光子晶体波导中的混合纵向—横向传播电场

Yanrong Zhang[1], Hooman Barati Sedeh[2], Christopher S. Whittington[3], Natalia M. Litchinitser[2], Shuren Hu[1*], Sharon M. Weiss[1*]

*1.*电气与计算机工程系，范德堡大学，纳什维尔，田纳西州 *37235*，美国

*2.*电气与计算机工程系，杜克大学，达勒姆，北卡罗来纳州 *27708*，美国

*3.*跨学科材料科学项目，范德堡大学，纳什维尔，田纳西州 *37235*，美国

* 通讯作者电子邮箱：*shuren.hu@vanderbilt.edu*,

sharon.weiss@vanderbilt.edu

摘要

在均匀、无源且无限延伸的介质中，麦克斯韦方程组要求电磁波必须是纯横向的。然而，当光束被紧密聚焦或受到强烈限制时，可能会出现纵向场分量[1–3]。强纵向场促成了许多新颖的现象和应用，包括单分子检测[4,5], 近场成像[6,7],以及高分辨率光刻[8]。尽管普通波导中电磁场的纵向电场（LE）分量的行为已得到充分研究，但通过精心设计的纳米结构，可以前所未有地控制其强度以及空间和光谱分布。在此，我们展示了一种全矢量理论和实验结果，表明对于专门设计的波导，例如一维反槽光子晶体（PhC）

波导，LE 场可以与波导中的横向电场（TE）耦合，并且随后可通过远场成像分解为相互独立的偏振。当光子晶体单元的面内镜像对称性被破坏时，LE 与 TE 模式之间的耦合会产生两种杂化 LE-TE 模式，并打开一个新的光子带隙。通过改变晶胞内反槽的旋转角度，可以调节杂化模式中 LE-TE 的构成以及由此产生的带隙宽度。我们表明，相对于传播方向呈 45° 的反槽取向可产生 LE 场贡献最大且几何诱导带隙最宽的杂化模式。这类经过设计的光子晶体波导能够实现新的片上光子功能，包括量子系统中的面内角度不变偶极耦合、更高阶的偏振分复用，以及对光流的增强控制。

引言

当光受到强约束，或介质具有非均匀性且边界受限时，例如在紧聚焦光束和导模波导中，仅对电磁波进行纯横向描述是不完整的。在这些情况下，还必须考虑纵向电场。纵向场分量最早由 Maxwell[9] 指出，随后由 Rayleigh[10]，、Heaviside[11]，和 Sommerfeld[12]进行了明确分析。在发现标量近似不足以描述高数值孔径聚焦后[13]，研究人员进一步探究了 LE 场分量的贡献。相反，为了准确表征这一状态下光的行为，需要采用一种全矢量模型，考虑高数值孔径引起的偏振旋转[14,15]。这种矢量描述推动了对 LE 场分量的理论和实验研究，并证明 LE 场会在焦点处产生轴上强度分布[1]。基于这一认识，后续研究着重于通过使用环形孔径来设计和增强纵向场分量[8],

高数值孔径聚焦[16] 和径向偏振光束[4,17], , 从而实现了近场探针[18] 和非线性频率转换[19] 等原本无法实现的新型应用。

对于导波系统，半矢量近似同样无法捕捉受限电磁场中 E_x、 E_y 和 E_z 场分量之间的复杂关系。因此，导波现象通常采用基于有限差分的全矢量模式求解器进行分析，这类求解器能够准确计算介质波导[20]中的场分布和模式偏振混合。特别是，针对硅纳米线波导的数值研究表明，LE 场分量的相对振幅可达到与主导 TE 分量[3]几乎相当的水平。其他研究则将全矢量框架应用于光学微纤维[21] 和纳米柱[22], , 其中强约束会产生显著的 LE 场，进而影响耦合、传播损耗、二次谐波产生和自旋轨道相互作用。在传统波导中，LE 场分量的强度可以调控，但 LE 场的空间和光谱分布难以调整；LE 场的振幅通常在波导的侧壁[23,24] ，表面或末端达到最大值，并且与磁场[24]反相。因此，这些系统中的 LE 场分量仅在局部振荡，不会对净能量传输[3]产生贡献。然而，根据高斯定律，沿传播方向引入空间变化的介电常数，可使 LE 场与磁场部分同相，从而使 LE 场与 TE 场共同传播。因此，尽管导波结构、高数值孔径聚焦以及非均匀介质中的 LE 场已得到广泛确认和深入研究，对其进行可控操纵仍是一项尚待解决的挑战。通过审慎地对

沿传播方向以亚波长尺度对波导进行纳米结构化，为克服这一挑战提供了一条途径。

在这项工作中，我们通过理论、数值模拟和实验展示，采用经过适当折射率调制设计的亚波长工程化光子晶体波导，由反槽单胞构成[25]，能够支持以 LE 和 TE 为主的模式；通过旋转晶胞、有意打破其镜像对称性，可使这两种模式发生混合（图 1）。通过改变反槽单胞的角度，可以调节 LE 模式与 TE 模式之间的耦合强度，以及它们的空间和光谱分布。我们展示了，对波导进行纳米结构化可将 LE 场重新定位至波导中心，并实现对 LE–TE 混合模式偏振的确定性控制。我们相信，这项工作将为基础研究和实际应用开辟新的途径。LE-TE 混合模式的面内偏振不敏感性为二维材料发射体的片上角度不变耦合提供了一种潜在机制。此外，调节 LE 模式与 TE 模式之间耦合强度的能力可用于高密度数据传输，从而实现一种新型偏振分复用，有望显著提升片上光互连的带宽。

LE 模式的起源

对于沿传播方向（x方向）均匀的波导，例如传统脊形波导，横向场彼此同相，从而沿x方向传输能量。然而，根据高斯定律（如补充说明 1 所示），LE 场（E_x）与 TE 场（E_t）相位相反，不会对时间平均功率流产生贡献，而是储存无功电磁能量。LE 场的大小与E_t的空间梯度成正比，通常不予考虑

但纳米线波导等支持强横向场梯度[3]的特殊情况除外。

重新考察波导介质的介电常数沿传播方向变化这一条件下的高斯定律，可揭示 E_x 与 E_t之间更一般的关系，如公式 1 所示，并在补充说明 1 中推导得出。对于均匀波导，$\partial\varepsilon\ \partial x = 0$ 与 E_x 和 E_t完全反相；而对于沿传播方向介电常数不均匀的波导（例如光子晶体波导），$\partial\varepsilon\ \partial x \neq 0$ 与 E_x 和 E_t部分同相。从这一角度来看，由于 LE 场与横向电场分量并非完全反相，同相的 LE 场可以对传播模式作出贡献，

$$E_x \propto \frac{\partial\varepsilon}{\partial x}\left(\nabla_t \cdot (\varepsilon E_t)\right) + i\varepsilon\beta\nabla_t \cdot \varepsilon E_t \qquad (1)$$

虽然高斯定律规定了电场分量之间的关系，但安培定律唯一地将E_x 和E_y 场与H_z 场联系起来。如补充说明 2和图 S1所示，对于给定的复数H_z 分布，电场的横向分量和纵向分量分别可表示为$E_y = \left(-1\ i\omega\varepsilon\right)\left(\frac{\partial H_z}{\partial x}\right.$7和$E_x = \left(1\ i\omega\varepsilon\right)\left(\frac{\partial H_z}{\partial y}\right.$7。由于$H_z$ 是在同时考虑E_x 和E_y时起统一作用的场分量，我们使用MEEP中的H_z 激发源，通过能带结构计算（图 1）分析我们的光子晶体波导[26]。该H_z激发会产生TE和LE模式的能带。为了解每条能带的起源，我们采用高斯光束源，在两种不同的偏振配置下进行能带结构计算：（i）电场沿y 方向；（ii）电场沿x 方向。虽然H_z 源会激发每个受支持的模式或能带，但两个独立的源分别只会激发与其支持的偏振相对应的能带。由E_y 偏振强烈激发的能带被确定为横向电主导能带，而由该偏振强烈激发的能带则被确定为新颖的LE主导带。

