。

接着我们重点研究 STISs 的赝自旋自由度。考虑偏振时倒空间中的哈密顿是  $4 \times 4$  矩阵。由于两种偏振模式的能量劈裂依赖于  $k_x$ ，它们之间存在显著差异。因此，研究 STISs 的偏振特性是很有必要的。根据紧束缚理论，STIS 的频谱位置对 ETIS 的共振频率变化非常敏感。而它的能量局域范围与超模式能带带隙宽度相关，即随 ETISs 间的耦合变化而变。

为了从理论上验证复合超晶格系统存在可调的 STISs，我们用紧束缚模型分析了超模式能谱。整个系统可以通过建立以下紧束缚方程来描述：

$$\begin{aligned}
 & \left\{ \begin{aligned}
 (\alpha) \quad & \left\{ \begin{aligned}
 & (\omega_s - \bar{\omega}_{e\alpha 1,s}) \psi_{i,s} = J_{1,s} \psi_{i+1,s} & i = 1 \\
 & (\omega_s - \bar{\omega}_{e,s}) \psi_{i,s} = J_{1,s} \psi_{i-1,s} + J_{2,s} \psi_{i+1,s} & i = 2, 4, \dots, W/2 - 2 \\
 & (\omega_s - \bar{\omega}_{e,s}) \psi_{i,s} = J_{2,s} \psi_{i-1,s} + J_{1,s} \psi_{i+1,s} & i = 3, 5, \dots, W/2 - 1
 \end{aligned} \right. \\
 (\text{interface}) \quad & \left\{ \begin{aligned}
 & (\omega_s - \bar{\omega}_{e,s}) \psi_{i,s} = J_{1,s} \psi_{i-1,s} + J_{3,s} \psi_{i+1,s} & i = W/2 \\
 & (\omega_s - \bar{\omega}_{e,s}) \psi_{i,s} = J_{3,s} \psi_{i-1,s} - J_{2,s} \psi_{i+1,s} & i = W/2 + 1
 \end{aligned} \right. \\
 (\beta) \quad & \left\{ \begin{aligned}
 & (\omega_s - \bar{\omega}_{e,s}) \psi_{i,s} = -J_{2,s} \psi_{i-1,s} - J_{1,s} \psi_{i+1,s} & i = W/2 + 2, W/2 + 4, \dots, W - 2 \\
 & (\omega_s - \bar{\omega}_{e,s}) \psi_{i,s} = -J_{1,s} \psi_{i-1,s} - J_{2,s} \psi_{i+1,s} & i = W/2 + 3, W/2 + 5, \dots, W - 1, \\
 & (\omega_s - \bar{\omega}_{e,s}) \psi_{i,s} = -J_{2,s} \psi_{i-1,s} & i = W
 \end{aligned} \right.
 \end{aligned} \right. \quad (3.4)
 \end{aligned}$$

这里， $W$  代表晶格格点即界面的总数， $i$  遍历了  $\alpha$  ( $\beta$ ) 超晶格的每个格点  $i = 1, 2, \dots, W/2$  ( $i = W/2 + 1, W/2 + 2, \dots, W$ )，下标  $s = \uparrow \downarrow$  表示了 TM (TE) 偏振的两个自旋  $s = \uparrow$  ( $\downarrow$ )。  $\psi_{i,s}$  表示第  $i$  个界面上 ETIS 的波函数。  $\bar{\omega}_{e,s} \equiv 1/2(\omega_{e,\uparrow} + \omega_{e,\downarrow})$  为除  $i = 1$  外，所有界面上 ETISs 在特定  $k_x$  下的两个偏振的平均共振频率 ( $\omega_{e,s=\uparrow\downarrow}$  为共振频率)。  $\omega_s$  表示约化本征频率 (即减去  $\bar{\omega}_{e,s}$  后的频率)。第一个界面平均频率与  $\bar{\omega}_{e,s}$  不同，记为  $\bar{\omega}_{e\alpha 1,s}$ 。这里的不相等是由于第一个界面上的 ETIS 受到外界 (空气) 影响，共振频率发生变化。这是因为我们故意不在  $\alpha$  超晶格第一个元胞与空气接触的一端添加额外的 p 型 PC 周期单元。因此，通过这种方式，我们可以获得不受其他模式干扰的、纯粹的 TM(TE) 偏振 STISs，每一个 STIS 频率都和此时 ETIS 本征共振频率相同，从而可以轻易调控。否则由于有限尺寸效应 (finite-size effect)，纯 STISs 的是难以实现的 (我们在 3.4 节中详细讨论)。考虑到我们之后采用的实验参数  $m = 4$  和  $n = 6$ ，再结合耦合系数大小和符号的变化规律，这里我们用  $J_{1,s}$  ( $J_{2,s}$ ) 代表  $\alpha$  超晶格元胞内 (间) 的耦合系数，而  $-J_{2,s}$  ( $-J_{1,s}$ ) 表示  $\beta$  超晶格元胞内 (间) 的耦合系数。对于两个子超晶格的界面，引入  $J_{3,s}$  表示中间“耦合渠道”  $p_s$  对应耦合系数。

与之前单独分析  $\alpha$  和  $\beta$  超晶格色散时相同，这里我们换用  $J_s$  和  $\delta_s$  来描述耦合效应 (上文给出的是一般的形式，这里  $m$  和  $n$  选用偶数， $g = -1$ )。  $J_s = (J_{2,s} - J_{1,s})/2$  且  $\delta_s = -(J_{1,s} + J_{2,s})/2$ ，因为  $J_{1,s} \equiv -(J_s + \delta_s)$  且

$J_{2,s} \equiv J_s - \delta_s$ 。因此, STIS 应该出现在宽度为  $4|\delta_s|$  超模式带隙的中心。通过数值模拟, 还可以得到  $i = 1$  界面 ETIS 本征共振频率。于是, 利用式(3.4), 我们能从紧束缚理论求出不同  $\delta_s$  下的超模式频谱 (相当于投影能带)。图 3.4b 展示了  $k_x = 0\mu\text{m}^{-1}$  时由 40 元胞 (每个子超晶格含 20 个) 组成的复合超晶格中 TM 和 TE 偏振超模式频谱。由于简并, 这两个频谱实际上是重叠的, 其中任何一个都包含 80 个超模式。如图 3.4b 所示, 无论是哪一种偏振, STIS 频率始终都位于投影能带带隙中心, 即 ETIS 的共振频率  $\omega_s = \bar{\omega}_{e,s} = \omega_{e,\uparrow} = \omega_{e,\downarrow}$ 。当  $k_x \neq 0\mu\text{m}^{-1}$  时, TM 和 TE 偏振超模式的简并性被消除。图 3.4c(d) 描绘了与图 3.4b 相同结构的复合超晶格在  $k_x = 5\mu\text{m}^{-1}$  时的 TM(TE) 偏振超模式频谱, 从图 3.4c(d) 可以看出, STIS 的频率为  $1/2(\omega_{e,\uparrow} - \omega_{e,\downarrow})$  ( $-1/2(\omega_{e,\uparrow} - \omega_{e,\downarrow})$ )。靠近投影能带带隙上边界的模式源于  $i = 1$  界面 ETIS 与外界的耦合, 将在第 3.4 节中详细讨论。与实验样品对应的  $\delta_s$  在图 3.4b 到图 3.4d 中被用虚线标出, 插图展示了带隙中心 STISs 的电场分布图, 进而有力地证明了我们关于 STISs 的论断。

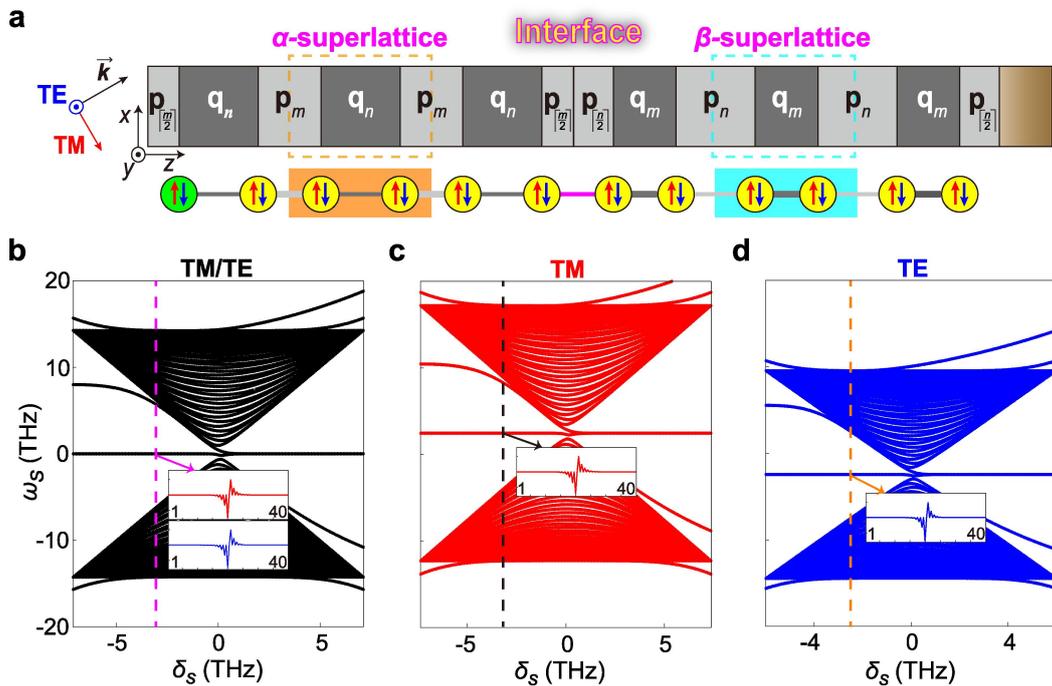


图 3.4 复合超晶格结构及其中 STISs。(a) 复合超晶格结构图(上图)及设计原理图(下图)。在下图中, 第二个到最后一个晶格点用黄色圆圈表示, 而第一个格点用绿色圆圈表示, 其中红色向上(蓝色向下)箭头表示 TM(TE) 偏振的自旋。q(p) 型 PC 对应耦合用深(浅)灰线表示。粗线和细线分别表示强耦合和弱耦合。(b-d) 40 个元胞组成的复合超晶格 ( $\alpha$  和  $\beta$  各包含

20 个元胞) 中 TM 和 TE 偏振超模式在 (b)  $k_x = 0\mu\text{m}^{-1}$  和 (c, d)  $k_x = 5\mu\text{m}^{-1}$  的约化频率随  $\delta_s$  的变化关系。箭头指出了  $m = 4$  且  $n = 6$  时 STISs 的位置, 旁边的插图展示了波函数振幅分布。

### 3.3 次级拓扑界面态的调控与测量

在 3.2 节中, 我们介绍了复合光子晶体超晶格的具体结构及实现 STISs 的手段。本节主要介绍实验上对 STISs 的调控及测量。

在实验中, 我们的样品由 6 个元胞组成 ( $\alpha$  和  $\beta$  各 3 个), 足以使其中超模式频谱保持了图 3.4 中 40 个元胞对应频谱的典型性质。样品的材料结构参数与图 3.1 中所选一致。样品中的超模式可以被平面波激发, 并可通过测量透射谱被直接检测到。图 3.5a 显示了  $k_x = 0\mu\text{m}^{-1}$  时的超模式约化频率  $\Delta f$  ( $\Delta f = 0$  对应  $i \neq 1$  时所有 ETISs 两个偏振的平均共振频率) 的理论值, 其中由于 TM 和 TE 偏振的简并, 相同频率的模式成对出现。如图 3.5b 所示, 实验中在垂直入射下的透射谱中可以观察到两个简并“零模”STISs, 表现为带隙中心的尖峰。而当入射光变为斜入射时, 需要考虑自旋自由度。图 3.5c 和图 3.5d 分别对应  $36^\circ$  斜入射偏振光激发下的超模式约化频率和透射谱。TM 和 TE 模式的能量劈裂使  $k_x = 0\mu\text{m}^{-1}$  时的简并性消除: TM (TE) 偏振的 STIS 蓝移 (红移)。可见, 理论 (图 3.5c) 和实验 (图 3.5d) 的结果一致。值得注意的是, 透射谱反映了系统中任意偏振的纯 STIS 的激发, 它的频率始终等于在带隙中心。这是由于我们的精心设计, 使得 STIS 不受有限尺寸效应的影响所致 (详见第 3.4 节)。除了 STIS 的位置外, 图 3.5b 和图 3.5d 中测量得到的带隙宽度和体超模式分布与图 3.5a 和图 3.5c 的理论结果吻合。综上, 在我们复合超晶格体系中实现并调控偏振依赖的 STISs 的方法的有效性和可靠性得到了充分证明。

TM 和 TE 超模式频率不同源于与水平波矢  $k_x$  相关的“有效场”对光子偏振的作用。在塞曼磁场中的电子也有类似的行为。因此在这里,  $k_x$  可以被视作“有效磁场”, 且随着“磁场”的增强 (即  $k_x$  的增加), TM 和 TE 偏振 STISs 之间的差异逐渐变大。为了验证这一点, 我们使用了检测范围广、精度高 (不超过  $0.5^\circ$ )

