等间距铌酸锂纳米波导阵列中的拓扑边缘态

Andrey V.Gorbach*Centre for Photonics and Photonic Materials, Department of Physics,University of Bath, Bath BA2 7AY, United Kingdom**

Jesper Beer 和 Anton Souslov*Department of Physics, University of Bath, Bath BA2 7AY, United Kingdom*

我们报道了，薄膜铌酸锂纳米波导构成的等间距一维阵列通常能够支持拓扑边缘态。不同于传统的耦合波导拓扑系统，这些阵列的拓扑性质由具有不同宇称的两类导模之间的模内耦合与模间耦合共同决定。利用同一波导中的两个模式来构造拓扑不变量，可以将系统规模缩小一半，并显著简化结构。我们展示了两种示例几何结构，在较宽的波长和阵列间距范围内，可以观测到不同类型的拓扑边缘态（分别基于准横电模或准横磁模）。

arXiv:2303.00809v1 [physics.optics] 1 Mar 2023

近年来，拓扑光子系统备受关注，不仅因为它们有望成为探索与拓扑态相关基本物理效应的试验平台，也因为它们为设计光操控结构提供了全新平台 [1–3]。近年来兴起的全介质结构尤其引人关注，其中拓扑性质由光子晶体的结构决定 [4, 5]。值得注意的是，即便在简单的一维晶体中，也可能存在非平庸拓扑相 [6]。拓扑物理学中一个基础的典型模型是一种称为 Su-Schrieffer-Heeger（SSH）链的一维系统 [7]。该模型最初用于描述聚乙炔分子中的激发，表现为耦合（跃迁）系数交替变化的一维二聚体链。链的两种拓扑不同相对应于两种不同构型，其中较强或较弱的耦合分别定义晶胞 [8]。区分这两种相的拓扑不变量称为绕数或 Zak 相位 [9]。一维系统中拓扑相的一种重要表现是边缘态的出现 [6]。这类局域态的存在与体晶体的拓扑性质直接相关，这种关系称为体边对应 [10, 11]。体边对应指出，由于拓扑材料边界处的不变量必须发生突变，因此边界必然存在受保护的边缘态。

迄今探索的绝大多数光子学拓扑结构，都是通过空间调制介电常数来实现所需的晶体对称性。这种方法源于凝聚态物理与光子学之间的普遍类比 [12]。具体而言，描述耦合波导系统中光传播的标准模型可直接映射为紧束缚模型，例如 SSH 链 [13]。这类模型假设波导以单模方式工作。近期，有人提出了一种替代方法，即利用耦合波导的多模性来增加每个晶胞中的自由度数量 [14–16]。在这种方法中，有效晶体结构及其拓扑性质由不同的模内耦合和模间耦合网络决定，而波导的空间排列则可以完全均匀。因此，只需简单得多、紧凑得多的结构，便可实现复杂的拓扑光子能带。

本文展示，一维等间距（均匀）绝缘体上铌酸锂（LNOI）波导阵列 [17–19] 可呈现拓扑上不同的相，从而形成拓扑边缘态，见图1。脊形波导由厚度为 h 的铌酸锂（$LiNbO_3$）薄膜刻蚀而成，该薄膜位于二氧化硅玻璃基底上。波导的几何参数包括顶部宽度 w 、残余薄膜厚度 t和侧壁角 φ [（图1(a)]）。根据具体的刻蚀工艺，该角度通常在 40° 至 80°之间变化 [19]。结合块体铌酸锂的各向异性色散，这四个几何参数（h、t、w、φ）为调节孤立波导的色散提供了便利的工具箱。特别是，对于某些参数，可以在较大的光谱窗口内观察到不同导模对呈现近简并行为。图1(b)展示了一种这样的几何结构，其中标记为准横电$_{01}$ 和准横电$_{10}$, 的两个模式，在较宽的波长区间 $1.0\mu\text{m} < \lambda < 1.7\mu\text{m}$内具有相近的有效折射率（在理想的正方形波导中，这两个模式将完全简并）。调节侧壁角，也可以观察到准横磁$_{01}$ 和准横磁$_{10}$ 模式呈现类似的近简并行为，见图1(c)。这一趋势似乎具有普遍性：改变三个几何参数，可以在LNOI波导中观察到不同模式对呈现类似的近简并行为。每个波导中存在两个简并模，是使等间距阵列中能够形成拓扑态的关键因素。