由E_x 偏振强烈激发的能带被确定为新颖的LE主导带。我们注意到，虽然在仿真中引入 E_x 偏振源较为直接，但在实验中引入这种激发光源却并不容易，因为典型的激发源产生的光，其电场方向通常横向于传播方向。我们还注意到，在传统的一维光子晶体研究中[27]，，TE 模式会根据场分布相对于y = 0 反射的对称性被分类为不同分支，并报告出与图 1a所示类似的能带结构。通常只研究较低的两个TE 模式，此时磁场呈现偶对称性，并产生类似于图 1a左侧面板所示的场分布。

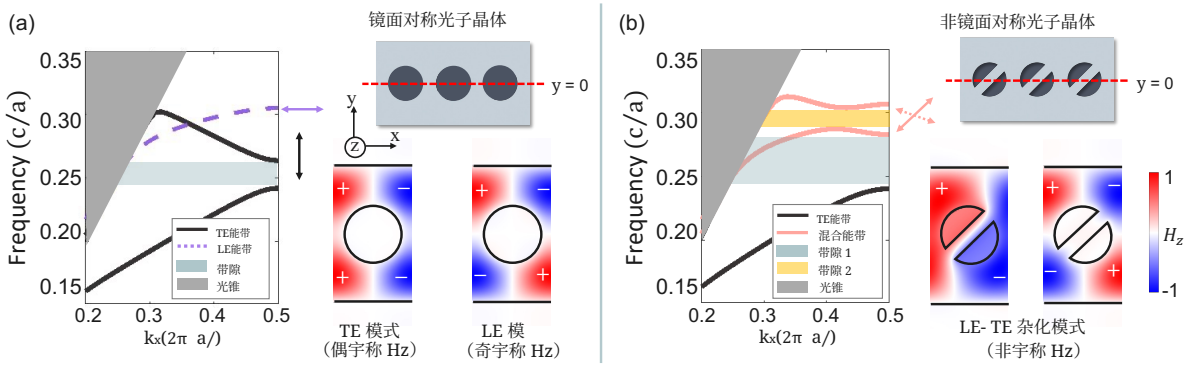


图 1. 光子晶体波导中的 TE 和 LE 模式及其杂化。(a) x-y 平面内具有镜面对称性的一维光子晶体波导示意图及其能带结构。能带图中的黑色实线表示 TE 能带，它们可被沿 y方向偏振的电场或沿 z 方向偏振的磁场强烈激发；紫色虚线表示 LE能带，它可被沿 x 方向偏振的电场或沿 z方向偏振的磁场强烈激发。图中还显示了带边处 TE 模式和 LE 模的磁场（H""）分布。(b) y=0 平面上不具有镜面对称性的一维光子晶体波导示意图及其能带结构。两个杂化能带（红色实线）可被任意面内电场偏振或沿 z 方向偏振的磁场激发。图中显示了相应带边模式的磁场分布，揭示出两种不同的非对称 LE-TE 杂化模式。

在我们的工作中，我们进一步识别出一种高阶 TE 模式，其磁场在 x-y 平面内关于 y = 0 反射呈现奇宇称，并伴有显著的 LE 场分量。鉴于这一显著的场贡献，我们因此将该模式称为 LE 模。此外，与此前报道的光子能带结构不同，我们通过改变光子晶体单元中的孔径和波导宽度，精心设计使 LE 能带下移并与传统 TE 能带相交，从而在动量空间中形成交叉点；当光子晶体单元内关于 y = 0 的镜像对称性被破坏时（图 1b），这些模式便可发生耦合，具体将在下一节中说明。

LE 模式与 TE 模式之间的杂化

在传统波导中，y-z 截面上的对称性破缺会消除基于对称性的正交性，从而使 TE 模式与 TM 模式发生耦合[28]。类似的机制也作用于光子晶体波导的 x-y 传播平面：对称性破缺使 LE 模式与 TE 模式之间能够发生耦合。 这种 x-y 平面上的对称性破缺可通过光子晶体晶胞设计实现，即打破导致 LE 模式和 TE 模式具有奇、偶宇称磁场分布的镜像对称性。本文采用硅反槽光子晶体波导实现这一方法，其晶胞由圆形空气孔和连接这些空气孔的硅条（即反槽；图 1b、图 2a、b）构成[25]。将硅反槽条旋转至偏离 x 或 y 方向的位置，会破坏 x-y 平面的对称性并引发 LE–TE 耦合，产生两个不具有确定H_z 对称性的杂化模式（图 1b）。这一耦合过程可用耦合模理论准确描述（见补充说明3、补充表1–2和图S2–4），并会在能带结构中产生反交叉，表现为新的光子带隙。如图 2c(ii–iv)所示，反槽的旋转角直接控制由此产生的带隙大小，进而反映 LE–TE 耦合的强度。这些耦合模称为上

混合能带模式和下混合能带模式。由于它们具有耦合特性且场分布不对称，因此具有一项独特性质：任意偏振的光都能激发这两种杂化模式。重要的是，这使得研究人员能够利用常规激光光源（类似于E_y 偏振光源）进行激发，实验测量新出现的光子带隙和混合 LE-TE 模式。

对于对称反槽光子晶体波导（即 R0 和 R90 反槽光子晶体波导，其中记号 R θ 表示反槽条相对于传播方向的旋转角 θ ，单位为度），TE和LE模式各自的主导场之间相互作用可忽略不计，如图 2d、e 以及 h、i 所示。通过亚波长工程并考虑电场的界面条件，我们可以将 LE 场分布控制为两种分支：LE 场在波导中心内均匀分布（即反槽效应，此时电场的切向分量 E_x 连续），或 LE 场高度局域于空气区域（即槽效应，此时电位移场的法向分量在界面上连续，且电场在较低介电常数的介质槽区中得到增强）。相比之下，对于具有中间反槽旋转角、从而破坏跨越 y = 0 的镜像对称性的反槽光子晶体波导（例如 R45），会发生杂化，并出现两条混合 TE–LE 能带。在模式耦合最强的能带边缘（见补充图 S2-3），上混合模式和下混合模式均表现出显著的 E_x 和 E_y 分量，如图 2f、g 所示。例如，在整个晶胞上积分后，R45 反槽光子晶体上混合模式和下混合模式的 $|E_x|$/HE_yH 比值约为 90%，表明其具有很强的混合偏振特性。相比之下，R0 和 R90 反槽光子晶体波导中 TE 和LE模式的主导电场分量之间存在明显区别，如图 2d、e 和