的光谱仪，连续测量了入射角  $\theta$  从  $0^\circ$  到  $60^\circ$  的两种偏振的透射谱，结果如图 3.6 所示。此外，在图 3.6 中我们还绘制了紧束缚分析(白色虚线)和 COMSOL 数值计算(红色实心圆)所得的 STISs 位置，与实验结果符合得很好。

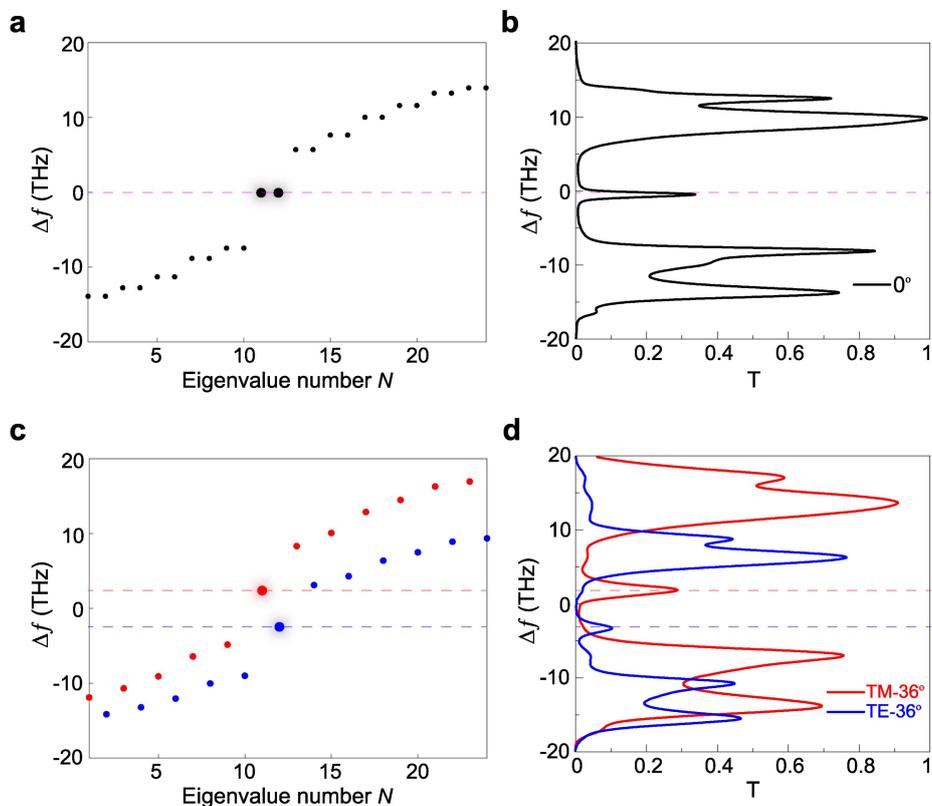


图 3.5 (a, b) 正入射激发和 (c, d) 斜入射 ( $36^\circ$ ) 激发时, 紧束缚分析推导得出的超模式约化频率和测量的透射谱。为清晰起见, 在 (a) 和 (c) 中, STISs 的标记被故意放大, 分别对应于 (b) 和 (d) 中用虚线强调的带隙中心处的透射峰值。

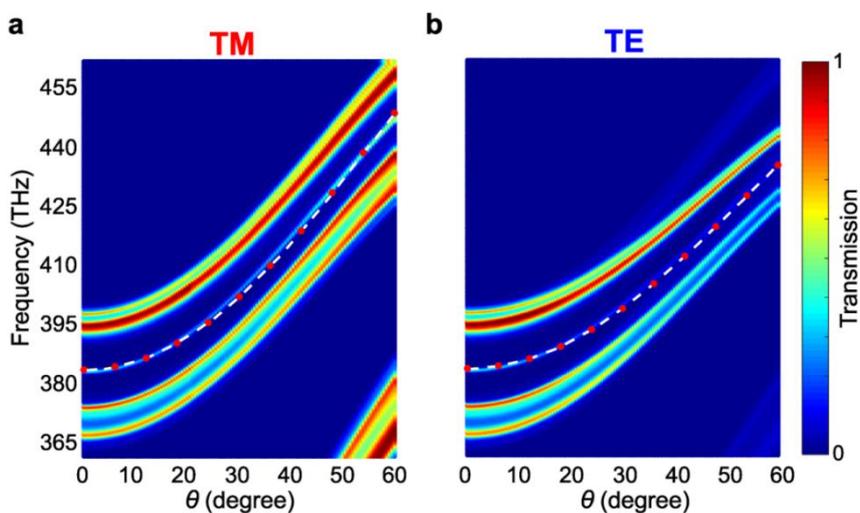


图 3.6 在 (a) TM 和 (b) TE 偏振光激发下, 入射角从  $0^\circ$  变化到  $60^\circ$  的样品透射谱。白色虚线

和红色实心圆分别展示了通过紧束缚分析和 COMSOL 数值计算得到的 STIS 轨迹。

### 3.4 有限复合光子晶体超晶格中的“零模式”

理想情况下，复合超晶格无限长，故位于  $\alpha$  和  $\beta$  两个半无限超晶格界面之上的 STIS 的本征频率与每个“光子轨道”ETIS 共振的本征频率完全相等，即超模式能带带隙的中点。然而，在实际的有限结构中，具有拓扑非平庸能带的  $\alpha$  超晶格与外界接触的边界上会出现拓扑边界态 (topological boundary state, 记作 TBS)，其本征频率与 ETIS 相同。因此，体系中似乎存在不可避免的有限尺寸效应 (finite-size effect)，而导致 STIS 和 TBS 这两种频率相同的模式之间的杂化。结果会使得纯粹的 STIS 消失，带隙里出现两个不同频率（都不等于 ETIS 频率）的杂化模式。那么，怎么才能在实际结构中得到纯 STIS，即无杂化且频率等于 ETIS 本征频率（即带隙中心）的“零模式 (zero mode) [17]”呢？

从 3.2 和 3.3 节可看出，我们已经解决了这个问题，并在有限复合超晶格结构中实现了纯 STIS，证明了它的稳定性和可调性。具体来说，我们特意不在  $\alpha$  超晶格与空气接触的元胞末端多添加 p 型 PC 单元，使得  $i = 1$  界面的 ETIS 与空气作用，进而其频率改变而与其他的 ETISs 不同。于是， $i = 1$  界面的 ETIS 频率不再与 STIS 相等，而 STIS 仍然与其他 ETIS 本征频率一致，作为带隙中唯一的模式，可以被独立调控。图 3.7a 展示了通过紧束缚计算获得的约化频率随  $\delta_s$  的变化，其中我们探索了  $k_x = 0\mu\text{m}^{-1}$  时，由 40 个元胞（每个子晶格各 20 个）组成的复合超晶格中的 TM 和 TE 偏振的超模式。可以明显看出，在特定的  $\delta_s$  下，带隙中心出现了两个简并的 STISs，以及靠近频带的两个简并的 TBSs。我们通过研究  $\delta_s = -2.73\text{THz}$ （对应于实验中采用的  $m = 4$  和  $n = 6$  结构）的相关电场分布图（图 3.7 中插图，由于两个偏振简并，只展示了 TM 模式）证实了上述说法。

否则，在 STIS 和 TBS 杂化存在的情况下，两种频率不同的杂化模式出现。图 3.7b(c) 给出了  $k_x = 0\mu\text{m}^{-1}$  时，40 (6) 个元胞（每个子晶格各 20(3) 个）组成的复合超晶格中的两个偏振的超模式频谱。从中可看出，由于有限尺寸效应，纯 STIS 即“零模式”是无法实现的。此外，注意到，随着结构元胞数的减少，

两种杂化模式之间的频率劈裂会变大，所以我们不能期望在不改变第一个 ETIS 频率的情况下，用我们的实验样品（6 个元胞，数量再多会使样品品质下降）得到一个频率始终等于带隙中心频率的“零模式”。

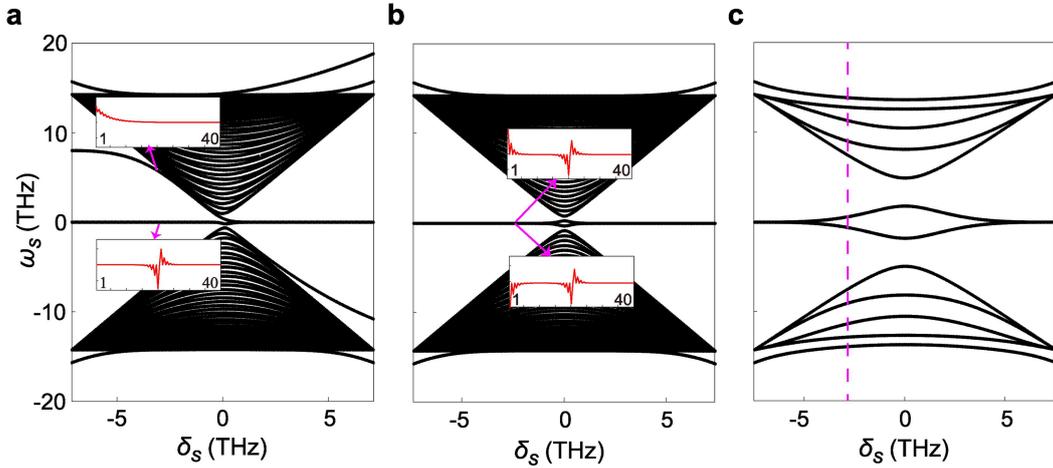


图 3.7 有限复合超晶格中的“零模式”。(a, b) 40 个元胞 ( $\alpha$  和  $\beta$  各 20 个) 与 (c) 6 个元胞 ( $\alpha$  和  $\beta$  各 3 个) 组成的复合超晶格中的超模式在  $k_x = 0 \mu\text{m}^{-1}$  时约化频率随  $\delta_s$  的变化关系。其中 (a) 和 (b, c) 分别表示 STIS 和 TBS 没有发生和发生杂化时的情况。插图展示了  $\delta_s = -2.73\text{THz}$  (对应于实验中  $m = 4$  且  $n = 6$ ) 相关 TM 偏振模式的电场分布。(c) 中的虚线用来强调带隙内两个杂化模式的能量劈裂。

### 3.5 本章小结

在本章中，我们从理论和实验上研究了复合超晶格系统中存在的次级拓扑边界态 (STIS)，这是一种新奇的拓扑保护态。通过拼接不同能带拓扑性质的光子晶体 (PCs) 结构，我们构造了拓扑起源的“光子轨道” (初级拓扑边界态, ETISs)。ETISs 的频率和耦合都高度可调。再利用 PCs 周期拼接构造两种拓扑性质不同的超晶格结构，将它们拼接得到复合超晶格，其界面上存在拓扑保护界面态。由于这种界面态源于拓扑保护的 ETISs 的杂化，因此被称为次级拓扑界面态。利用光子的赝自旋自由度，我们得到了可灵活调控的自旋依赖 STISs。另外，在我们的研究中，STISs 具有鲁棒性且频率位于可见光频段，故在可见光通信设备 [32]

和局部荧光增强[33]等领域中具有应用潜力。值得注意的是，每个 STIS 都可看作不受有限尺寸效应影响的“零模式”，它的能量局域于复合超晶格结构中心，且频率与 ETIS 本征频率相同。因此，通过设计不同几何尺寸或选用不同的介质材料的结构，可以连续调节任一偏振 ETIS 的频率，进而得到不同频率和偏振的 STISs。而 ETISs 的存在本身就是受到拓扑保护的，这给了我们极大的自由来调控 STISs，进而可用来推动包括自旋控制激光发射器和光学器件在内的应用发展[34-37]。

## 参考文献

- [1] Dalibard, J., Gerbier, F., Juzeliunas, G., Ohberg, P. Colloquium: Artificial gauge potentials for neutral atoms. *Reviews of Modern Physics*, **83** 1523(2011).
- [2] Goldman, N., Budich, J. C., Zoller, P. Topological quantum matter with ultracold gases in optical lattices. *Nature Physics*, **12** 639(2016).
- [3] Eckardt, A. Colloquium: Atomic quantum gases in periodically driven optical lattices. *Reviews of Modern Physics*, **89** 011004(2017).
- [4] Wen, X. H., Qiu, C. Y., Qi, Y. J., Ye, L. P., Ke, M. Z., Zhang, F., *et al.* Acoustic Landau quantization and quantum-Hall-like edge states. *Nature Physics*, **15** 352(2019).
- [5] Wang, Z., Chong, Y. D., Joannopoulos, J. D., Soljacic, M. Observation of unidirectional backscattering-immune topological electromagnetic states. *Nature*, **461** 772(2009).
- [6] Hafezi, M., Demler, E. A., Lukin, M. D., Taylor, J. M. Robust optical delay lines with topological protection. *Nature Physics*, **7** 907(2011).
- [7] Fang, K. J., Yu, Z. F., Fan, S. H. Realizing effective magnetic field for photons by controlling the phase of dynamic modulation. *Nature Photonics*, **6** 782(2012).
- [8] Khanikaev, A. B., Mousavi, S. H., Tse, W. K., Kargarian, M., MacDonald, A. H., Shvets G. Photonic topological insulators. *Nature Materials*, **12** 233(2013).
- [9] Rechtsman, M. C., Zeuner, J. M., Plotnik, Y., Lumer, Y., Podolsky, D., Dreisow, F., *et al.* Photonic Floquet topological insulators. *Nature*, **496** 196(2013).
- [10] Lu, L., Joannopoulos, J. D., Soljacic, M. Topological states in photonic systems. *Nature Physics*, **12** 626(2016).
- [11] Khanikaev, A. B., Shvets, G. Two-dimensional topological photonics. *Nature Photonics*, **11** 763(2017).
- [12] Kane, C. L., Lubensky, T. C. Topological boundary modes in isostatic lattices. *Nature Physics*, **10** 39(2014).
- [13] Paulose, J., Chen, B. G. G., Vitelli, V. Topological modes bound to dislocations in mechanical metamaterials. *Nature Physics*, **11** 153(2015).
- [14] Susstrunk, R., Huber, S. D. Observation of phononic helical edge states in a mechanical topological insulator. *Science*, **349** 47(2015).
- [15] Huber, S. D. Topological mechanics. *Nature Physics*, **12** 621(2016).