* 通讯作者：A.Gorbach@bath.ac.uk

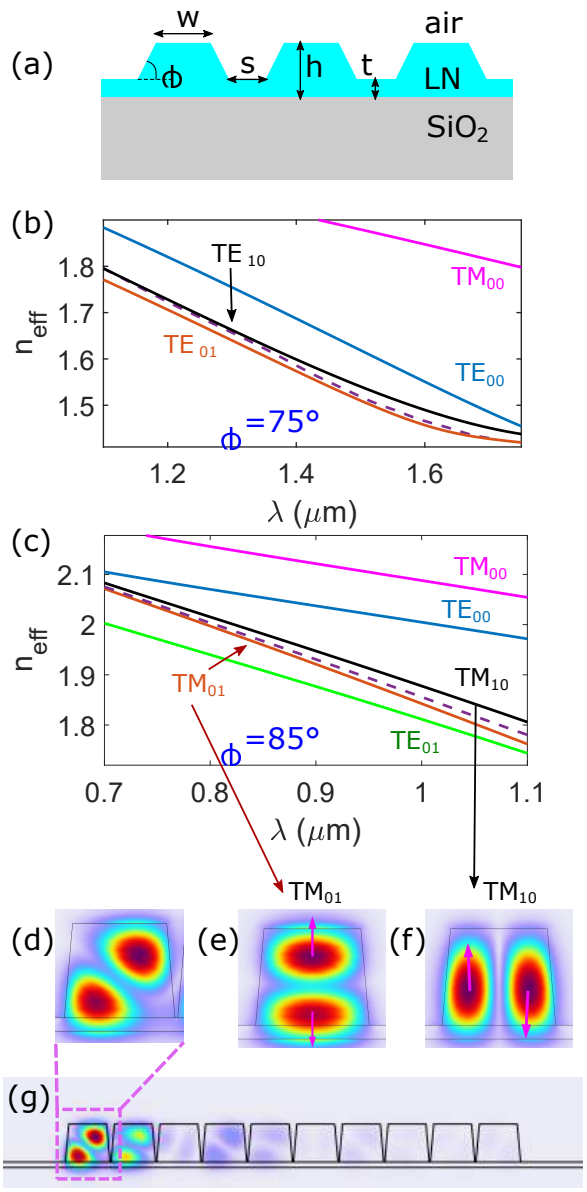

图 1. LNOI 波导阵列中的边缘态：(a) 阵列示意图；(b) 使用 x 切铌酸锂薄膜（晶体的非寻常轴沿水平方向）时，宽度为 $w = 700$纳米、 $h = 800$纳米、$t = 100$纳米，且 $\varphi = 75°$的单根波导中不同导模的色散。虚线表示由$N = 10$ 根波导组成的阵列中边缘模的色散，边缘间距为 $s = 100$纳米；(c) 与 (b) 相同，但参数为 $\varphi = 85°$，虚线表示参数为 $s = 50nm$时边缘模的色散；(d)–(f) 与 (c) 图相同几何结构中的导模场分布（电场模），波导长度为 $\lambda = 0.7\mu$米。(g) 显示了参数为 $N = 10$且间距为 $s = 50$纳米的波导阵列中的边缘模，(d) 中放大显示了边缘处的波导。(e) 和 (f) 分别显示孤立波导的准横磁$_{01}$ 模和准横磁$_{10}$ 模的场分布。箭头表示局域电场的偏振方向。（数据来自 COMSOL Multiphysics。）