分别见图2h、i。补充表3重点列出了不同自由空间和导波构型中 LE 场贡献的主要差异。

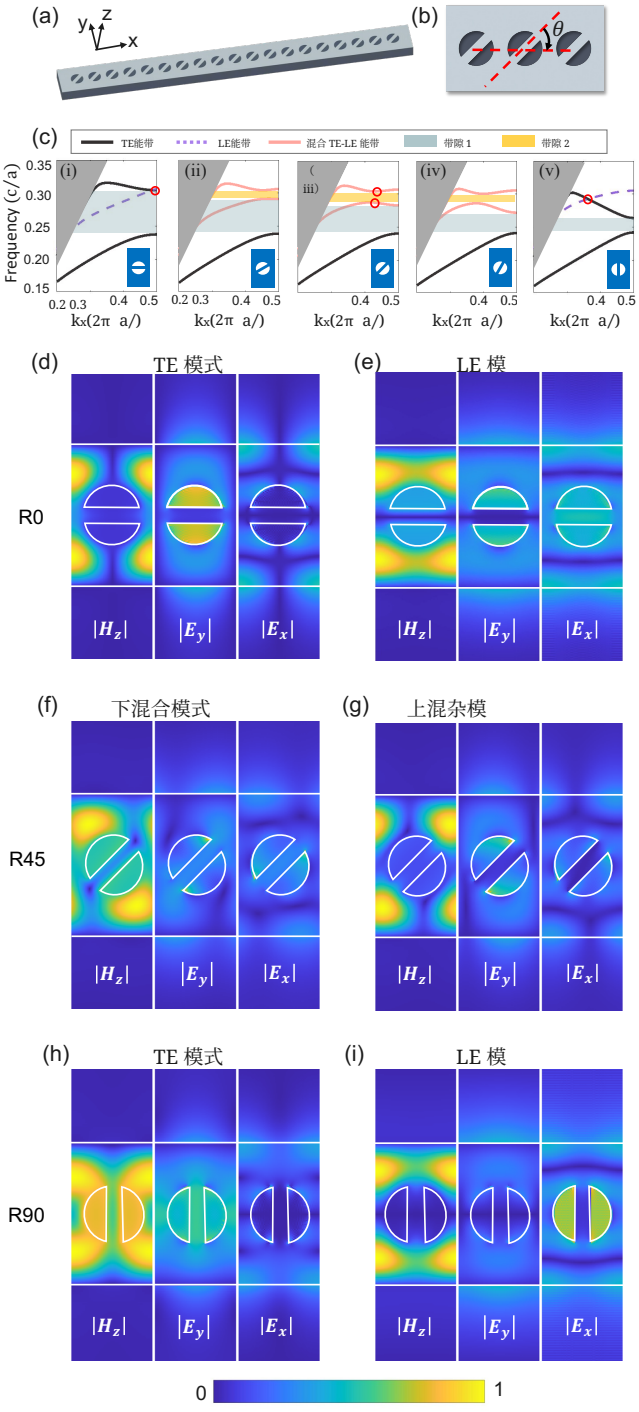


图2. 破缺镜面对称性促成硅反槽光子晶体波导中的 LE-TE 杂化与能带演化。(a) R45反槽光子晶体波导示意图；(b) 三个晶胞的放大图。(c，i-v) 能带图

R0、R30、R45、R60 和 R90 反槽光子晶体波导。黑色实线表示 TE 能带，紫色虚线表示 LE 能带，红色实线表示 LE-TE 混合能带。蓝色阴影区域表示基模光子能带，这是由打破波导的平移对称性产生的。黄色阴影区域表示新型光子带隙，这是由打破晶胞中的x-y镜像对称性产生的。(d-i) 每个面板中的图均表示单个晶胞内 $|H_z(x,y)|$, $|E_y(x,y)|$ 和 $|E_x(x,y)|$ 场分布的二维切片。E_x 和 E_y 的振幅均按总电场 E_{total}归一化。标注的模式对应能带结构中圈出的点。对于 R0 和 R90 晶胞，圈出的模式位于能带交叉点；而对于 R45 晶胞，圈出的模式对应带边。

由 LE-TE 混合模式产生的新光子带隙

为了研究由 LE 模式与 TE 模式之间的杂化所诱导的新型带隙，我们对硅反狭缝光子晶体波导进行了时域有限差分（FDTD）仿真和实验透射测量。图 3a 展示了 R45反槽光子晶体波导的扫描电子显微镜（SEM）图像（制备细节见方法）。图 3b（i）以热图形式展示了反狭缝旋转角介于 0° 与 90° 之间的反槽光子晶体波导的仿真透射光谱。在 0° 时，带隙闭合。随着反槽旋转角增大，带隙逐渐打开，并在 45° 时达到最大，随后随着反狭缝角继续增大至 90° 而变窄，此时带隙闭合。这一趋势与图 2 中 LE 模式和 TE 模式的能带图一致。此外，对反狭缝旋转角介于 0° 与 90° 之间的反槽光子晶体波导透射光谱的实验测量（图 3b（ii））也与 FDTD 仿真表现出良好的一致性。图 3c 直接比较了 R90、R75、R60 和 R45 反槽光子晶体波导中选定的仿真与实测透射光谱，清晰展示了由 LE 模式与 TE 模式杂化形成的新带隙的演化过程，以及仿真与实验结果之间的高度一致。这些结果支持耦合模理论计算

（图 S2–S4），表明反槽旋转角可被调节以直接控制 LE 模式与 TE 模式之间的耦合程度：0° 和 90° 对应于非耦合极限，而 45° 代表模式杂化最大的条件。

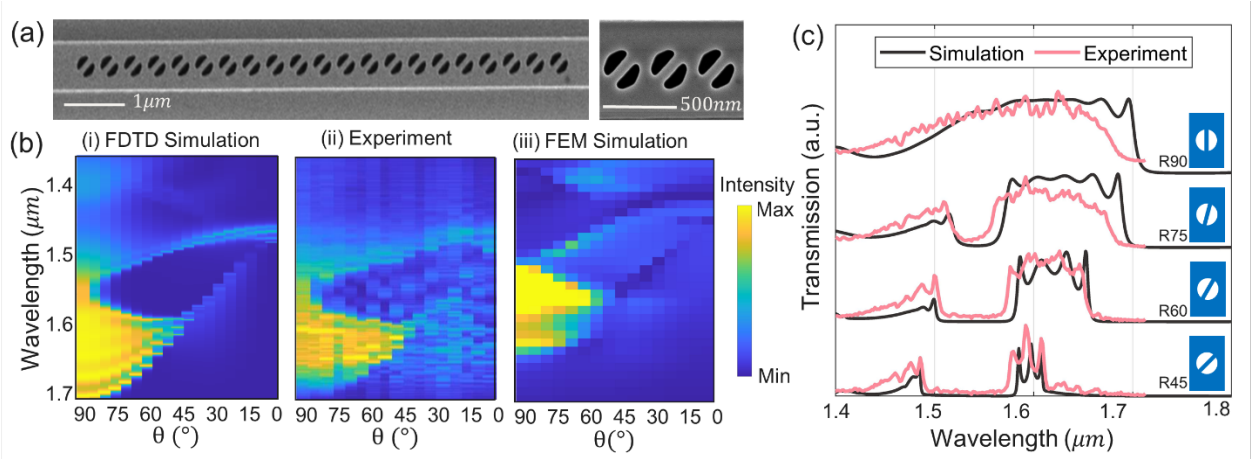


图 3。（a）R45反槽光子晶体波导的扫描电镜图像，以及三个晶胞的放大图。（b，i）仿真得到的和（b，ii）实验测得的不同反槽旋转角（R0 至 R90）反槽光子晶体的透射光谱，以热图形式展示。（b，iii）基于多极分解方法的前向与后向散射功率有限元法（FEM）仿真。（c）R90、R75、R60 和 R45 反槽光子晶体波导的仿真（黑色）和实验测得（红色）的透射光谱。由镜像对称性破缺产生的新光子带隙中心位于 1.55 μm 附近。随着光子晶体单元偏离对称的 R0 和 R90 构型旋转，带隙逐渐打开，并在 R45 附近达到最大带宽，仿真与实验结果吻合良好。