- [16] Hafezi, M., Mittal, S., Fan, J., Migdall, A., Taylor, J. M. Imaging topological edge states in silicon photonics. *Nature Photonics*, **7** 1001(2013).
- [17] Poli, C., Bellec, M., Kuhl, U., Mortessagne, F., Schomerus, H. Selective enhancement of topologically induced interface states in a dielectric resonator chain. *Nature Communications*, **6** 6017(2015).
- [18] Cheng, X. J., Jouvaud, C., Ni, X., Mousavi, S. H., Genack, A. Z., Khanikaev, A. B. Robust reconfigurable electromagnetic pathways within a photonic topological insulator. *Nature Materials*, **15** 542(2016).
- [19] Barik, S., Karasahin, A., Flower, C., Cai, T., Miyake, H., DeGottardi, W., *et al.* A topological quantum optics interface. *Science*, **359** 666(2018).
- [20] St-Jean, P., Goblot, V., Galopin, E., Lemaitre, A., Ozawa, T., Le Gratiet, L., *et al.* Lasing in topological edge states of a one-dimensional lattice. *Nature Photonics*, **11** 651(2017).
- [21] Bandres, M. A., Wittek, S., Harari, G., Parto, M., Ren, J. H., Segev, M., *et al.* Topological insulator laser: Experiments. *Science*, **359** eaar4005(2018).
- [22] Zeng, Y. Q., Chattopadhyay, U., Zhu, B. F., Qiang, B., Li, J. H., Jin, Y. H., *et al.* Electrically pumped topological laser with valley edge modes. *Nature*, **578** 246(2020).
- [23] Ozawa, T., Price, H. M., Amo, A., Goldman, N., Hafezi, M., Lu, L., *et al.* Topological, photonics. *Reviews of Modern Physics*, **91** 015006(2019).
- [24] Shelykh, I. A., Kavokin, A. V., Rubo, Y. G., Liew, T. C. H., Malpuech, G. Polariton polarization-sensitive phenomena in planar semiconductor microcavities. *Semiconductor Science and Technology*, **25** 013001(2010).
- [25] Groning, O., Wang, S. Y., Yao, X. L., Pignedoli, C. A., Barin, G. B., Daniels, C., *et al.* Engineering of robust topological quantum phases in graphene nanoribbons. *Nature*, **560** 209(2018).
- [26] Kraus, Y. E., Lahini, Y., Ringel, Z., Verbin, M., Zilberberg, O. Topological States and Adiabatic Pumping in Quasicrystals. *Physical Review Letters*, **109** 106402(2012).
- [27] Belopolski, I., Xu, S. Y., Koirala, N., Liu, C., Bian, G., Strocov, V. N., *et al.* A novel artificial condensed matter lattice and a new platform for one-dimensional topological phases. *Science Advances*, **3** e1501692(2017).
- [28] Rizzo, D. J., Veber, G., Cao, T., Bronner, C., Chen, T., Zhao, F. Z., *et al.* Topological band engineering of graphene nanoribbons. *Nature*, **560** 204(2018).
- [29] Kohler, T., Scherg, S., Li, X., Luschen, H. P., Das Sarma, S., Bloch, I., *et al.* Observation of Many-Body Localization in a One-Dimensional System with a

- Single-Particle Mobility Edge. *Physical Review Letters*, **122** 170403(2019).
- [30] Zhao, H., Miao, P., Teimourpour, M. H., Malzard, S., El-Ganainy, R., Schomerus, H., *et al.* Topological hybrid silicon microlasers. *Nature Communications*, **9** 981(2018).
- [31] Zhao, D. G., Xiao, M., Ling, C. W., Chan, C. T., Fung, K. H. Topological interface modes in local resonant acoustic systems. *Physical Review B*, **98** 014110(2018).
- [32] Minotto, A., Haigh, P. A., Lukasiewicz, L. G., Lunedei, E., Gryko, D. T., Darwazeh, I., *et al.* Visible light communication with efficient far-red/near-infrared polymer light-emitting diodes. *Light-Science & Applications*, **9** (2020).
- [33] Kinkhabwala, A., Yu, Z. F., Fan, S. H., Avlasevich, Y., Mullen, K., Moerner, W. E. Large single-molecule fluorescence enhancements produced by a bowtie nanoantenna. *Nature Photonics*, **3** 654(2009).
- [34] Gorodetski, Y., Niv, A., Kleiner, V., Hasman, E. Observation of the spin-based plasmonic effect in nanoscale structures. *Physical Review Letters*, **101** 043903(2008).
- [35] Shitrit, N., Yulevich, I., Maguid, E., Ozeri, D., Veksler, D., Kleiner, V., *et al.* Spin-Optical Metamaterial Route to Spin-Controlled Photonics. *Science*, **340** 724(2013).
- [36] Petersen, J., Volz, J., Rauschenbeutel, A. Chiral nanophotonic waveguide interface based on spin-orbit interaction of light. *Science*, **346** 67(2014).
- [37] Maguid, E., Yulevich, I., Veksler, D., Kleiner, V., Brongersma, M. L., Hasman, E. Photonic spin-controlled multifunctional shared-aperture antenna array. *Science*, **352** 1202(2016).

## 第四章 光子晶体中狄拉克 nodal line 半金属与 double-bowl 表面态

### 4.1 引言

探索新的物质拓扑相对于基础物理学和材料科学都具有重要意义[1-7]。目前已有的对称性理论成功地鉴定了各种电子拓扑材料[8]。随着算法日渐发展，人们对晶体结构数据库中电子材料的拓扑特征进行了详尽的研究[9-11]。在光子体系中，拓扑分类最初被认为是电子系统的简单扩展，并由无自旋空间群描述。然而，近年来深入的分析表明，光子系统不同于电子系统，如介质材料的零频连通性和隐藏的对称性保证的连结点 (nexus points) 是光子系统所特有的[12, 13]。在本章中，我们展示了一个严格的狄拉克 nodal line 半金属 (Dirac nodal line semimetal, 记作 DNLS) 的在光子体系中的实现，它并不是电子体系 DNLS 所简单拓展得到的无自旋版本，并且具有环形的能带 (Dirac nodal ring, 记作 DNR) 简并。更特别的是，这种光学 DNLS 会引起相互正交的两种偏振下的双碗型表面态 (double-bowl surface states, 记作 DBSs)。两种偏振的 DBSs 在“碗”中心和“碗”边缘是完全简并的，在整个测量光谱范围内也近乎简并。这与其他光学系统形成鲜明的对比，因为在其他光学系统中，两个垂直偏振态通常是不简并的。

DNLSs[14-18]和具有四重能带简并的三维(3D) Dirac 半金属[19]是拓扑半金属家族的重要成员[14-24]。它们表现出各种独特的特性，如巨抗磁性[25]、平坦的朗道能级[26]和长程库仑相互作用[27]等[28]。此外，它们与许多新的拓扑相有关，因此是研究拓扑相变的理想平台[19]。近年来，三维狄拉克半金属在电子系统和经典波中都观察到了[19, 29-31]。在电子系统中，在没有自旋轨道耦合的情况下实现 DNLSs 是可能的[16-18]。同时，在自旋轨道耦合存在的情况下，它们的出现也可以被非点式对称性所保护[14, 15]。然而，迄今为止，光子体系 DNLS 还没有被实现。

单个具有 DNR 简并的 DNLS 在  $x$ - $y$  平面内的有效哈密顿量为：

$$H = \left[ (q_\rho - q_0) \sigma_x + q_z \sigma_z \right] \tau_0, \quad (4.1)$$

这里  $\tau_0$  是  $2 \times 2$  单位矩阵， $\sigma_x$  和  $\sigma_z$  代表泡利矩阵， $q_0$  对应 DNR 的半径，而  $q_\rho$

和  $q_z$  分别代表沿着径向和  $z$  方向的波矢。式 (4.1) 中哈密顿量表明在极角  $\hat{\rho}$  方向且  $q_\rho = q_0$  和  $q_z = 0$  处具有四重环型简并性。根据惯例, 我们用  $\sigma$  矩阵标识能带, 用  $\tau$  矩阵标识(赝)自旋。双重外尔 nodal line 简并可以很容易地由具有不同表示的特定对称性(如镜像对称、PT 对称或滑移对称[14])的两个相交能带构造。然而, 将双重外尔线简并扩展到四重 DNR 简并不是一件容易的事情。目前, 经典波中的所有 nodal line 半金属均为双重简并外尔 nodal line 半金属[24, 32–34], 而尚未出现 DNLS。对于光, 赝自旋自由度对应光子偏振, 原则上可以通过设置  $\varepsilon = \mu$  使不同偏振态的光响应一致。然而, 这在实验上是不切实际的。此外, 晶格对称性仅在能带高对称点上有高维表示。由于费米子(电子)和玻色子(光子)之间的固有区别, 保护电子 DNR 的非点式对称性对光子不起作用。具体来说, 费米子的时间反演算符的平方为-1, 而玻色子的时间反演算符的为+1。因此, 为构造光学 DNLS, 我们建立了一种全新的体制使得在一定的参数范围内  $\tau_{x,y,z}$  前面系数为 0。

## 4.2 光学狄拉克 nodal line 半金属的实现

本节中我们将详细阐述如何构造光学 DNLS, 并证明其色散具有四重 type-II 型 DNR 简并。

我们的系统是一个双层 AB 型一维光子晶体 (photonic crystal, 记作 PC), 其中 A 层材料为  $\text{SiO}_2$  ( $\varepsilon_A \approx 2.18$ ), 厚度为  $d_A$ ; B 层材料为  $\text{Ta}_2\text{O}_5$  ( $\varepsilon_B \approx 5.06$ ), 厚度为  $d_B$ 。该结构样品可以用电子束蒸发制作。图 4.1a 展示了样品的扫描电镜照片 (SEM)。虽然它构造简单, 但本节将证明该系统可以视作一个光学 DNLS。

### 4.2.1 能带的相交条件

首先, 我们研究了系统能带的相交条件。对于垂直于面的方向 ( $k_x = k_y = 0$ ,  $k_x$  和  $k_y$  为面内波矢), 能带满足方程:

$$\begin{aligned} \cos(k_z \Lambda) &= \cos(k_0 n_A d_A) \cos(k_0 n_B d_B) \\ &\quad - \frac{1}{2} \left( \frac{\zeta_A}{\zeta_B} + \frac{\zeta_B}{\zeta_A} \right) \sin(k_0 n_A d_A) \sin(k_0 n_B d_B), \end{aligned} \quad (4.2)$$

其中  $\Lambda$  为 PC 周期单元长度,  $k_z$  为垂直于层面的布洛赫波矢,  $k_0$  是真空中波矢。 $\zeta_i = \sqrt{\mu_i / \varepsilon_i}$ 、 $n_i$  和  $d_i$  分别表示  $i$  层 ( $i = A$  or  $B$ ) 的阻抗、折射率和厚度。对于垂直入射情况, TE (横电场) 和 TM (横磁场) 模式 (即光子两个赝自旋) 的色散是相同的。简并会发生在  $n_A d_A / n_B d_B = m_1 / m_2 \in \mathbb{Q}$ , 其中  $\{m_1, m_2\} \in \mathbb{N}^+$ 。因此, 第  $(m_1 + m_2)$  条和第  $(m_1 + m_2 + 1)$  条能带会在  $f_{m_1+m_2} = (m_1 + m_2)c / 2(n_A d_A + n_B d_B)$  相交, 这里  $c$  为真空中光速。需要注意的是, 能带是否相交与阻抗无关, 只取决于 A 和 B 两层中的光程比, 具体推导见[35]。

接下来, 我们证明上述相交条件可以推广到非垂直方向。由于系统在  $x$ - $y$  平面内是各向同性的, 为了简单起见, 我们此时设  $k_y = 0$ 。对于 TE 偏振模式, 任意  $k_x$  所对应的能带满足:

$$\begin{aligned} \cos(k_z \Lambda) &= \cos(k_{zA} d_A) \cos(k_{zB} d_B) \\ &\quad - \frac{1}{2} \left( \frac{\mu_B k_{zA}}{\mu_A k_{zB}} + \frac{\mu_A k_{zB}}{\mu_B k_{zA}} \right) \sin(k_{zA} d_A) \sin(k_{zB} d_B); \end{aligned} \quad (4.3)$$