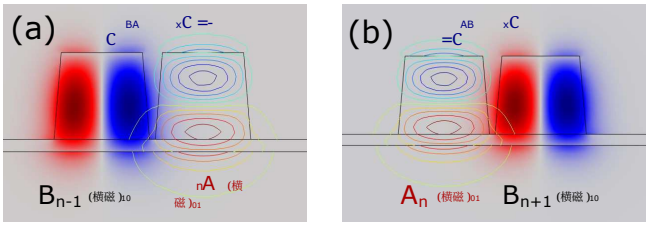

图2. 波导 n中的准横磁$_{01}$ 模式与波导 $n-1$ (a) 和 $n+1$ (b) 中准横磁$_{10}$ 模式之间的重叠，这些重叠用于计算式（3）中的耦合常数。

如图1(a)所示，将这类波导排列成规则的一维阵列后，我们观察到，在较宽的波长范围以及波导之间的边缘到边缘间距 s 下，会形成局域边缘模式。图1(g)展示了一个边缘模实例，其波导阵列采用与图1(c)相同的参数。在该模式中，场强呈指数衰减，并局域于最靠近阵列边缘的几个波导内。该模式是双重简并的：在相对的另一侧边缘存在一个等效的“镜像”模式。在第二种几何结构中也观察到了类似的边缘模。图1(b)和(c)中的虚线表示由具有相应两种几何结构的波导构成的有限尺寸阵列中的边缘模色散关系。在这两种情况下，对所有波长而言，边缘模的有效折射率似乎都处于单个波导中两个近简并模的有效折射率之间。

仔细观察图1(g)中边缘模在第一个波导区域内的场分布（见图1(d)）可发现，该波导中激发了准横磁$_{01}$ 模式和准横磁$_{10}$ 模式的叠加态。这些数值结果由 COMSOL Multiphysics 得出，并考虑了铌酸锂和二氧化硅玻璃基底 [20] 的材料色散。孤立波导对应的模式分布如图1(e)和图1(f)所示。因此，将准横磁$_{01}$ 模式和准横磁$_{10}$ 模式的场相减，便得到图1(d)中观察到的对角结构。在其他波导中也观察到类似结构（见图1(g)），图1(b)中的第二种几何结构所支持的边缘模中亦是如此。

这些边缘态从何而来？为回答这个问题，我们考虑一个简单的耦合模模型，该模型考虑了每个波导中两种不同类型模式之间的相互作用：

$$-i\frac{dA_n}{dz} = n_A A_n + C_A\left(A_{n+1} + A_{n-1}\right) + C_x\left(B_{n+1} - B_{n-1}\right), \quad (1)$$

$$-i\frac{dB_n}{dz} = n_B B_n + C_B\left(B_{n+1} + B_{n-1}\right) - C_x\left(A_{n+1} - A_{n-1}\right). \quad (2)$$