基于上述严谨的光子晶体分析，我们表明，通过将反槽光子晶体波导视为由耦合谐振超原子构成的链，也可以直观地理解其中基本的光与物质相互作用；每个超原子对应一个反槽单胞。对于非磁性超原子，其光学响应由外加电磁场所产生的诱导电极化 P in 决定。当光与超原子相互作用时，诱导极化与粒子内部的场分布之间的关系为

$P_{in} = \varepsilon_0 \left(\varepsilon_p - \varepsilon_d / E_p\right.$，其中 $\varepsilon,\ \varepsilon_p$ 和 ε_d 分别为空间、超原子和周围介质的介电常数，而 E_p 为超原子内部的总电场[29–31]。因此，内部场分布可以直接改变诱导极化，进而改变散射体内被激发的多极矩（即偶极子、四极子等）（详见补充说明4）。我们采用多极分解方法，通过有限元法仿真研究了由七个超原子构成的链的前向与后向散射功率之比随波长和反槽旋转角的变化，如图2b (iii)所示。前向与后向散射光之比的变化趋势与反槽光子晶体波导的能带结构计算和透射光谱中观察到的趋势高度一致。带隙光谱位置的轻微差异，是由于受计算能力限制，模型仅包含七个硅超原子而非更大的阵列，且忽略了二氧化硅基底。散射功率的方向响应进一步证实了LE–TE杂化及其对波传播的影响。

远场散射：LE 和横向电场分量

尽管实验观测到新的带隙证实了模式杂化，我们仍希望了解电场偏振的构成。因此，为了通过实验验证并量化相对于 TE 场分量的 LE 场分量，我们测量了旋转角介于 0° 和 90° 之间的硅反槽光子晶体波导的远场散射，并将其与远场散射模拟进行比较（详情见方法）。这些模拟和测量结果如图 4 所示。对于 R0 和 R90 反槽光子晶体波导，远场散射分布主要由 HE_yH^2 (TE) 分量主导，这与上述分析一致。随着旋转角接近 45°，LE (E_x) 分量

变得越来越显著。对于 R45 反槽光子晶体波导，在模拟和实验中，对远场分布积分得到的 $|E_x|^2$ HE_yH^{2}J 比值均达到约 50%（见扩展数据图1和方法）。我们预计，采用支持更强电场和磁场梯度的晶胞几何结构，可以进一步提高这一比值。

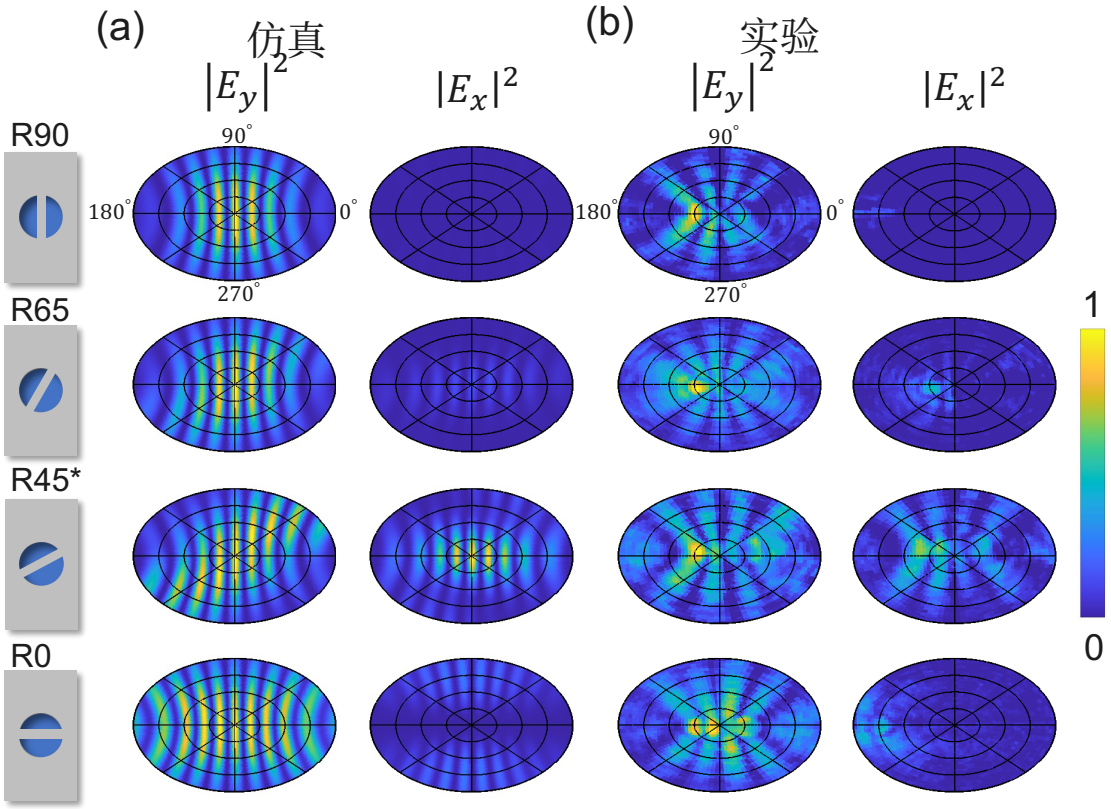


图4. 远场散射揭示了旋转反狭缝光子晶体波导中的LE 场贡献。(a) 由FDTD 仿真获得的远场投影，以及 (b) 从旋转角为R90、R65、R45和R0的硅反狭缝光子晶体波导实验测得的面外远场散射。对于R90和R0结构，远场响应由TE 分量主导，与类 TE 导模一致。随着旋转角接近45度，LE 场分量变得愈发显著，导致远场散射轮廓发生明显改变。需要注意的是，R45反槽光子晶体波导的仿真远场散射与R44反狭缝光子晶体波导器件测得的远场光谱进行了比较。在R45附近观测到的远场散射证实，LE 场具有不可忽略的同相分量，并且可以

从混合纵向电-横向电模式中分解出来，从而使其能够用作独立的面内偏振通道。所有远场强度均归一化至反槽光子晶体波导每个旋转角下的最大值。

最重要的是，观测到的远场散射直接证明 LE 分量包含不可忽略的同相贡献。由于远场辐射取决于近场分量的振幅及其相对相位，纯粹反相的 LE 场只会贡献无功能量，因此辐射较弱。相比之下，R45反槽光子晶体波导中观测到的显著远场散射表明，LE 场与磁场之间形成了部分同相关系。最后，我们的测量表明，可以从混合 TE–LE 模中选择性地分离出 LE 场分量，使其能够作为独立的偏振通道使用。这一能力为利用多种面内偏振自由度的片上数据通信方案开辟了途径。

结论

总之，我们通过理论和实验证明，在一维反槽光子晶体波导中，借助破缺镜面对称性所促成的与 TE 模式的杂化，可以使 LE 模直接变得可访问且可测量。通过破坏光子晶体单元的面内镜像对称性，可形成两个导引混合 LE-TE 模，其中纵向和横向电场分量共同贡献于能流。此外，这些杂化模式通过模式耦合形成新型带隙，且带隙宽度可随反槽旋转角连续调节。当旋转角为 45° 时，带隙宽度达到最大，LE 模与 TE 模之间的耦合也最强。能带结构计算、模拟场分布和透射光谱、多极分解散射模拟，以及透射和远场散射测量均为 LE-TE 混合模式提供了证据。这些 LE-TE 混合模式有望推动相关应用的发展，涵盖