而对于 TM 偏振模式, 有:

$$\begin{aligned} \cos(k_z \Lambda) &= \cos(k_{zA} d_A) \cos(k_{zB} d_B) \\ &\quad - \frac{1}{2} \left( \frac{\varepsilon_B k_{zA}}{\varepsilon_A k_{zB}} + \frac{\varepsilon_A k_{zB}}{\varepsilon_B k_{zA}} \right) \sin(k_{zA} d_A) \sin(k_{zB} d_B). \end{aligned} \quad (4.4)$$

这里,  $k_{zi} = \sqrt{k_i^2 - k_x^2}$  ( $i = A$  or  $B$ )。注意到式(4.3)和式(4.4)中的  $k_{zi}$  只取决于  $k_x$ 。对于垂直方向,  $k_{zi}$  正比于  $n_i$ , 即  $k_{zi} = n_i k_0$ 。至于非垂直方向, 我们定义了描述沿  $z$  方向传播相位延迟的有效折射率:

$$\tilde{n}_i = \sqrt{\varepsilon_i \mu_i - k_x^2 / k_0^2} \quad (4.5)$$

进而有  $k_{zi} = \sqrt{k_i^2 - k_x^2} = \tilde{n}_i k_0$ 。将式(4.3)和式(4.4)与式(4.2)相比, 我们发现如果我们重新定义  $\tilde{\zeta}_i^{\text{TE}} \equiv \mu_i / \tilde{n}_i$  及  $\tilde{\zeta}_i^{\text{TM}} \equiv \tilde{n}_i / \varepsilon_i$  ( $i = A$  or  $B$ ), 三个方程的形式完全一样。因此, 式(4.3)和式(4.4)所描述的非垂直方向上的能带相交条件, 可以通过把垂直时条件里的  $n_i$  换成  $\tilde{n}_i$  获得, 即:

$$\tilde{n}_A d_A / \tilde{n}_B d_B = m_1 / m_2 \in \mathbb{Q} . \quad (4.6)$$

从而第  $(m_1 + m_2)$  条和第  $(m_1 + m_2 + 1)$  条能带会相交于：

$$f_{m_1+m_2} = (m_1 + m_2) c / 2 (\tilde{n}_A d_A + \tilde{n}_B d_B) . \quad (4.7)$$

需要强调的是，式(4.6)和式(4.7)同时适用于 TE 和 TM 偏振，因此对任意  $k_x$  得到的是四重简并点。另一方面，这种能带简并的存在不是偶然的。它不需要指定材料也不依赖于材料的色散。而通过改变所选材料的  $d_A$  和  $d_B$ ，可以轻易地调控一定频率下发生四重简并的  $k_x$ 。

另外，由于我们的系统具有时间反演对称性，并且在平面内是各向同性的，所以对任意的  $k_x$ ， $k_z$  方向能带色散相对于  $k_z = 0$  是对称的。于是，对特定的  $k_x$ ， $k_z$  方向能带在  $k_z > 0$  或  $k_z < 0$  应是关于  $k_z$  的单调函数，否则若在色散的非单调区间，一个频率至少得到四个  $k_z$  ( $k_z > 0$  和  $k_z < 0$  各两个)。这与式(4.3)和式(4.4)是矛盾的，因为对于每个频率，式(4.3)或式(4.4)的等号右侧是单值的，因此我们等号左边的表达式里最多有两个  $k_x$  (一个正，一个负)。因此，我们得出结论，即对任意一个  $k_x$ ，能带的简并点只能出现在布里渊区边界 ( $k_z = \pi/\Lambda$ ) 或中心 ( $k_z = 0$ )。除了上述简并，对于 TM 偏振，在非垂直方向上还有阻抗匹配引起的在布鲁斯特角处的简并 (本章工作不关注所以不再赘述)。

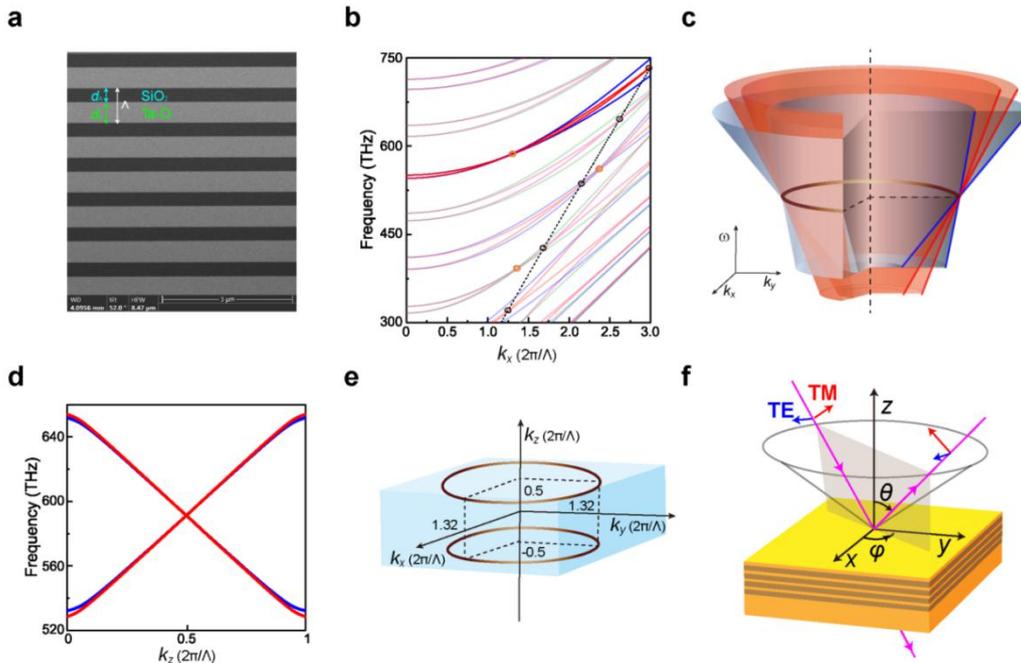


图 4.1 光学 DNLS。(a) PC 样品的 SEM 照片。(b)  $k_z = 0$  (绿色和洋红色) 和  $k_z = \pi/\Lambda$  (红

色和蓝色) 下沿  $k_x$  方向的色散。蓝色和品红色的线代表 TE 偏振, 而红色和绿色的线代表 TM 偏振。除我们研究的 DNR 对应的能带外, 其他能带都是半透明的。黑色虚线表示布鲁斯特角的轨迹。两个偏振(布鲁斯特角)的能带简并点用橙色(黑色)圆圈圈出。(c) DNR 附近的面内色散示意图(金色)。DNR 是四重简并的, 它由 TE(蓝色)和 TM(红色)偏振对应的两组 type-II 外尔 nodal rings 组成。(d) TE(蓝色)和 TM(红色)偏振模式在四重简并点附近沿  $k_z$  方向的色散。(e) 倒空间内 DNR 的位置。(f) 实验设置。A(B)层材料是  $\text{SiO}_2$  ( $\text{Ta}_2\text{O}_5$ ), 厚度为  $d_A = 388\text{nm}$  ( $d_B = 597\text{nm}$ )。  $\text{SiO}_2$  ( $\text{Ta}_2\text{O}_5$ ) 的折射率约为 1.48 (2.25), 在我们研究的可见光频段色散很小。

#### 4.2.2 光学 type-II 型狄拉克 nodal ring

基于 4.2.1 节的推导分析, 可知若要研究能带简并, 只需要固定  $k_y = 0$  作出  $k_z = 0$  和  $k_z = \pi/\Lambda$  时的  $k_x$  方向色散, 如图 4.1b 所示。其中, 橙色圆标记的是满足式(4.7)的四重简并点, 而黑色圆标的是 TM 模式在布鲁斯特角处的简并。后者几乎沿着一条直线(黑色虚线), 是因为在我们研究频段材料色散很小。

在这里, 我们关注其中一个四重简并, 其频率大约为 591THz。考虑到我们的系统具有旋转不变性, 那么如果在  $k_x = k_{\rho D}$  且  $k_y = 0$  时发生简并, 那么在所有  $k_{\rho D} \equiv \sqrt{k_x^2 + k_y^2}$  出都会有简并出现, 从而形成一个四重环形简并。图 4.1c 画出了  $k_x - k_y$  平面内色散示意图, 简并发生在  $k_{\rho D} = 1.32(2\pi/\Lambda)$  附近。可以看出两个线性 TM(红色)能带被两个线性 TE(蓝色)能带所夹, 并且所有能带都在  $k_{\rho D}$  处简并(金色圆环)。此外, 这四个能带的斜率沿面内的径向均为正。图 4.1d 展示了这个四重简并附近沿  $k_z$  方向的色散。可见, 所有能带在简并点周围都有线性的色散特性。因此, 我们证明了在  $k_{\rho D} = 1.32(2\pi/\Lambda)$ 、 $k_z = \pi/\Lambda$  以及  $f = 591\text{THz}$  处的具有四重 nodal line 简并的 DNR 的存在, 如图 4.1e 所示。结合图 4.1b 和图 4.1d 中的色散, 可以看出图 4.1 所展示的 DNSL 属于 type-II[36]。综上, AB 层状结构所固有的镜像对称性使得系统中每个偏振对应的环型简并得到了保护; 同时, 式(4.6)和式(4.7)保证了 TE 和 TM 之间的简并。

为了获得上述 type-II 型 DBR，我们设计了一个光学实验平台，其结构示意图画在了图 4.1f，这里我们分别用黄色和棕色来绘制  $\text{SiO}_2$  和  $\text{Ta}_2\text{O}_5$  构成的介质层。PC 的周期单元数是 12（图 4.1f 未直接画出）。TE 或 TM 偏振的光（洋红）到样品表面的入射角为  $\theta$ ，显然  $\theta$  决定了所激发的平行波矢  $k_{\rho D}$ 。在我们的实验中， $\theta$  可以由  $0^\circ$  增加到  $60^\circ$ ，并且通过灵活调控方位角  $\varphi$  来验证面内的各向同性。基于该实验设置，我们可以获得样品的透射和反射谱，它们作为  $f$ 、 $\theta$  和  $\varphi$  的函数而被讨论分析。

图 4.1e 展示的是  $k_z = \pi/\Lambda$  处的 DNR，但与电子系统中受非点式对称性保护的 DNLS 相比，在我们的系统中，DNLS 同时存在于  $k_z = 0$  和  $k_z = \pi/\Lambda$ 。接下来我们展示系统中的另一个 DNR，它位于  $k_z = 0$ 。这里选用的参数与图 4.1 一致，所研究的 DNR 在 400THz 左右（图 4.1b 中较低频率橙色圆）。图 4.2a 和图 4.2b 画出了在这个四重简并点附近沿  $k_x$  和  $k_z$  方向上的色散。又因为系统在  $x$ - $y$  平面内具有旋转不变性，因而我们得到了一个位于  $k_z = 0$  的 DNR，图 4.2c 给出了它的倒空间结构示意图。

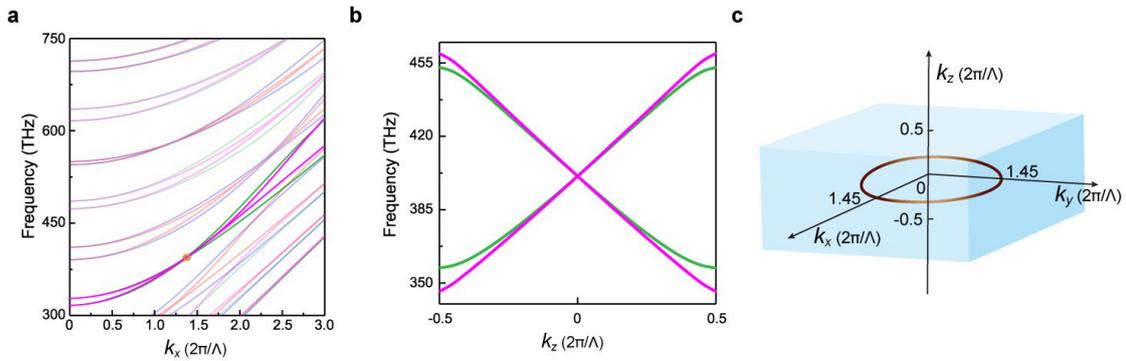


图 4.2  $k_z = 0$  处的 DNR。(a, b)  $k_z = 0$ （绿色和洋红色）处 DNR 附近沿  $k_x$  和  $k_z$  方向的色散，洋红色和蓝色（绿色和红色）代表 TE（TM）偏振的能带。(c) 倒空间内 DNR 的位置。系统材料和结构参数与图 4.1 相同。