这里， A_n 和 B_n 是两种模式 [（例如，图1(b)]所示几何结构中的准横电$_{01}$ 和准横电$_{10}$ ）的振幅

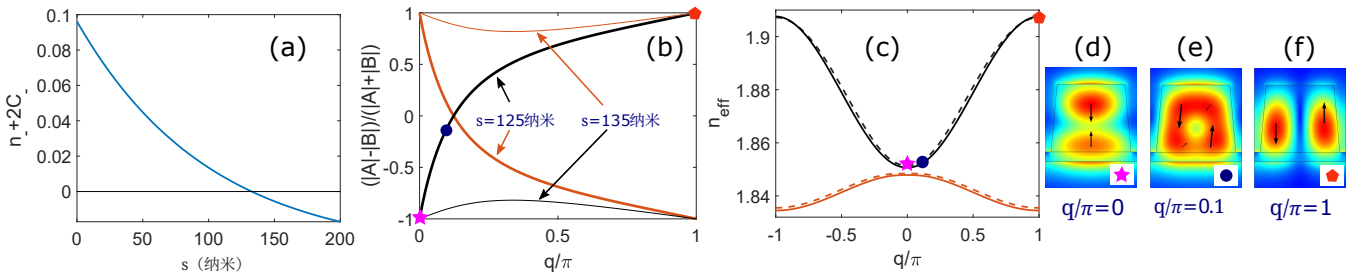

图3. 与图1(b)具有相同波导参数的无限阵列的能带结构：(a) 在 $\lambda = 1.0\mu$m处，模态失谐与耦合系数 $n_- + 2C_-$之间的平衡随波导间距的变化。带隙在$s \approx 130$nm处闭合；(b) 耦合模模型方程(1,2)中，上能带（黑色）和下能带（红色）的特征向量结构，分别对应 $s = 125$nm（粗线）和 $s = 135$nm（细线）；(c) 使用 Comsol 仿真（实线）和耦合模模型（虚线）得到的 $s = 125$nm处的能带结构；(d)-(f) 在 $s = 125$nm处，上能带模式在$q/\pi = 0$、0.1和1时的场分布。

在第 n 个波导中， z 是以真空波长 $\lambda_0 = 2\pi c/\omega$为单位测量的无量纲传播长度， n_A 和 n_B 是孤立波导中两种模式的有效折射率，而C_A、 C_B和 C_x 是不同的模内和模间耦合系数。该模型的一个重要特点是，连接模式 A_n 和模式 B_{n+1} （C_x）以及连接模式 A_n 和模式 B_{n-1} （$-C_x$）的模间耦合系数 C_x 的符号会发生变化。这是两个相互作用模式 [16]宇称相反的直接结果。一般而言，波导 n 中的模式 p 与波导（$n+1$）中的模式 q 之间的耦合系数，其中 p 和 q 各自为模式A 或模式 B，可通过以下重叠积分 [21]求得：

$$C_{pq} = \omega \iint_{-\infty}^{+\infty} \vec{e}_p^*(x,y) \cdot \Delta\epsilon \vec{e}_q(x+T,y) dxdy \,, \qquad (3)$$

其中，$\vec{e}_{A,B}(x,y)$是孤立波导n的模式， T 是波导之间的中心间距，而 $\Delta\epsilon(x,y)$是双波导结构（波导n 和 $n+1$）与单波导结构（仅含波导 n ）的介电张量之差。实质上，$\Delta\epsilon$ 仅在第（$n+1$）个波导的芯区内非零。对于同类型的模式，即当 $p = q$时，波导对 n 和（$n+1$）之间以及波导 n 和（$n-1$）之间的耦合系数相同。然而，若模式类型不同，情况便不再如此。特别是，当两个模式相对于 $x \to -x$具有相反对称性时，例如准横磁$_{01}$和准横磁$_{10}$ 模式，会得到 $C_{pq} = -C_{qp}$，如图2所示。值得注意的是，这种符号变化保留了模型的厄米结构，却在阵列中诱导出有效手性。

对于无限阵列，方程（1、2）中的模型对平面波 $A_n, B_n \sim \exp(i\lambda z - iqn)$ 的谱由两个能带组成：

$$\lambda_{1,2} = n_+ + 2C_+ \cos(q) \pm \sqrt{(n_- + 2C_- \cos(q))^2 + 4C_x^2 \sin^2 q} \,, \qquad (4)$$