从偏振复用的新维度，到提高嵌入波导中的量子发射体的耦合效率。更广泛而言，这项工作确立了纵向电场工程作为集成光子学中的一个额外自由度，为紧凑型平面平台上的新型器件概念开辟了途径。

参考文献

1. Dorn, R.、Quabis, S. 和 Leuchs, G. 径向偏振光束的更锐聚焦。*Phy s. Rev. Lett.* **91**，233901（2003）。2. Urbach, H. P. 和 Pereira, S. F. 具有最大纵向电场分量的聚焦电场。*Phys. Rev. Lett.* **100**，123904（2008）。3. Driscoll, J. B. 等。硅纳米线波导中的大纵向电场（Ez）。《光学快报》 **17**，2797–2804（2009）。4. Novotny, L.、Beversluis, M. R.、K. S. 杨沃思和 Brown, T. G. 通过单分子探测纵向场模式。*Phys. Rev. Lett.* **86**，5251–5254（2001）。5. Sick, B.、Hecht, B. 和 Novotny, L. 通过环形照明对单分子进行取向成像。*Phys. Rev. Lett.* **85**，4482–4485（2000）。6. Johnson, T. W. 等。基于模板剥离金字塔、具有亚20纳米分辨率的高度可重复近场光学成像。《*ACS*纳米》 **6**，9168–9174（2012）。7. Novotny, L.、Sánchez, E. J. 和 Sunney Xie, X. 使用高阶厄米–高斯光束照明金属针尖进行近场光学成像。《超显微学》 **71**，21–29（1998）。8. Sheppard, C. J. R. 和 Choudhury, A. 环形光瞳、径向偏振和超分辨率 n. 《应用光学》 **43**, 4322–4327（2004）。9. Maxwell, J. C. 《电磁学论》。（克拉伦登出版社，牛津，1873）。

10. 瑞利勋爵。第十八篇：论电波通过管道的传播，或介质圆柱体的振动。《伦敦、爱丁堡和都柏林哲学杂志及科学杂志》 **43**, 125–132（1897）。11. 奥利弗·赫维赛德。电磁理论。（《电气工程师》印刷出版公司，伦敦，1894）。12. A. 索末菲。论无线电报中波的传播。《物理学年鉴》**333**, 665–736（1909）。13. M. 玻恩 & E. 沃尔夫。《光学原理：光传播、干涉与衍射的电磁理论》。（剑桥大学出版社，剑桥，1999）。14. E. 沃尔夫。光学系统中的电磁衍射——I：像场的积分表示。《伦敦皇家学会会刊：数学与物理科学辑》 **253**, 349–357（1959）。

15. K. S. 杨沃思 & Brown, T. G. 高数值孔径柱矢量光束的聚焦。《光学快报》 **7**, 77–87 (2000)。

16. Y. 罗 等 利用衍射光学元件高效产生纵向偏振光针。*Results Opt.* **10**, 100332 (2023)。

17. G. M. 勒曼 & U. 列维。紧聚焦条件下径向偏振和渐晕对光斑尺寸的影响。《光学快报》 **16**, 4567–4581 (2008)。

18. E. 德斯克罗维 等 收集模式下微加工全金属镀层近场探针的光学特性。《美国光学学会杂志A辑》 **22**, 1432–1441 (2005)。19. Y. 小泽 & S. 佐藤。通过二次谐波产生观察聚焦激光束的纵向场。《美国光学学会杂志B辑》 **25**, 175–179 (2008)。

20. C. L. 徐、Huang, W. P.、M. S. 斯特恩与Chaudhuri, S. K. 通过有限差分法进行全矢量模式计算。《英国电气工程师学会会刊：光电子学》《英国电气工程师学会会刊：光电子学》 **141**, 281–286 (1994)。

21. Zhao, P. 等 微光纤布拉格光栅中的纵向耦合效应。光学通信 **285**, 4655–4659 (2012)。 22. Sanatinia, R.、Anand, S. 与Swillo, M. 单根磷化镓纳米柱中二次谐波产生的模式工程。纳米快报 **14**, 5376–5381 (2014)。 23. Baghban, M. A. 与Gallo, K. 纵向场对铌酸锂纳米柱中二次谐波产生的影响。*APL Photonics* **1**, 061302 (2016)。 24. Shao, Z.、Zhu, J.、Chen, Y.、Zhang, Y. 与Yu, S. 通过横向自旋角动量工程诱导的光的自旋轨道相互作用。自然通讯 **9**, 926 (2018)。 25. Hu, S. 与Weiss, S. M. 极致光集中光子晶体腔的设计。*ACS Photonics* **3**, 1647–1653 (2016)。 26. Oskooi, A. F. 等 Meep：一种用于基于时域有限差分法进行电磁仿真的灵活自由软件包。计算物理通讯 **181**, 687–702 (2010)。 27. Joannopoulos, J. D.、Johnson, S. G.、Winn, J. N. 与Meade, R. D. 光子晶体：塑造光的流动。载于光子晶体：塑造光的流动（第二版）（普林斯顿大学出版社, 2011）。 28. Dai, D. 与Zhang, M. 具有倾斜侧壁的绝缘体上硅纳米线中的模式杂化与转换。《光学快报》 **23**, 32452–32464 (2015)。 29. Evlyukhin, A. B. 与Chichkov, B. N. 用于定向光散射的多极分解。物理评论*B* **100**, 125415 (2019)。 30. Koshelev, K. 与 Kivshar, Y. 介质共振超光子学。*ACS Photonics* **8**, 102–112 (2021)。 31. Sedeh, H. B. 与 Litchinitser, N. M. 人工设计光学材料赋能的奇异光学。《纳米光子学》 **12**, 2687–2716 (2023)。

方法

反槽光子晶体波导的制备

在一片绝缘体上硅晶圆上制备了一系列旋转角从 0° 到 90° 不等的反槽光子晶体波导。该晶圆具有 270 nm 厚的硅器件层和 3 μm 厚的埋氧层。采用标准电子束光刻和反应离子刻蚀技术，在同一批次中于单个芯片上制备这些波导。所制备的光子晶体空气孔半径为 152 nm，反槽条宽度为 85 nm，晶胞周期为 420 nm；硅二氧化层顶部的硅纳米梁波导宽度和厚度分别为 740 nm 和 270 nm，每个波导包含 25 个单胞。

能带图计算（MEEP）

使用 MEEP 和时域有限差分（FDTD）方法计算反槽单胞的光子能带图。为激发 TE能带，采用电场沿 y方向偏振的高斯光束；对于 LE能带，则采用电场沿 x 方向偏振的高斯光束。杂化能带通过 z 偏振磁场激发。仿真采用 25 nm 的网格尺寸。单胞几何结构由一层厚 220 nm 的硅层组成，并将其建模为悬空结构 （为降低计算成本，省略衬底）；晶格周期为 400 nm，半径为 150 nm，单胞高度为 700 nm，反槽条宽度为 70 nm。

透射与远场仿真（Ansys Lumerical FDTD）

不同反槽光子晶体波导带边模式的透射光谱和远场散射图样，采用与制备样品相同尺寸和单胞数量的三维时域有限差分仿真进行计算。对于每个反槽旋转角，透射与远场投影分布均由单个仿真文件获得，仿真时间为100,000 fs。网格由x-y平面内精度因子为1的自动非均匀网格构成，覆盖304 nm × 304 nm的方形区域，并对圆形空气孔区域施加10 nm ×10 nm的覆盖网格。在每条反槽光子晶体波导的输入端入射基模 TE模式光源，并在输出端的y-z平面放置频域功率监视器。为计算远场特性，近场频域场分布监视器采集了反槽光子晶体波导上方约165 nm处的电场和磁场分量。随后，利用Lumerical内置的远场投影算法，将记录的近场数据变换为远场强度分布。通过分离近场电场的E_x 和E_y 分量并分别投影到远场，提取偏振分辨远场图样，从而得到偏振分解远场强度分布。