### 4.3 光学狄拉克 nodal line 半金属的实验探测

#### 4.3.1 面内色散的探测

不失一般性，我们先研究  $\varphi = 0^\circ$  时即  $k_x$  方向的面内色散。图 4.3a 和图 4.3b 分别给出了 TE 和 TM 偏振光激发下的实验结果，而图 4.3c 和 4.3d 给出了对应模拟透射谱来进行比较（在这里及之后，透射谱和反射谱的模拟结果都是通过仿真软件 Lumerical FDTD 来建模获取的）。可见模拟与实验结果符合良好。由 4.2 节，沿  $k_z$  方向的色散是单调的，故在图 4.3 中法布里-珀罗干涉所引起的透射条纹充满了投影能带区域，该区域的边界对应应在  $k_z = \pi/\Lambda$  沿  $k_x$  方向的能带，由黑色虚线标出。因此，我们得到了  $\varphi = 0^\circ$  即沿  $k_x$  方向的色散。可以明显看出，对于 TE 和 TM 两个偏振，它们  $k_x$  方向的色散都在  $\theta = 44^\circ$  处线性相交。

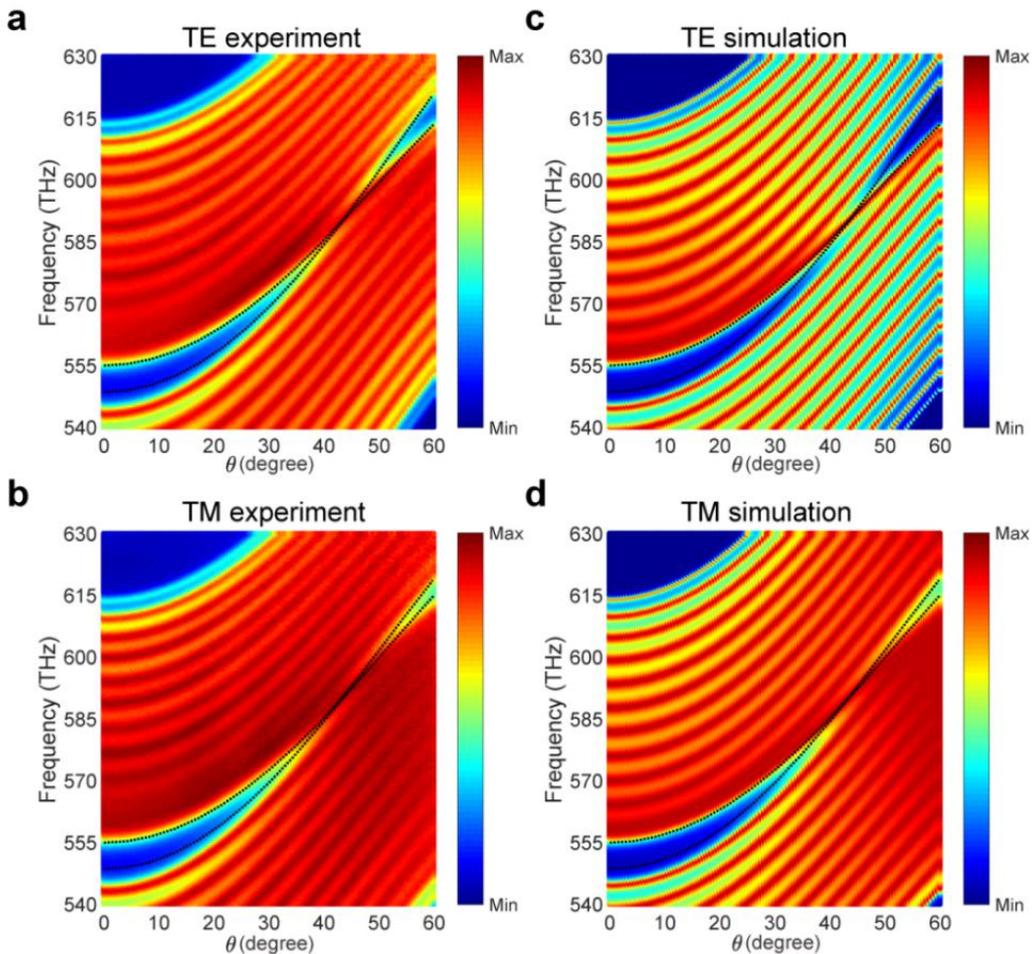


图 4.3 TE 和 TM 偏振光激发下，入射角从  $0^\circ$  变化到  $60^\circ$  的样品的 (a, b) 测量和 (c, d) 模拟

透射谱。透射图像填满的区域边界为在  $k_z = \pi/\Lambda$  处沿着  $k_x$  方向的能带（黑色虚线）。系统材料和结构参数与图 4.1 相同。

接着，我们测量了其他  $\varphi$  角下样品的透射谱。如图 4.4 所示，我们同时展示了  $\varphi = 0^\circ$ 、 $\varphi = 45^\circ$  以及  $\varphi = 90^\circ$  时的透射谱，可见对任一偏振它们几乎相同。因此，样品的面内各向同性得到了充分的验证。

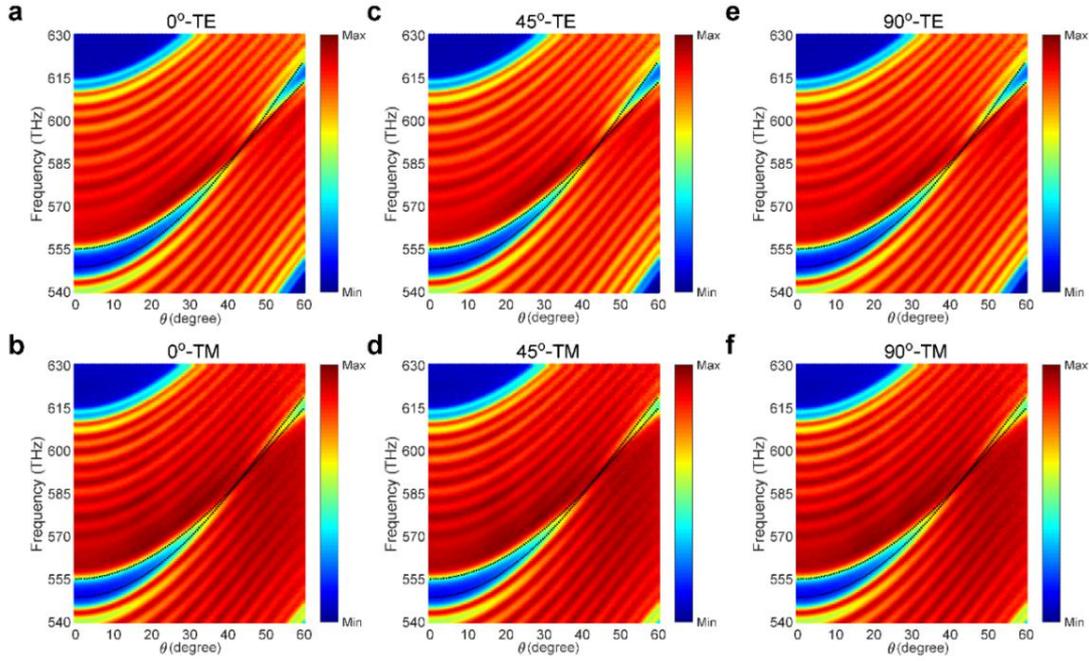


图 4.4 TE 和 TM 偏振光激发下，入射角从  $0^\circ$  变化到  $60^\circ$  的样品的测量透射谱。其中，(a, b)、(c, d) 以及 (e, f) 分别为  $\varphi = 0^\circ$ 、 $\varphi = 45^\circ$  和  $\varphi = 90^\circ$  的透射谱。透射图像填满的区域边界为在  $k_z = \pi/\Lambda$  处沿着  $k_x$  方向的能带（黑色虚线）。系统材料和结构参数与图 4.1 相同。

### 4.3.2 垂直于面方向的色散提取

透射谱上的条纹图案本质上源于布洛赫模式的法布里-珀罗干涉，本节详细介绍了我们是如何巧妙利用透射条纹来提取 DNSL 沿  $k_z$  方向的色散的。

首先，为了获得 DNR 简并附近沿  $k_z$  方向的色散，我们需要固定水平波矢即  $k_{\rho D} = 1.32(2\pi/\Lambda)$  下的透射谱。但实验上数据是在固定入射角下测量的，因此

我们先对测量的透射谱（选用图 4.3，即  $\varphi = 0^\circ$  时结果）进行平滑插值，然后提取固定  $k_{\rho D} = 1.32(2\pi/\Lambda)$  下的透射数据，结果如图 4.5a。

接下来，我们研究透射峰值所满足的条件。图 4.5b 绘制了系统结构示意图，PC 的周期单元数  $N = 12$ 。特定  $k_z$  下的法布里-珀罗干涉条纹实际上来自多个布洛赫模式的干涉。利用转移矩阵法，我们得到了系统的反射和透射系数：

$$R = \left| \frac{(\chi_1 - 1) \sin[(N-1)k_z \Lambda] - (\chi_1(\chi_2 + \chi_3) - \chi_2 + \chi_3) \sin(Nk_z \Lambda)}{(\chi_1 + 1) \sin[(N-1)k_z \Lambda] - (\chi_1(\chi_2 + \chi_3) + \chi_2 - \chi_3) \sin(Nk_z \Lambda)} \right|^2 \quad (4.8)$$

以及

$$T = 1 - R. \quad (4.9)$$

其中，对于 TE 偏振：

$$\begin{cases} \chi_2^{\text{TE}} = \frac{k_{z0}}{k_{zA}} \\ \chi_2^{\text{TE}} = e^{ik_{zA}d_A} \left( \cos(k_{zB}d_B) + \frac{i}{2} \left( \frac{\tilde{\zeta}_A^{\text{TE}}}{\tilde{\zeta}_B^{\text{TE}}} + \frac{\tilde{\zeta}_B^{\text{TE}}}{\tilde{\zeta}_A^{\text{TE}}} \right) \sin(k_{zB}d_B) \right), \\ \chi_3^{\text{TE}} = e^{ik_{zA}d_A} \left( -\frac{i}{2} \left( \frac{\tilde{\zeta}_A^{\text{TE}}}{\tilde{\zeta}_B^{\text{TE}}} - \frac{\tilde{\zeta}_B^{\text{TE}}}{\tilde{\zeta}_A^{\text{TE}}} \right) \sin(k_{zB}d_B) \right) \end{cases}, \quad (4.10)$$

对于 TM 偏振：

$$\begin{cases} \chi_2^{\text{TM}} = \frac{n_A^2 k_{z0}}{n_0^2 k_{zA}} \\ \chi_2^{\text{TM}} = e^{ik_{zA}d_A} \left( \cos(k_{zB}d_B) + \frac{i}{2} \left( \frac{\tilde{\zeta}_A^{\text{TM}}}{\tilde{\zeta}_B^{\text{TM}}} + \frac{\tilde{\zeta}_B^{\text{TM}}}{\tilde{\zeta}_A^{\text{TM}}} \right) \sin(k_{zB}d_B) \right), \\ \chi_3^{\text{TM}} = e^{ik_{zA}d_A} \left( -\frac{i}{2} \left( \frac{\tilde{\zeta}_A^{\text{TM}}}{\tilde{\zeta}_B^{\text{TM}}} - \frac{\tilde{\zeta}_B^{\text{TM}}}{\tilde{\zeta}_A^{\text{TM}}} \right) \sin(k_{zB}d_B) \right) \end{cases}. \quad (4.11)$$

这里， $k_{z0}$  是空气中  $z$  方向波矢。图 4.5c 比较了解析结果(实线)与模拟结果(空心圆)，二者基本吻合。根据式(4.9)，透射峰出现在：

$$\sin(Nk_z \Lambda) = 0, \quad (4.12)$$

等价于：

$$Nk_z \Lambda = m\pi, \quad (4.13)$$

此处  $m$  为整数。在式(4.13)条件下, 透射极大值可化作:

$$T_{\max} = \frac{4\chi_1}{(1 + \chi_1)^2}. \quad (4.14)$$

$T_{\max}$  随频率变化的曲线也在图 4.5c 中用虚线画出以作比较。

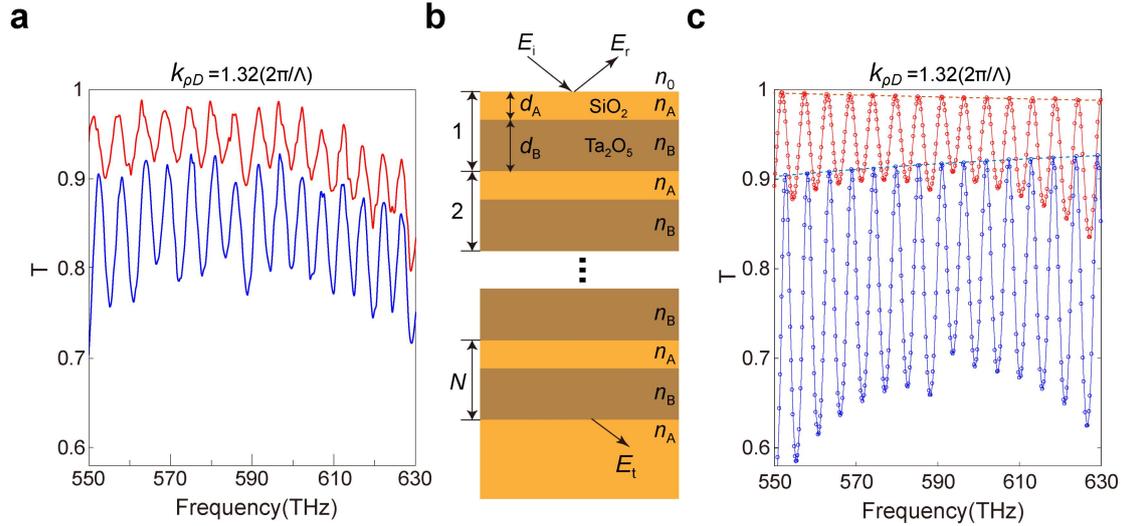


图 4.5 (a) TE (蓝色) 和 TM(红色) 偏振光激发下, 固定  $k_{\rho D} = 1.32(2\pi/\Lambda)$  获得的测量透射谱。(b) 系统结构示意图。其中, 平面波从样品上方空气 ( $n_0 = 1$ ) 中入射, 透射光进入  $\text{SiO}_2$  衬底。入射光、反射光和透射光的电场振幅分别用  $E_i$ 、 $E_r$  和  $E_t$  表示。(c)  $k_{\rho D} = 1.32(2\pi/\Lambda)$  时透射谱的解析(实线)和模拟(空心圆)结果, 以及 TE(蓝色)和 TM(红色)下的  $T_{\max}$  函数(虚线)。