其中 $n_\pm = (n_B \pm n_A)/2$ 和 $C_\pm = (C_B \pm C_A)/2$。值得注意的是，当$n_- + 2C_- = 0$时，能带间的带隙在 $q = 0$ 处闭合；当 $n_- - 2C_- = 0$时，则在 $q = \pi$ 处闭合。这种带隙闭合伴随着特征向量结构的定性变化，如图3(a)和(b)所示。对于图1(c)所示的几何结构，在固定波长下改变波导之间的间距，会打破 $|n_-|$ 和 $2|C_-|$ 之间的平衡。当 $|n_-| > 2|C_-|$ （$s > s_0 \approx 130$纳米）时，在每个能带的整个布里渊区 $0 \le |q| \le \pi$ 内， A 或 B 模式的振幅始终占主导，见图3(b)中的细线。因此，在这种情况下，每个能带都可与某一特定模式（A 或 B）相对应。相反，当 $|n_-| < 2|C_-|$ （$s < s_0$）时，随着波数 q 扫过布里渊区，每个能带内的模式结构会在模式 A 和 B 之间切换，见图3(b)中的粗线。耦合模模型的这些结果与采用周期性边界条件求解麦克斯韦方程组得到的完整结果一致。图3(c)展示了使用 COMSOL Multiphysics 得到的无限波导阵列谱的一部分（孤立波导的准横磁$_{10}$ 和准横磁$_{01}$ 模式附近，实线）。耦合模模型对应的谱以虚线表示。对于后者，我们使用孤立波导的 COMSOL 数据，根据方程（3）计算耦合系数。图3(d)–(f)展示了上能带中不同波数 q处模式的场分布。正如耦合模模型所预测的，我们观察到模式从 $q = 0$ 处的准横磁$_{01}$过渡到 $q = \pi$处的准横磁$_{10}$ 。

对于公式 (1, 2) 中的模型，已有研究证明，当谱带隙闭合后再次打开时，系统会发生拓扑相变 [16]。我们通过使用 Wilson 环路方法计算两条能带的 Zak 相位，确认完整模型也具有同样的性质 [22]：

$$\theta \approx i \ln \Pi_{i=1}^{N} \langle \psi(k_i), \psi(k_{i+1}) \rangle \,, \qquad (5)$$

其中 $\psi(k)$ 是属于

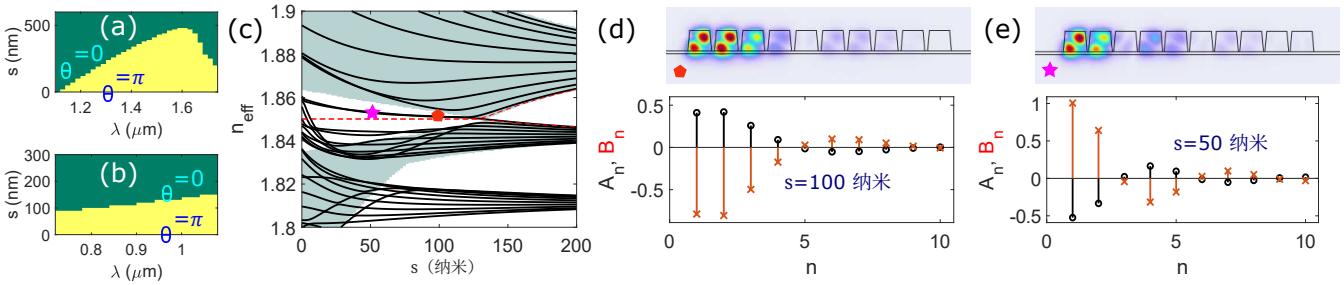

图4。（a）和（b）无限波导阵列上能带的 Zak 相位（当 s 足够大时分别对应横电$_{10}$/横磁$_{10}$ 模式），根据式（5）计算，几何结构分别如图1(b)和(c)所示。浅色阴影区域表示具有 $\theta = \pi$ 的区域，预测其中存在边缘模；（c）有限波导阵列中具有 $N = 10$ 、几何结构如图1(c)且 $\lambda = 1\mu$ 纳米时的模式，由 COMSOL 仿真获得。红色虚线表示耦合模模型（式（1、2））的两个模式，它们对应边缘态。阴影区域表示耦合模无限系统（式（4））两条能带的带宽；（d）和（e）有限波导阵列中边缘模的场分布，具有 $N = 10$、$s = 100$ 纳米和 $s = 50$ 纳米。上方各图为 COMSOL 仿真结果，相应的有效折射率在（c）图中以星形和五边形符号标出。下方各图为式（1、2）模型的本征模。