多极分解模拟（COMSOL Multiphysics）

每个反狭缝光子晶体晶胞被视为一个超原子，并采用多极展开法确定其光学响应，详见补充信息注释4。进行了全波电磁模拟，以获得每个超原子的前向和后向散射功率。数值模拟采用在COMSOL Multiphysics中实现的有限元法（FEM）进行。具体而言，我们使用了

波动光学模块来求解频域中的麦克斯韦方程组。对于有限超原子链，我们使用半径为4λ 的球形充气域作为背景介质。同时，将厚度为0.6λ 的完美匹配层置于背景介质外侧，用作吸收体并避免后向散射。选用四面体网格以提高精度并促进数值收敛。在沿x轴的平面波照明下研究这些超构原子，电场沿y轴指向。在计算多极矩之后，随后计算了前向和后向的散射场。

透射测量

透射测量采用边缘耦合配置进行，使用超连续谱激光器（NKT Photonics）产生的TE偏振光，覆盖800至2500 nm的波长范围。光源经吸收式中性密度滤光片（NE10A-B，Thorlabs）滤光后，通过平凸透镜（LA1951-AB-ML，Thorlabs）从自由空间耦合进入保偏单模光纤（P1-1550PM-FC-2，Thorlabs）。随后，使用定制锥形光纤（TPMJ-3U-1550-8/125-0.25-10-2.5-14-1，OZ Optics）将光耦合进入反槽光子晶体波导。通过光纤间U形平台（FBP-A-FC，Thorlabs）将锥形光纤与单模保偏（PM）光纤连接，以保持偏振控制。U形平台的一侧连接锥形光纤，另一侧连接单模PM光纤（P1-1550PM-FC-2，Thorlabs）。为与光谱仪连接，使用光纤适配器（ADAFCSMA1，Thorlabs）将PM光纤连接至SMA光纤（QP1000-2-VIS-NIR，Ocean Optics），该光纤与工作波长范围为900至1700 nm的光纤耦合光谱仪（NIR Quest，Ocean Optics）兼容。

远场散射测量

使用配备20倍长工作距离物镜（Mitutoyo Plan Apo NIR，NA=0.40，工作距离20 mm）的铟镓砷相机（WiDy SWIR 640U-S，New Imaging Technologies）记录远场散射光学分布。将安装在连续旋转架（CLR1，Thorlabs）上的线偏振片（LPNIR100，Thorlabs）通过C接口转SM1适配器（SM1A9，Thorlabs）置于相机前方，以实现对远场散射光的偏振分辨探测。测量在一致且受控的条件下进行：相机曝光时间固定为20 ms，输入激光功率为-4 dBm，并尽量降低环境照明。对于每个器件，在由透射光谱表征确定的带边模式和非带边模式所对应的波长处采集远场图像。为进行偏振分析，每个带边模式图像均在相对于波导轴（光传播方向）呈0度和90度的两个正交偏振下采集。旋转架的最小步长为2°，由此确定测量中偏振对准的角度容差。为尽量减小输入波导与第一个光子晶体单元之间界面处光散射的贡献，在相同偏振设置下，从相应的非带边模式图像中减去每个带边模式图像。在采集器件图像之前，进行了交叉偏振校准，以确定旋转架的绝对角位置。来自已知线偏振光源的照明穿过安装在旋转架上的线偏振片，并由相机成像。对于每一个2度旋转角，总强度均通过对所有

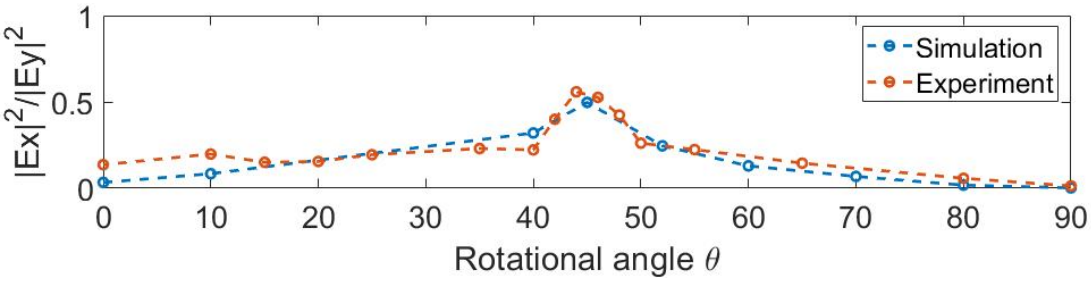
记录图像中的像素值求和得到，且环境光保持相同。测得的强度随分析器角度呈正弦依赖关系，最大强度对应于偏振片透射轴与入射偏振对齐，最小强度则表示交叉偏振（正交）取向。旋转架在这两个位置的读数定义了绝对偏振参考角。该校准用于分析反槽光子晶体波导的远场偏振特性。

数据可用性如有合理需求，可向通讯作者索取支持本研究结论的数据。

致谢本研究部分得到了美国国家科学基金会（ECCS1407777、ECCS1809937、ECCS2240562）的资助。反槽光子晶体在纳米相材料科学中心（CNMS）制备；该中心是橡树岭国家实验室美国能源部科学办公室用户设施。扫描电子显微镜成像在范德堡纳米科学与工程研究所（VINSE）完成。感谢 T. Hong 就远场成像分析所用 MATLAB 脚本提供有益的讨论和指导。感谢 J. C. Ndukaife、G. Zhu 和 I. Hong 提供使用超连续谱激光器的机会及技术协助。感谢 J. D. Caldwell 和 G. Zhu 就耦合模提供有益的讨论。

作者贡献S.H. 和 S.M.W. 构思了本项目。在 S.H. 和 C.S.W. 的协助下，Y.Z. 完成了能带结构、场分布、透射和远场散射模拟。H.B.S. 完成了多极分解模拟。C.S.W. 完成了耦合模理论计算。Y.Z. 和 C.S.W. 制备了光子晶体。Y.Z. 完成了测量。Y.Z.、H.B.S.、C.S.W.、N.M.L.、S.H. 和 S.M.W. 分析了数据并撰写了论文。

利益冲突 作者声明不存在利益冲突



扩展数据图 1 | 不同反槽旋转角的反槽光子晶体波导在基谐振波长处，沿x方向的电场平方（$|E_x|^2$）与沿y方向的电场平方（$\%E_y\%^2$）之比，在远场轮廓上的积分结果；数据来自远场散射模拟和实验测量。仿真结果（蓝色虚线，仅供参考）与实验结果（橙色虚线，仅供参考）吻合良好。对于R45反槽光子晶体波导，该比值约为50%。

补充信息

补充说明 1 至 4

补充 充说明 1 | 利用高斯定律探讨纵向电场（LE）分布的起源

要研究 E_x 与 H_z 之间的相位关系（x 指沿波导的传播方向，如补充图 S1 所示），只需考察 E_x 与 E_y之间的相位，因为净能量传输要求 E_y 与 H_z 同相。因此，当发现 E_x 与 E_y同相时，可以得出结论：E_x 也与 H_z 同相，从而能够为沿波导的能流做出贡献。