由上述分析可知, 式(4.13)建立了布洛赫波矢  $k_z$  与  $T$  达到峰值时所对应频率之间的关系, 由此我们可以获得在  $k_x = k_{\rho D}$  且  $\varphi = 0^\circ$  时, DNR 附近沿  $k_z$  方向的色散。图 4.6a 和图 4.6b 分别展示了所提取的 TE 和 TM 偏振模式的能带。

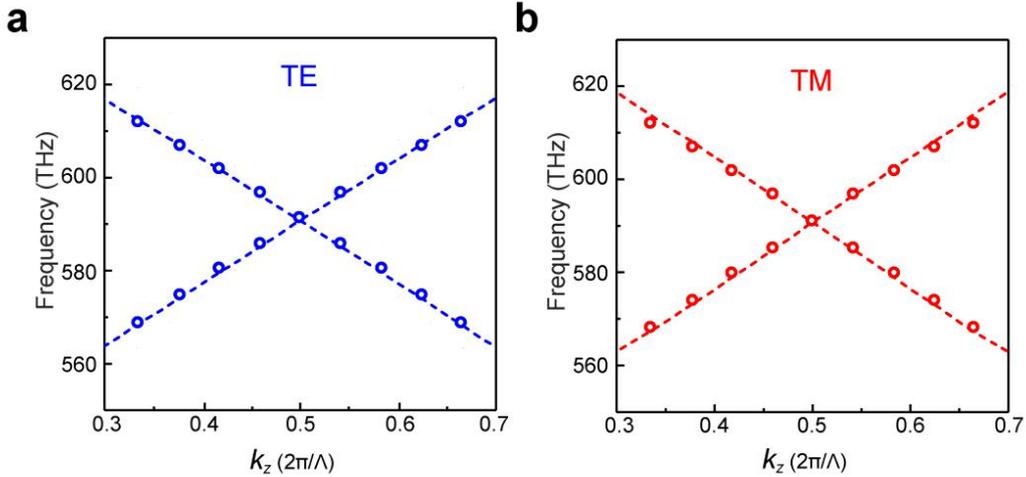


图 4.6 DNR 附近沿  $k_z$  方向的色散，由 (a) TE 和 (b) TM 偏振的法布里-珀罗干涉条纹中提取。其中空心圆从透射极大值处获取。虚线是理论解析结果。系统材料和结构参数与图 4.1 相同。

#### 4.4 四重简并的 double-bowl 表面态

除了具有拓扑保护的体能带简并外，由于存在新颖的拓扑表面态，如费米弧（Fermi arc）和鼓面表面态（drumhead surface state），拓扑半金属因而得到更为广泛和深入的研究。然而，表面态通常只存在于较小的频率和波矢范围内，并且也很难具有自旋或偏振简并。在本节中，我们将证明我们的系统可以得到宽带、偏振简并（即四重简并）的表面态，它可以在被灵活调控的同时依然保持简并。又因为它的色散像碗，故我们称之为 double-bowl 表面态（DBS）。DBS 的存在不仅依赖于系统 DNR 简并，还依赖于其在  $\Gamma$  点（ $k_x = 0, k_y = 0$ ）具有旋转对称性。

为了证明这一点，我们在 PC 上镀了一层厚度为 25nm 的银膜。于是，在银膜和 PC 之间的界面上存在塔姆型(Tamm-like)表面态。而因为已有的一个 DNR，这些塔姆型表面态存在两个偏振模式。在这里我们没有把银膜镀在完整周期单元的截断 PC 上，而是特意在完整单元上多镀了半层 B，再在其上镀银。因而，此时该复合系统能被激发出两个偏振的表面模式。如图 4.7a 和图 4.7b 所示，我们分别展示了具有三个不同  $n_A d_A / n_B d_B$  值的系统中 TE 和 TM 偏振模式的表面态。

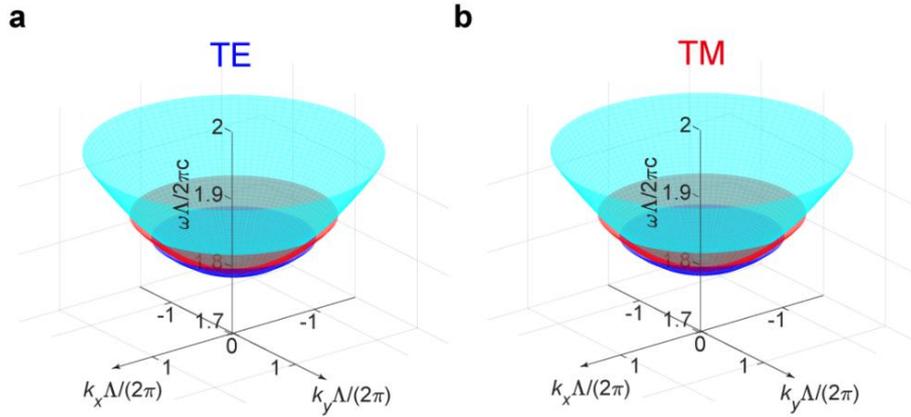


图 4.7 (a)TE 和 (b)TM 偏振的“碗状”表面态。其中青色、红色和蓝色曲面分别对应  $n_A d_A / n_B d_B$  等于 0.442、0.422 和 0.415 的情况。在模拟计算时， $n_A d_A + n_B d_B$  保持不变；在实验中，我们选取的 PC 样品对应  $n_A d_A / n_B d_B$  为 0.442。

另一方面，除固有的 DNR 简并外，由于在  $\Gamma$  点 ( $k_x = 0, k_y = 0$ ) 受旋转对称性保护 TE 和 TM 模式简并，其表面态在  $\Gamma$  处是四重简并的。由于旋转对称保护的表面节点  $\Gamma$  点 (surface nodal point, 记作 SNP) 在光谱里远离 DNR，且总是低于 DNR 频率，因此导致的表面态是宽频的，并具有“碗状”色散的特征。故我们将这种新型的表面态称为 DBS。此外，由于 TE 和 TM 偏振在 DNR 和 SNP 都简并，使得引起的表面态在整个测量光谱范围内几乎是简并的。如图 4.8 所示，TE 和 TM 偏振的表面态色散几乎重合。这一特征不同于以往所有的拓扑表面态：以前的拓扑表面态都只是由单一类型的拓扑简并 (nodal point 或 nodal line) 所给定的。

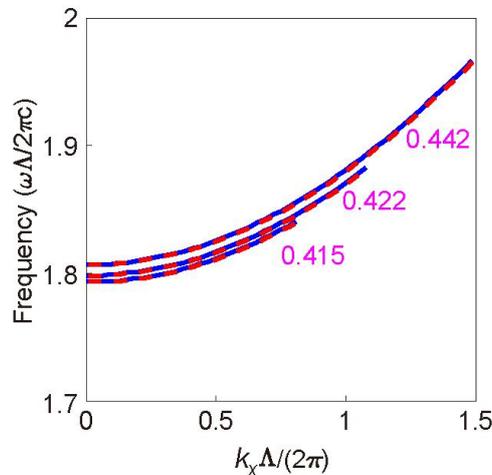


图 4.8 DBS 沿  $k_x$  方向的轨迹。其中蓝色实线（红色虚线）分别代表 TE 和 TM 偏振表面态。

从上往下,  $n_A d_A / n_B d_B$  依次为 0.442、0.422 和 0.415。三种情况  $n_A d_A + n_B d_B$  相同。

综上, 我们的系统可作为产生任意偏振表面态的理想平台。众所周知, 实现 TE 和 TM 偏振模式的宽带简并是很有挑战性的。在所有其他波导体系, 如介质波导和表面等离子体波导中的宽带简并仍然难以实现。因此, 这种存于我们系统中的固有简并性赋予了我们更多操纵光子的自由, 并为利用光与物质的相互作用来探索偏振态开拓了新的途径。

实验上, DBS 的色散可以用反射谱来观测。图 4.9 展示了两种偏振下的反射谱的实验和模拟结果。可以观察到, 在原来的体能带带隙 (以黑色虚线为界) 中新出现了一个反射极小值。因而, 反射极小值的出现直接证明了 DBS 的存在。同时我们也数值计算了该样品 DBS 的色散, 其结果用图 4.9 中的黑色实线描绘。由于黑色实线与反射极小完全重合, 这进一步证实了我们的理论。

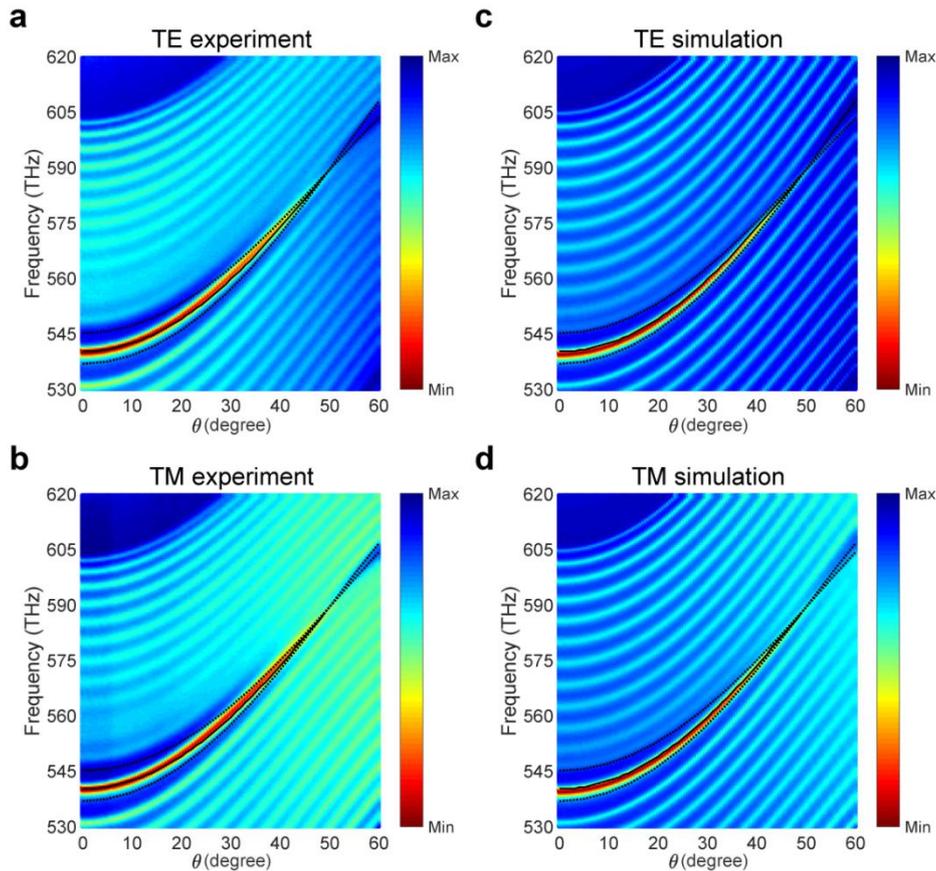


图 4.9 TE 和 TM 偏振光激发下, 入射角从  $0^\circ$  变化到  $60^\circ$  的银膜/PC 样品的 (a, b) 测量 (c, d) 模拟反射谱。黑色实线展示了 DBS 色散的数值模拟结果, 而黑色虚线标出了 PC 体能带色散。PC 的材料与图 4.1 中相同, 但厚度略有不同:  $d_A = 402\text{nm}$ ,  $d_B = 605\text{nm}$ 。截断 PC

的最上层为 B 层，其厚度为  $d_B/2$ 。PC 上方所镀银膜的厚度是  $25\text{nm}(\pm 5\text{nm})$ 。

## 4.5 其他塔姆型表面态

在本节中，我们将证明除了 4.4 节所述的 DBS 以外，我们的 PC 系统还可以实现其他塔姆型表面态。具体来说，基于不同的 PC 截断界面，我们系统中的塔姆型表面态轨迹既可以由  $\Gamma$  点延伸到 DNR 处（如图 4.7-4.9，即 DBS），也可以从 DNR 处延伸到无穷远，亦或二者皆存在。这里我们就除 DBS 外的两种情况，分别示例加以讨论。