特定能带的归一化本征模，两个模式的内积定义为

$$\langle a, b\rangle = \frac{1}{4}\iint \left[\vec{e}_a \times \vec{h}_b^* + \vec{e}_b^* \times \vec{h}_a\right] dxdy\,. \qquad (6)$$

公式（5）中的计算通过将完整布里渊区离散为 N 段来完成，其中 $k_{N+1} = k_1 = -\pi$。当波导之间的间距越过转变点 $s = s_0$时，我们观察到两个能带中的每一个都从$\theta = 0$ （对应绕数 0 的平庸相）跃迁至 $\theta = \pi$ （对应绕数 1 的非平庸相）。图 4(a) 和 (b) 分别绘出了与图 1(b) 和 (c) 中相同几何结构对应的上能带 Zak 相位。这一拓扑相变伴随着有限尺寸阵列中两个简并边缘模的出现（分别局域于两侧边缘），如图 4(c)–(e) 所示。图 4(c) 展示了由公式（4）所描述的无限尺寸耦合模模型的谱，其中阴影区域对应于 $\lambda = 1\mu$ m 处与图 1(c) 相同的几何结构。有限尺寸阵列（$N = 10$ 个波导）的模式分别以实线（Comsol 仿真）和虚线（耦合模模型）表示。随着无限系统的带隙闭合并重新打开，位于 $s > s_0$ 处、分别对应两个能带底部和顶部边缘的两个模式合并在一起，在 $s < s_0$处形成两个简并边缘态。在耦合模模型中，对于任意 s，这两个态都具有固定的有效折射率，见图 4(c) 中的虚线。在完整系统中，由于第三个能带（对应准 TE$_{01}$模式）的影响，这些折射率不再固定，参见图 1(c)。尽管如此，耦合模模型不仅能够较为准确地预测有效折射率，还能准确预测边缘模的详细场分布，如图 4(d) 和 (e) 所示。

在第二种几何结构中，准 TE 模式也表现出类似的行为，如图1(b)所示。图5(a)展示了无限周期结构的谱（孤立波导的 TE$_{01}$ 和 TE$_{10}$ 模式附近）该谱由对周期结构进行 COMSOL 仿真得到。图5(b)放大显示了带隙附近的区域。图5(c)展示了含有 $N = 20$ 个波导的有限尺寸阵列的模式分布。我们选取了指标最接近带隙的 10 个模式，相应的指标在图5(b)中以黑色圆圈、蓝色叉号和红色菱形标出。大多数模式似乎是非局域的，其指标位于无限结构的上能带（黑色圆圈）或下能带（蓝色叉号）中。红色菱形标出的两个模式落在带隙内。值得注意的是，这两个模式的指标几乎简并，且其场分布似乎非常相似，场强局域在边缘处。这是 COMSOL 求解器因简并而生成的边缘模的对称和反对称组合。因此，可以从这两个简并模式重构边缘模，如图5(c)所示。图5(c)的下方面板展示了耦合模模型得到的相应边缘模。与之前一样，两种模型吻合得非常好。

当满足以下条件时，我们发现了拓扑边缘模式

$$|n_-| < 2|C_-| \qquad (7)$$

该条件得到满足。该不等式比较了孤立波导的两个近简并模在左侧的有效折射率失配与右侧的模内耦合系数失配。有趣的是，模间耦合系数 C_x 并未明确出现在该条件中，但两个模式族之间的相互作用是形成边缘态所必需的。出人意料的是，我们发现，对于 LNOI 波导阵列，式（7）中的条件在（λ， s）参数空间的大范围区域内均得到满足，这使我们得出结论：拓扑态是该系统的普遍特征，参见例如图 4(a) 和 (b)。有两个因素促成了参数空间的大范围区域对应于拓扑态。首先，