已知电场横向分量 $\boldsymbol{E}$（E_y， E_z），我们可以根据高斯定律[1]表示纵向分量E_x：

$$\nabla \cdot (\varepsilon \boldsymbol{E}) = 0 \tag{S1}$$

公式 S1 可展开为显式形式，以展示横向分量和纵向分量。

$$\nabla_t \cdot (\varepsilon \boldsymbol{E_t}) + \frac{\partial \varepsilon}{\partial x} E_x + \varepsilon \frac{\partial E_x}{\partial x} = 0 \tag{S2}$$

对于介电常数在所有方向上均匀的均匀波导，$\varepsilon(r) = \varepsilon(x, y, z)$ 是一个常数函数，使得 $\partial\varepsilon/\partial x = \partial\varepsilon/\partial y = \partial\varepsilon/\partial z = 0$。假设 $\boldsymbol{E}$ 可表示为 $\underline{\boldsymbol{E}}(x, y, z) = \boldsymbol{E_t} e^{-i\beta x}$，则公式 S2 对于分段均匀波导可简化为：

$$E_x = \frac{\nabla_t \cdot \boldsymbol{E_t}}{i\beta} \tag{S3}$$

其中 $\beta = \frac{2\pi n_{eff}}{\lambda_0}$，$n_{eff}$ 是波导的有效折射率，λ_0 是光的自由空间波长[2]。如公式 S3 中的虚数因子 i 所示，E_x 与 $\boldsymbol{E_t}$,以及磁场（H_z）处于正交相位（即相位相差 $\pi/2$），因此不会对波导中的净能流产生贡献。

然而，在一维光子晶体波导中，[3], 介电常数沿传播方向 x呈周期性变化。在这种情况下，$\partial\varepsilon/\partial x \neq 0$。因此，公式 S2 中 $\underline{E_x}$ 的表达式变为：

$$E_x = A\left(\frac{\partial \varepsilon}{\partial x}(\nabla_t \cdot (\varepsilon \boldsymbol{E_t})) + i\varepsilon\beta(\nabla_t \cdot (\varepsilon \boldsymbol{E_t}))\right) \tag{S4}$$

其中

$$A = -\frac{1}{\left(\frac{\partial \varepsilon}{\partial x}\right)^2 + (\varepsilon\beta)^2} \tag{S5}$$

因此，对于介电常数沿传播方向不恒定的波导，纵向电场 E_x 具有实部（即方程 S4 中的第一项），因此可以与 E_t部分同相，也可以与磁场部分同相，从而能够对净能量传输作出贡献。

补充　　说明 2 | 利用安培定律推导纵向电场（LE）分布的起源

在此，我们直接从安培–Maxwell 定律推导光的纵向电场分量（E_x）的一般公式：

$$\nabla \times \vec{H} = \vec{J} + \frac{\partial \vec{D}}{\partial t} \tag{S6}$$

假设介质波导的电流密度为 $\vec{J} = 0$，单频激励的谐波时间依赖性为 $e^{i\omega t}$，并将电位移场改写为 $D''''' = \varepsilon \vec{E}''$，我们可以在频域中表示公式 S6：

$$\nabla \times \vec{H} = i\omega \vec{D} = i\omega\varepsilon \vec{E} \tag{S7}$$

接下来，我们展开 H'''' 的旋度以显示其各分量：

$$\left(\frac{\partial H_z}{\partial y} - \frac{\partial H_y}{\partial z}\right)\hat{x} + \left(\frac{\partial H_x}{\partial z} - \frac{\partial H_z}{\partial x}\right)\hat{y} + \left(\frac{\partial H_y}{\partial x} - \frac{\partial H_x}{\partial y}\right)\hat{z} = i\omega\varepsilon \vec{E} \tag{S8}$$

如果假设光为 H_z 偏振，其中 $H_x = H_y \approx 0$，这在传统波导平台中被视为 TE 偏振态，则公式 S8 可简化为：

$$\left(\frac{\partial H_z}{\partial y}\right)\hat{x} - \left(\frac{\partial H_z}{\partial x}\right)\hat{y} = i\omega\varepsilon \vec{E} \tag{S9}$$

根据方程 S9，我们得到了如下关系：这些关系不仅描述了由 H_z分布产生的、众所周知的光的横向E_y 分量，也描述了由 H_z 分布产生的光的纵向E_x 分量：

$$E_y = \left(-\frac{1}{i\omega\varepsilon}\right)\left(\frac{\partial H_z}{\partial x}\right) \tag{S10}$$

$$E_x = \left(\frac{1}{i\omega\varepsilon}\right)\left(\frac{\partial H_z}{\partial y}\right) \tag{S11}$$

方程 S11 表明，沿 y 方向的H_z 磁场存在梯度的所有电磁波都应具有一定的E_x 贡献。具有H_z 偏振、但沿 y 方向没有梯度的电磁波（例如平面波）则没有纵向电场分量 E_x。需要指出的是，在相量表示中，所有电磁场都具有实部和虚部，两者共同描述电场的振幅和相位。因此，使用上述方程时，应始终考虑 H_z 的实部和虚部。

最后，我们在图 S1 中展示公式 S11 与 Ansys Lumerical 的时域有限差分仿真结果一致。这里，我们考虑了反槽旋转角度各不相同的反槽光子晶体波导。这些结果来自采用布洛赫边界条件的晶胞仿真。每个晶胞均由沿 y 方向取向的电偶极子激发。在（x, y）平面内的电场和磁场分布取自

沿 z 方向的硅波导中心。H_z 和E_x 场分量直接取自仿真，而the$\partial H_z/\partial y$ 分布根据H_z 场分布计算得出。计算得到的$\partial H_z/\partial y$ 与仿真的 E_x 分布高度吻合，这与公式 S11 一致，并表明H_z 磁场分量是决定纵向电场强度的主要因素。

Su补充说明 3 | 耦合模理论描述能带杂化与反交叉 **g**

耦合模理论为从能带结构的角度定量描述 TE-LE杂化提供了有力框架[4,5]。方程 S12 展示了用于量化纯 TE 和纯 LE 光子模式之间杂化的特征值问题：

$$\begin{bmatrix} f_{TE} & g_{TE-LE} \\ g_{TE-LE} & f_{LE} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \alpha_{TE} \\ \alpha_{LE} \end{bmatrix} = f_{hybrid} \begin{bmatrix} \alpha_{TE} \\ \alpha_{LE} \end{bmatrix} \quad (S12)$$

其中，f_{TE} 和 f_{LE} 分别表示纯 TE 能带和纯 LE 能带的频率，f_{hybrid} 表示混合能带的频率，g_{TE-LE}（或 g）表示纯 TE 能带与纯 LE 能带之间的耦合强度，而 α_{TE} 和 α_{LE} 通常称为混合系数。按照惯例，$|\alpha_{TE}|^2 + |\alpha_{LE}|^2 = 1$。每个变量都是$k_x$（即波矢）的函数，因此需要针对每个 k_x数值求解该特征值问题。最后，该特征值问题有两个解，分别对应 $f_{hybrid} = f_{UH}$ 和 $f_{hybrid} = f_{LH}$，其中 UH 表示上杂化带，LH 表示下混合能带。

与许多系统不同，当反槽从其R0和R90位置旋转离开时，我们无法解耦系统以获得纯TE能带和纯 LE 能带（f_{TE} 和f_{LE}）。R0和R90是未耦合系统，但它们的纯能带不同（即$f_{TE(R0)} \neq f_{TE(R90)}$ 和$f_{LE(R0)} \neq f_{TE(R90)}$）。为解决这一问题，我们通过对R0未耦合能带和R90未耦合能带进行线性插值拟合，来近似中间角度下的纯TE能带和纯 LE 能带。我们发现五阶多项式足以描述这一行为（式S13）。该方法经经验判定是充分的，因为模拟的交叉点或简并点位于新型带隙的中点。纯TE能带和LE能带的拟合分别列于表S1和表S2。

$$f_{pure} = p_1(k_x)^5 + p_2(k_x)^4 + p_3(k_x)^3 + p_4(k_x)^2 + p_5(k_x) + p_6 \quad (S13)$$