首先，我们制作了另一个 PC 样品，其截断处是完整的 A 层(其他参数与图 4.9 中使用的样品相同)，并在其上镀了一个  $25\text{nm}$  的银膜。通过角分辨透射测量，我们观测到了从 DNR 延伸到无穷远处的表面态，对应图 4.10 中体带隙(以黑色虚线为界)内的透射峰值。

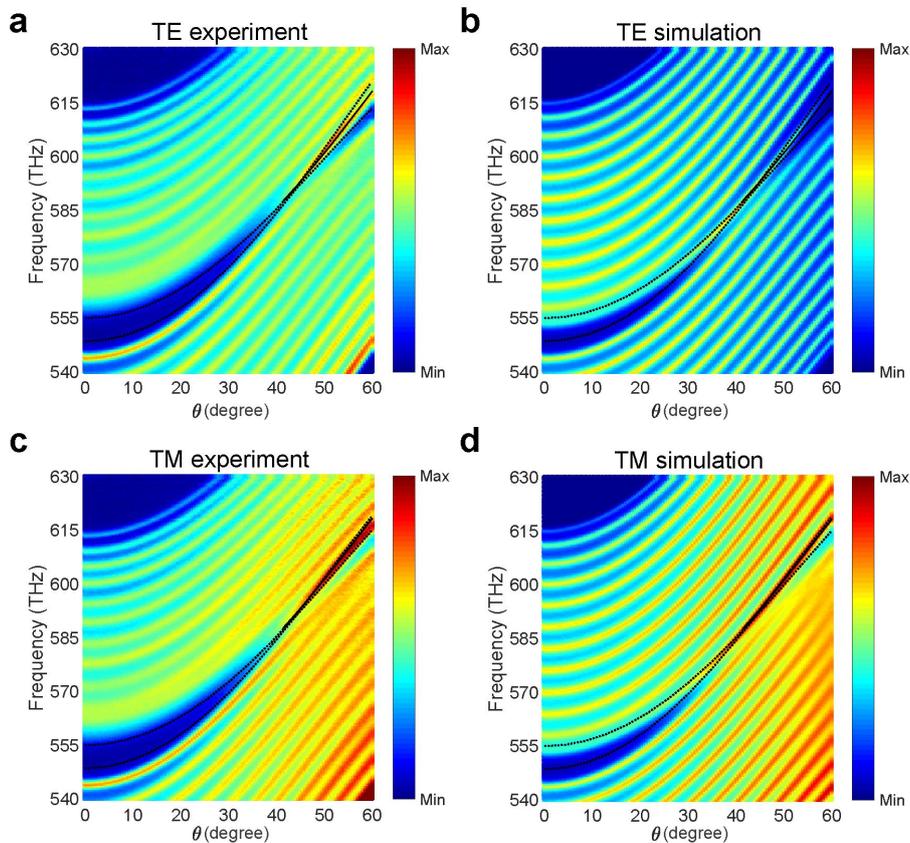


图 4.10 TE 和 TM 偏振光激发下，入射角从  $0^\circ$  变化到  $60^\circ$  的银膜/PC 样品的 (a, c) 测量 (b, d) 模拟结果。

d) 模拟透射谱。黑色实线展示了 DBS 色散的数值模拟结果，而黑色虚线标出了 PC 体能带色散。PC 的材料和几何参数与图 4.9 中相同，而截断 PC 的最上层为 A 层，其厚度为  $d_A$ 。PC 上方所镀膜膜的厚度是  $25\text{nm}(\pm 5\text{nm})$ 。

其次，当把银膜换成的另一个 PC 结构(即两个光学 DNSLs 相连)，可以发现此时的系统既能存在 DBS，也能出现从 DNR 衍生到无穷远的表面态。这里两个 PC 结构的材料和几何参数是一样的，唯一的区别是截断位置。如图 4.11a 所示，与上述银膜/PC 系统相比，银膜被另一个首层是 A 且厚度为  $d_A / 2$  的光学 DNSL 所替代。此外，我们假设这两个光学 DNSLs 都是半无限的。图 4.11b 给出了投影能带和带隙中塔姆型表面态，其中蓝(红)区域表示 TE(TM)偏振的投影能带，实线表示局域在两个光学 DNLSs 之间的表面态轨迹。由此可见，这种结构确实能存在两组表面态：一组是 DBS，另一组表面态则从 DNR 延伸到无穷远。

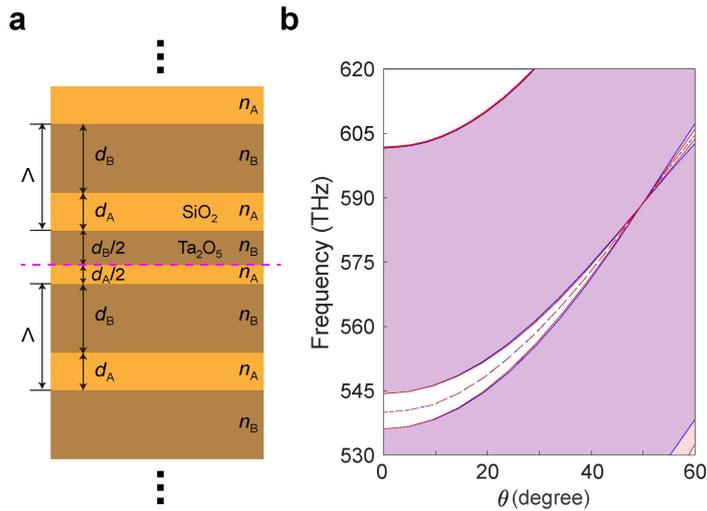


图 4.11 (a) 两个相同光学 DNSLs(截面不同)形成的界面。(b) 投影能带和表面态色散。这里红色和蓝色区域分别代表 TE 和 TM 偏振的投影能带，蓝色(红色)虚线是 TE(TM)偏振时表面态的色散。两个 PC 的材料和周期结构参数与图 4.9 相同，一个在  $d_B/2$  处截断，另一个在  $d_A/2$  截断。

## 4.6 本章小结

在本章中，我们利用光子晶体的对称性和光子赝自旋，提供了一种全新而简

易的机制首次实现了严格的光学狄拉克 nodal line 半金属 (DNLS)，这种 DNLS 是光子系统所特有的，其具备四重简并的狄拉克 nodal ring (DNR)。通过实验，我们验证了光频 type-II 型 DNLS 的存在。在 DNR 附近的色散是通过角度分辨透射测量得到的。而当光学 DNLS 被适当地截断并在其上镀一层银膜时，复合系统界面上出现的 TE 和 TM 偏振的两组表面态是宽带简并的。因其色散似碗，我们称之为 double-bowl 表面态 (DBS)。DBS 可用角度分辨反射谱的来识别。另外，若使用另一种截断位置不同的光学 DNLS 代替银膜，也能获得 TE 和 TM 偏振宽带简并的 DBS，以及其他类型的塔姆表面态。

本章的研究表明，光子拓扑系统不能被无自旋空间群充分分类，因而研究拓扑光子态时应考虑光子内禀自旋。同时，在应用方面，考虑到由表面态引起的强局域场增强，我们的系统可被视作是研究需强场增强现象的理想平台，例如腔极化子和非线性光学现象。此外，由于 TE 和 TM 偏振的 DBS 在很宽的光谱范围内几乎简并，故我们的平台在研究凝聚态系统中圆偏振光子与极化子或谷电子之间的光物质相互作用方面显示出独特的优势，比如微腔中的自旋极化子[37]或 MoS<sub>2</sub> 中的谷电子[38]。

## 参考文献

- [1] Qi, X. L., Zhang, S. C. Topological insulators and superconductors. *Reviews of Modern Physics*, **83** 1057(2011).
- [2] Hasan, M. Z., Kane, C. L. Colloquium: Topological insulators. *Reviews of Modern Physics*, **82** 3045(2010).
- [3] Lu, L., Fu, L., Joannopoulos, J. D., Soljacic, M. Weyl points and line nodes in gyroid photonic crystals. *Nature Photonics*, **7** 294(2013).
- [4] Lu, L., Wang, Z. Y., Ye, D. X., Ran, L. X., Fu, L., Joannopoulos, J. D., *et al.* Experimental observation of Weyl points. *Science*, **349** 622(2015).
- [5] Ozawa, T., Price, H. M., Amo, A., Goldman, N., Hafezi, M., Lu, L., *et al.* Topological photonics. *Reviews of Modern Physics*, **91** 015006(2019).
- [6] Ma, G. C., Xiao, M., Chan, C. T. Topological phases in acoustic and mechanical systems. *Nature Reviews Physics*, **1** 281(2019).
- [7] Chiu, C. K., Teo, J. C. Y., Schnyder, A. P., Ryu, S. Classification of topological quantum matter with symmetries. *Reviews of Modern Physics*, **88** (2016).
- [8] Bradlyn, B., Elcoro, L., Cano, J., Vergniory, M. G., Wang, Z. J., Felser, C., *et al.* Topological quantum chemistry. *Nature*, **547** 298(2017).
- [9] Tang, F., Po, H. C., Vishwanath, A., Wan, X. G. Comprehensive search for topological materials using symmetry indicators. *Nature*, **566** 486(2019).
- [10] Vergniory, M. G., Elcoro, L., Felser, C., Regnault, N., Bernevig, B. A., Wang, Z. J. A complete catalogue of high-quality topological materials. *Nature*, **566** 480(2019).
- [11] Zhang, T. T., Jiang, Y., Song, Z. D., Huang, H., He, Y. Q., Fang, Z., *et al.* Catalogue of topological electronic materials. *Nature*, **566** 475(2019).
- [12] Watanabe, H., Lu, L. Space Group Theory of Photonic Bands. *Physical Review Letters*, **121** 203903(2018).
- [13] Xiong, Z. F., Zhang, R. Y., Yu, R., Chan, C. T., Chen, Y. T. Hidden-symmetry-enforced nexus points of nodal lines in layer-stacked dielectric photonic crystals. *Light-Science & Applications*, **9** 176(2020).
- [14] Fang, C., Chen, Y. G., Kee, H. Y., Fu, L. Topological nodal line semimetals with and without spin-orbital coupling. *Physical Review B*, **92** 081201(R)(2015).
- [15] Carter, J. M., Shankar, V. V., Zeb, M. A., Kee, H. Y. Semimetal and Topological Insulator in Perovskite Iridates. *Physical Review B*, **85** 115105(2012).

- [16] Kim, Y., Wieder, B. J., Kane, C. L., Rappe, A. M. Dirac Line Nodes in Inversion-Symmetric Crystals. *Physical Review Letters*, **115** 03224(2015).
- [17] Weng, H. M., Liang, Y. Y., Xu, Q. N., Yu, R., Fang, Z., Dai, X., *et al.* Topological node-line semimetal in three-dimensional graphene networks. *Physical Review B*, **92** 036806(2015).
- [18] Mullen, K., Uchoa, B., Glatzhofer, D. T. Line of Dirac Nodes in Hyperhoneycomb Lattices. *Physical Review Letters*, **115** 026403(2015).
- [19] Liu, Z. K., Zhou, B., Zhang, Y., Wang, Z. J., Weng, H. M., Prabhakaran, D., *et al.* Discovery of a Three-Dimensional Topological Dirac Semimetal, Na<sub>3</sub>Bi. *Science*, **343** 864(2014).
- [20] Xu, S. Y., Belopolski, I., Alidoust, N., Neupane, M., Bian, G., Zhang, C. L., *et al.* Discovery of a Weyl fermion semimetal and topological Fermi arcs. *Science*, **349** 613(2015).
- [21] Burkov, A. A., Hook, M. D., Balents, L. Topological nodal semimetals. *Physical Review B*, **84** 235126(2011).
- [22] Xiao, M., Ye, L. P., Qiu, C. Y., He, H. L., Liu, Z. Y., Fan, S. H. Experimental demonstration of acoustic semimetal with topologically charged nodal surface. *Science Advances*, **6** eaav2360(2020).
- [23] Belopolski, I., Manna, K., Sanchez, D. S., Chang, G. Q., Ernst, B., Yin, J. X., *et al.* Discovery of topological Weyl fermion lines and drumhead surface states in a room temperature magnet. *Science*, **365** 1278(2019).
- [24] Yan, Q. H., Liu, R. J., Yan, Z. B., Liu, B. Y., Chen, H. S., Wang, Z., *et al.* Experimental discovery of nodal chains. *Nature Physics*, **14** 461(2018).
- [25] Zhang, A. M., Liu, C. L., Yi, C. J., Zhao, G. H., Xia, T. L., Ji, J. T., *et al.* Interplay of Dirac electrons and magnetism in CaMnBi<sub>2</sub> and SrMnBi<sub>2</sub>. *Nature Communications*, **7** 13833(2016).
- [26] Rhim, J. W., Kim, Y. B. Landau level quantization and almost flat modes in three-dimensional semimetals with nodal ring spectra. *Physical Review B*, **92** 045126(2015).
- [27] Huh, Y., Moon, E. G., Kim, Y. B. Long-range Coulomb interaction in nodal-ring semimetals. *Physical Review B*, **93** 035138(2016).
- [28] Shao, Y. M., Rudenko, A. N., Hu, J., Sun, Z. Y., Zhu, Y. L., Moon, S., *et al.* Electronic correlations in nodal-line semimetals. *Nature Physics*, **16** 636(2020).
- [29] Guo, Q. H., You, O. B., Yang, B., Sellman, J. B., Blythe, E., Liu, H. C., *et al.*

Observation of Three-Dimensional Photonic Dirac Points and Spin-Polarized Surface Arcs. *Physical Review Letters*, **122** 203903(2019).