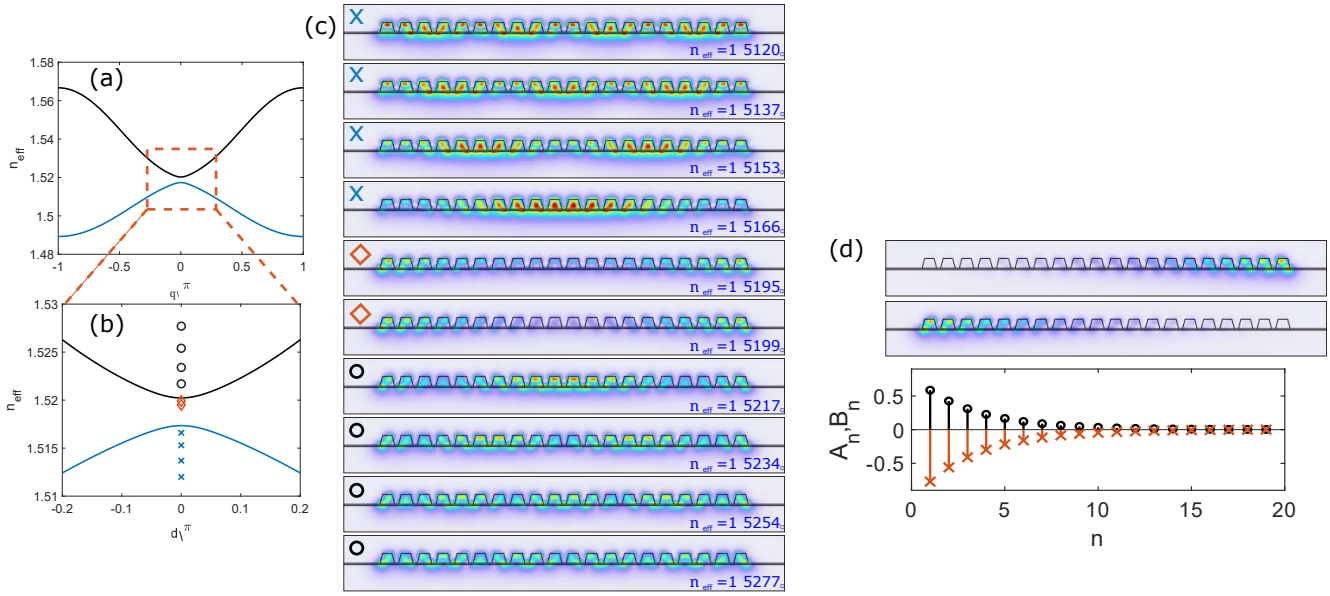

图5. 几何结构与图1(b)相同，在 $\lambda = 1.5\mu$m、 $s = 300$纳米处的离域和边缘横电 TE 模：(a) 无限周期系统的谱；(b) 带隙附近谱的放大区域；(c) 带隙附近一个 $N = 20$ 波导阵列中 10 个模式的电场范数。相应的有效折射率在(b)图中以蓝色十字、红色菱形和黑色圆圈表示；(c)图中由两个简并 Comsol 模式相加和相减得到的模式以红色菱形标示。底部图显示了由耦合模模型（方程(1,2)）得到的相应边缘模的剖面。

由于铌酸锂的材料色散与纳米波导的几何色散共同作用，我们在较大的频率窗口内发现了成对的近简并模（由较小的有效折射率失配 n_- 量化）。这里我们展示了两种示例几何结构，它们分别采用了一阶 TE 和 TM 模的不同组合，但我们预计，其他高阶模成对出现时也会产生这种较小的失配。其次，由于参与模式具有不同的宇称，模间耦合系数 C_A 和 C_B 通常呈相反符号，从而使 $2|C_-| = |C_B - C_A|$最大化。因此，即使考虑具有较大失谐 $|n_-|$的模式对，我们仍能观察到非平庸拓扑。