[30] Cai, X. X., Ye, L. P., Qiu, C. Y., Xiao, M., Yu, R., Ke, M. Z., *et al.*

Symmetry-enforced three-dimensional Dirac phononic crystals. *Light-Science & Applications*, **9** 38(2020).

[31] Cheng, H. B., Sha, Y. X., Liu, R. J., Fang, C., Lu, L. Discovering Topological Surface States of Dirac Points. *Physical Review Letters*, **124** 104304(2020).

[32] Deng, W. Y., Lu, J. Y., Li, F., Huang, X. Q., Yan, M., Ma, J. H., *et al.* Nodal rings and drumhead surface states in phononic crystals. *Nature Communications*, **10** 1769(2019).

[33] Qiu, H. H., Qiu, C. Y., Yu, R., Xiao, M., He, H. L., Ye, L. P., *et al.* Straight nodal lines and waterslide surface states observed in acoustic metacrystals. *Physical Review B*, **100** 041303(R)(2019).

[34] Yang, E. C., Yang, B., You, O. B., Chan, H. C., Mao, P., Guo, Q. H., *et al.*

Observation of Non-Abelian Nodal Links in Photonics. *Physical Review Letters*, **125** 033901(2020).

[35] Xiao, M., Zhang, Z. Q., Chan, C. T. Surface Impedance and Bulk Band Geometric Phases in One-Dimensional Systems. *Physical Review X*, **4** 021017(2014).

[36] Soluyanov, A. A., Gresch, D., Wang, Z. J., Wu, Q. S., Troyer, M., Dai, X., *et al.* Type-II Weyl semimetals. *Nature*, **527** 495(2015).

[37] Kavokin, K. V., Shelykh, I. A., Kavokin, A. V., Malpuech, G., Bigenwald, P. Quantum theory of spin dynamics of exciton-polaritons in microcavities. *Physical Review Letters*, **92** 017401(2004).

[38] Zeng, H. L., Dai, J. F., Yao, W., Xiao, D., Cui, X. D. Valley polarization in MoS<sub>2</sub> monolayers by optical pumping. *Nature Nanotechnology*, **7** 490(2012).

## 第五章 总结与展望

拓扑光子学的发展更新了人们对光学系统物态的认识，以及对光行为的调控方法。本论文利用光子晶体（PC），主要研究了光学拓扑半金属，以及拓扑保护界面态的调控。论文主要工作可总结为如下三部分：

1. 光学 charge-2 狄拉克半金属的实现及边界态的调控。在第二章中，我们构造了一维光子晶体超晶格系统，首次实现了可见光频域的三维 charge-2 狄拉克半金属，并对其所独有的边界态进行了灵活调控。首先，我们交替堆叠了两种拓扑性质不同的一维 PCs 而得到了超晶格结构，其中每个 PC 界面处都存在拓扑界面模式 (TIM)。它们作为“人工光子轨道”，彼此杂化耦合形成集体模式 (即 super-modes, 超模式)，而得到全新的拓扑超晶格能带。单个 TIM 共振频率和相邻 TIMs 耦合系数都高度可调，因而我们引入分别与它们相关的两个合成维度，在一维超晶格中实现了三维拓扑能带。考虑到光子的赝自旋自由度，即每个光子都存在 TE 和 TM 两种模式。于是，不同自旋的拓扑能带可以由不同偏振的入射光来激发，并通过透射谱直接进行观测。当入射角为零度时，水平波矢为零，TE 和 TM 模式简并，它们各自对应相同拓扑荷的外尔半金属，在合成空间重叠而构成了 charge-2 狄拉克半金属；当入射角度逐渐增大，水平波矢不再为零，TE 和 TM 模式简并解除而衍生出相同拓扑荷且相互分离的外尔点 (WP)。此外，charge-2 狄拉克点 (CDPs) 拓扑荷不为零的特性保证了有限超晶格系统拓扑边界态的存在。拓扑边界态可以根据自旋分成两组，分别位于合成空间的两个相交平面。我们利用不同入射方向的两种偏振光，激发并通过反射谱观测到了位于不同平面的拓扑边界态。这些拓扑边界态依赖于偏振模式、入射角大小以及入射方向，因而可以用来实现局域场增强，有良好的实际应用潜力。

2. 复合光子晶体超晶格中次级拓扑界面态的调控。在第三章中，我们基于第二章中构造拓扑超晶格的思想，提出了一种全新的拓扑界面态——次级拓扑界面态 (STIS)，并提出一种实验上可行的在一维光子晶体复合超晶格系统中调控自旋依赖的 STIS 的方案。该复合系统是由两个拓扑性质不同的子超晶格拼接构成，

其中 STISs 位于可见光波段，能量局域于两个子超晶格界面上。具体来说，两个子超晶格都是由不同能带拓扑性质的两种光子晶体 (PC) 交替堆叠而构成的，因此每个相邻 PC 界面都存在拓扑保护的量子态。这些量子态作为“人工光子轨道”相互耦合形成超晶格能带，故被命名为初级拓扑界面态 (ETIS)。由于 STIS 的出现和调控依赖于光的偏振 (光子自旋)，这些 STISs 可以根据自旋自由度分为两组，其中每一组都可以用不同水平波矢的入射光单独激发和操控。此外，经过人为设计，STIS 始终是一种“零模式”。它不受有限尺寸效应影响，从而其能量局域于两个子超晶格界面上，且频率始终固定在超晶格能带带隙的中点，即 ETIS 的本征共振频率处。因此，ETIS 的灵活调控保证了 STIS 的高度可调性。利用透射谱，我们可以直接获取不同自旋、不同角度下 STIS 的共振频率，从而验证了我们对 STIS 的成功调控。本章工作提出了一种全新的机制来调控和增强局域模式，有助于设计具备自旋控制的新型光学器件。

3. 光学狄拉克 nodal line 半金属的实现及其 double-bowl 表面态的调控。在第四章中，我们创造了一种全新而简单的机制来实现严格的光学狄拉克 nodal line 半金属 (DNLS)。我们的工作首次实现了光学狄拉克 nodal line 半金属。这种 DNLS 的出现为光子晶体对称性和光子的自旋自由度所保证，所以是光子系统所特有的，其具备四重简并的狄拉克 nodal ring (DNR)。通过角分辨透射实验，我们提取了三个方向的能带色散，从而验证了可见光频域 type-II 型 DNLS 的存在。而当光学 DNLS 被适当截断并在其上镀一层银膜时，复合系统中的 TE 和 TM 偏振表面态是宽带简并的 double-bowl 表面态 (DBS)。我们利用角分辨反射谱识别了宽带简并的 DBS。另外，如果用另一种截断位置不同的光学 DNLS 代替银膜，同样能获得 TE 和 TM 偏振宽带简并的 DBS 和其他塔姆型表面态。第四章的研究很好地说明了拓扑光子学不是拓扑电子学的简单推广，因为玻色子和费米子存在本质的不同。在应用方面，考虑到由表面态引起的强局域场增强，我们的系统可以作为研究偏振相关的、需强场增强的现象的理想平台。

总而言之，本论文表明基于光子晶体结构的一维光学系统可作为实现各种拓扑效应的良好平台：它不仅可以实现光学拓扑半金属相，也能用来灵活调控拓扑保护界面态。值得注意的是，通过利用光子不同于电子的特性，我们实现的光学

拓扑半金属以及偏振依赖界面态是光子体系所独有的。

展望未来，首先，如果我们在系统中使用损耗材料或者非线性折射率材料，可以进一步探索光子体系中的非厄米或非线性拓扑效应。其次，可将调控界面态的机制用于生产应用，例如设计具备自旋控制的光学器件等；最后，若将研究一维体系的核心方法引入二维和三维体系，可以探索更高维度的新奇光学拓扑现象。

## 已发表与待发表的论文

### 第一作者论文:

(1) **Hu, M.**, Ding, K., Qiao, T., Jiang, X., Wang, Q., Zhu, S., Liu, H. Realization of photonic charge-2 Dirac point by engineering super-modes in topological superlattices. *Communications Physics*, **3** 130(2020). (论文第二章)

(2) **Hu, M.**, Liu, H., Zhu, S. Tunability of spin-dependent secondary topological interface states induced in an optical complex superlattice. *Physical Review B*, **104** 045408(2021). (论文第三章)

(3) **Hu, M.**, Zhang, Y., Jiang, X., Qiao, T., Wang, Q., Zhu, S., Xiao, M., Liu, H. Double-bowl state in photonic Dirac nodal line semimetal. *Light: Science & Applications* (accepted in July 2021). (论文第四章)

### 第二作者论文

(1) Qiao, T., **Hu, M.**, Jiang, X., Wang, Q., Zhu, S., Liu, H. Generation and tunability of supermodes in Tamm plasmon topological superlattices. *ACS Photonics*, **8(7)** 2095(2021).

## 致谢

时光如白驹过隙，求学之路漫漫也终走到了尽头，我即将踏上新的征程。然而岁月并未模糊记忆，五年的博士生涯历历在目，此刻的我心中百感交织。回想这一路走来，可谓披荆斩棘，我曾迷茫彷徨，也曾怆然涕下。但正是这一路的跌跌撞撞，丰满了我的羽翼，让我变得独立且常自省，变得坚韧并学会与自己和解。这段路途在我生命中弥足珍贵，不仅因为自身的历练和成长，更因为能够有幸结识众多良师益友，他们给予的每一份支持和帮助我都会铭记在心。在论文收笔处，我要向所有关心、帮助、支持和警醒过我的人致以最诚挚的谢意。

“饮水思源，缘木思本。”首先我谨向我的导师刘辉教授致以由衷的谢意和敬意。我和刘老师相识于我大三那年，因为对他的研究领域有兴趣而主动联系他做毕业课题，到如今已有六年。在我心目中，刘老师是一个治学极其认真的人，他对我的学业和科研倾注了大量心血。作为我科研的启蒙人，刘老师拥有渊博的学识和敏锐的洞察力，是他以身作则，教会我如何思考、如何独立做科研。非常感谢刘老师这些年对我的辛劳栽培，我将不忘初心，带着他的谆谆教诲勇往直前。

其次，我要特别感谢复旦大学丁鲲老师。丁老师待人真诚，在我最迷茫的时候雪中送炭，我没齿难忘。他严谨而稳重的科研态度深深感染了我，让我褪去浮躁，脚踏实地地做科研。丁老师的理论功底深厚，对我的指导耐心细致，与他的合作使我受益匪浅。当我科研上有些微的进展之时，他毫不吝啬的鼓励极大地激励了我。非常感谢丁老师这一路不辞辛劳地帮助与支持我，让我能以坚定的信念上下求索、砥砺前行。

再次，我要特别感谢武汉大学肖孟老师。肖老师学术水平卓越，科研灵感非凡。和肖老师的合作让我不仅习得了先进的科研知识，也让我分析和解决问题的能力有了质的飞跃。非常感谢肖老师给予我的指导，提升了我的科研素养，并激励着我全力以赴地继续向前。

接下来，我要感谢本实验室的祝世宁院士、吕鹏老师、谢臻达老师、李涛老师、胡小鹏老师、吕新杰老师、赵刚老师、王濂明老师、龚彦晓老师等在学习生活中给予我的指导与帮助。感谢李旭老师、邵阳老师、丁小妹老师、杨文玲老师对我的帮助和关怀。感谢物理学院鞠艳书记、金晓霞老师和徐四老师对我的帮助。感谢邹文琴老师在生活上所予以我的莫大鼓舞。

## 致谢

---

此外，我要感谢本课题组的各位老师和同学，他们是盛冲老师、仲帆老师、梁国华学长、王强学长、张振国学长、严志伟学长、乔通、冯程、黄春雨、褚琼琼、何润秋、张也、陈景明、刘志楠、江西、于洋、许晨敏、葛惠、赵玉乐、孟经纬、宗心牧、彭韩、马晓飞、刘子怡、赵学谦、徐光耀、张丰源等。感谢他们这些年给予我的启发和帮助，真诚地祝福他们前程似锦、一生平安。

然后，感谢相知相惜十多年的几位老友，千金易得而知己难求。谢谢他们一路上的关怀，愿我们友谊长存。感谢我的室友黄欣雨和于佩这些年的照顾，我会珍存彼此之间点点滴滴的温暖和欢笑。

最后，感谢我的父母，感谢这么多年以来对我无私的关爱与全力的支持，正因为他们我才能底气十足地直面这个世界。感谢我的男朋友乔通，长情不过陪伴，感谢他让这条修行之路不再孤独，感谢他一如既往的信任成就了更好的我。

提笔至此，心中波澜起伏，难以平复。不禁感慨自己何德何能、何其所幸，与人相识、蒙人厚爱。感谢所有关心和帮助我的人，愿他们美满一生。

胡梦莹

2021年8月于上海