因此，LNOI 波导阵列是一种便捷的拓扑光子学平台，其中的拓扑可在采用标准技术轻松制备的系统中实现。值得注意的是，利用一对近简并模式，可用单个波导取代由两个波导组成的晶胞，从而使观测到拓扑效应的阵列尺寸减小一半。结合铌酸锂强大的二阶光学非线性，我们发现该系统特别适合进一步研究非线性拓扑现象，例如拓扑光学参量振荡 [23] 或双色拓扑边缘孤子动力学 [24]。

[1] L. Lu、J. D. Joannopoulos 和 M. Solja˘ci´c，《自然·光子学》8，821（2014）。[2] T. Ozawa、H. M. Price、A. Amo、N. Goldman、M. Hafezi、L. Lu、M. C. Rechtsman、D. Schuster、J. Simon、O. Zilberberg 和 I. Carusotto，《现代物理评论》91，015006（2019）。[3] Z. Lan、M. L. N. Chen、F. Gao、S. Zhang 和 W. E. I. Sha，《物理评论》9，100076（2022）。[4] L. H. Wu 和 X. Hu，《物理评论快报》114，223901（2015）。[5] H. X. Wang 和 J. H. Jiang，《物理学前沿》10，310（2022）。[6] L. J. Lang、X. Cai 和 S. Chen，《物理评论快报》108，220401（2012）。[7] W. P. Su、J. R. Schrieffer 和 A. J. Heeger，《物理评论B》22，2099（1980）。[8] L. Li、Z. Xu 和 S. Chen，《物理评论B》89，085111（2014）。[9] J. Zak，《物理评论快报》62，2747（1989）。[10] Y. Hatsugai，《物理评论快报》71，3697（1993）。[11] M. Xiao、Z. Q. Zhang 和 C. T. Chan，《物理评论X》4，021017（2014）。

[12] J. D. Joannopoulos, *Photonic crystals : molding the flow of light* 2 ，第版（普林斯顿大学出版社，普林斯顿，新泽西州；牛津，2008）。[13] A. Blanco-Redondo、I. Andonegui、M. J. Collins、G. Harari、Y. Lumer、M. C. Rechts- man、B. J. Eggleton 和 M. Segev，《物理评论快报》116，163901（2016）。[14] R. S. Savelev 和 M. A. Gorlach，《物理评论B》102，161112（2020）。[15] D. A. Bobylev、D. A. Smirnova 和 M. A. Gorlach，《激光与光子学评论》15，1900392（2021）。[16] G. C´aceres-Aravena、L. E. Torres 和 R. A. Vicencio，《物理评论A辑》102，023505（2020）。[17] G. Poberaj、H. Hu、W. Sohler 和 P. G¨unter，《激光与光子学评论》6，488（2012）。[18] A. Boes、B. Corcoran、L. Chang、J. Bowers 和 A. Mitchell，《激光与光子学评论》12，1700256（2018）。[19] D. Zhu、L. Shao、M. Yu、R. Cheng、B. Desiatov、C. J. Xin、Y. Hu、J. Holzgrafe、S. Ghosh、A. Shams-Ansari、E. Puma、N. Sinclair、C. Reimer、M. Zhang 和 M. Lon˘car，《光学与光子学进展》13，242（2021）。[20] L. Cai、A. V. Gorbach、Y. Wang、H. Hu 和 W. Ding，《科学报告》8，12478（2018）。[21] J.-M. Liu, *Principles of Photonics* （剑桥大学出版社，2016）。[22] H. X. Wang、G. Y. Guo 和 J. H. Jiang，《新物理学杂志》21，093029（2019）。[23] A. Roy、M. Parto、R. Nehra、C. Leefmans 和 A. Marandi，《纳米光子学》11，1611（2022）。[24] Y. V. Kartashov，《光学快报》47，5945（2022）。