既然我们已经得到纯TE能带和LE能带的合适近似，就可以开始求解g（即耦合强度系数）的特征值问题。在每个k_x处，我们可以按如下方式求解行列式：

$$\begin{aligned} \det|A - \lambda I| = 0 &= \det\left|\begin{bmatrix} f_{TE} & g \\ g & f_{LE} \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} f_{hybrid} & 0 \\ 0 & f_{hybrid} \end{bmatrix}\right| \\ &= \det\left|\begin{bmatrix} f_{TE} - f_{hybrid} & g \\ g & f_{LE} - f_{hybrid} \end{bmatrix}\right| \\ 0 &= (f_{TE} - f_{hybrid})(f_{LE} - f_{hybrid}) - g^2 \\ g &= \sqrt{(f_{TE} - f_{hybrid})(f_{LE} - f_{hybrid})} \\ g &= \sqrt{f_{TE}f_{LE} - f_{TE}f_{hybrid} - f_{LE}f_{hybrid} + f_{hybrid}^2} \end{aligned} \quad (S14)$$

在这里，我们可以使用能带结构模拟中计算得到的杂化能带频率。由于在中间角度确定纯 TE 能带和纯 LE 能带时采用了近似，因此上、下混合能带所确定的 g 系数略有不同。我们通过对g_{UH} （上混合能带）与

g_{LH}（下混合能带）取平均，得到给定旋转角下的 $g(k_x)$。从物理上看，g 表示相对于拟合纯能带的偏差，因此其单位为频率。直观而言，g 最容易在反交叉点处理解；在该处，g 等于带隙大小的一半。图 S2 展示了所有反槽角度下，在交叉点或反交叉点处计算得到的 g 。

通过使用 MATLAB 等软件求解该特征值问题，我们也能重现特征值——即杂化能带的频率。图 S3 展示了能带结构仿真数据，以及假定的纯 TE 能带和纯 LE 能带，还有利用我们计算得到的 g 系数重新计算出的杂化能带。杂化能带结构仿真与重新计算的混合能带拟合高度吻合，这不仅表明近似得到的纯 TE 能带和纯 LE 能带足够准确，也证明仅凭 g 系数就足以描述两个模式之间的耦合行为。

在同一步骤中，确定了特征向量 α_{TE} 和 α_{LE} （混合系数）。该混合系数表示在 k_x 空间中的每个点上，某一混合能带中纯 TE 能带或 LE 能带所占的比例。由于只有两个模式相互耦合，这些系数互为补数（即，如果上杂化带由 30% 的 TE 和 70% 的 LE 构成，那么下混合能带将由 70% 的 TE 和 30% 的 LE 构成）。了解杂化模式的混合比例，并不意味着纵向电场分量更强或更弱；相反，它表明在特定的 k_x 矢量处，杂化模式更接近哪种模式分布（纯 TE 或纯 LE）。此外，混合系数的斜率反映了两个模式的耦合方式——是能量快速交换（耦合较弱），还是耦合模式在 k_x 空间中以两个模式的组合形式停留更久（耦合程度较高）。上杂化带的混合系数如图 S4 所示（下混合能带的混合系数则与之相反）。

补充说明 4 | 多极分解

非磁性超原子的光学响应由外部电磁场诱导的电流密度 $\boldsymbol{J}_{in}$ 和极化$\boldsymbol{P}_{in}$ 表征。对于单色场，这些量通过 $\boldsymbol{J}_{in} = -i\omega\boldsymbol{P}_{in}$相联系，其中 ω 表示角频率。光与超原子相互作用时，诱导极化与粒子内部的场分布之间的关系为 $\boldsymbol{P}_{in} = \epsilon_0(\epsilon_p - \epsilon_d)\boldsymbol{E}_p$，其中 ϵ_0、 ϵ_p 和ϵ_d 分别表示自由空间、超原子和周围介质的介电常数，而 $\boldsymbol{E}_p$ 是超原子内部的总电场[6–8]。因此，内部场分布可以直接改变诱导极化，进而改变超原子内部被激发的多极矩。在远场区域，散射场可表示为

$$\boldsymbol{E}_{\boldsymbol{n}}(\boldsymbol{r}) = i\omega\mu_0 \frac{\exp(ik_d r)}{4\pi r}\left(\bar{\bar{I}} - \boldsymbol{nn}\right)\int_{V_s} \boldsymbol{J}_{in}(\boldsymbol{r}')\exp\left(-ik_d(\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{r}')\right)d\boldsymbol{r}' \tag{S15}$$

其中， $\boldsymbol{n} = \boldsymbol{r}/r$ 是从粒子中心指向观测点的单位矢量， k_d 是周围介质中的波数，而$\hat{\bar{I}}$ 是一个3 × 3 酉矩阵。散射波的多极分解可通过以下三种方法获得：(a) 在超原子体积内某个径向矢量为$\boldsymbol{r_0}$ 的位置附近，对 $\exp(-ik_d r)$进行泰勒展开；(b) 将超原子内的感应电流密度写成克罗内克δ函数的形式，即$\boldsymbol{J}_{in}(\boldsymbol{r}') = \int \boldsymbol{J}_{in}(\boldsymbol{r})\delta(\boldsymbol{r}' - \boldsymbol{r})d\boldsymbol{r}'_{Vs}$，然后在点$\boldsymbol{r_0}$ 附近对$\delta(\boldsymbol{r}' - \boldsymbol{r})$项进行泰勒展开；(c) 直接对 $\exp(-ik_d r)$项进行球谐展开。如参考文献6–8所示，前两种方法（(a)和(b)）得出的结果相同，且给出长波近似（LWA）范围内的多极矩；而第三种方法则可得到有限尺寸散射体所产生散射场的多极分解，适用于任意尺寸，并给出精确的多极矩。为获得精确的多极矩，将 $\exp(-ik_d(\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{r}'))$ 的平面波表示展开为球谐函数，得到

$$\exp\left(-ik_d(\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{r}')\right) = 4\pi\sum_{l=0}^{\infty}\sum_{m=-l}^{l}(-i)^l j_l(k_d r')Y_{lm}^*(\theta,\varphi)Y_{lm}(\theta,\varphi) \tag{S16}$$

其中，$Y_{lm}(\theta,\varphi)$ 表示球谐函数，$j_l(k_d r')$ 是 l 阶球贝塞尔函数，星号 (*) 表示复共轭。将式 (S15) 代入式 (S16)，即可得到散射电场：

$$\boldsymbol{E}_{\boldsymbol{n}}(\boldsymbol{r}) = i\omega\mu_0 \frac{\exp(ik_d r)}{4\pi r}\left(\bar{\bar{I}} - \boldsymbol{nn}\right)\sum_{l=0}^{\infty}(-i)^l(2l+1)\int_{V_s}\boldsymbol{J}_{in}(\boldsymbol{r}')P_l(\cos(\gamma))d\boldsymbol{r}' \tag{S17}$$

其中，$P_l(\cos(\gamma))$ 是 l 阶勒让德多项式，由球谐函数加法定理推导而得。随后，可根据以下不同的 l 组合，直接推导出超原子中感生的多极矩（最高至电四极矩项）

$$\boldsymbol{D} = \int j_0(k_0 r')\boldsymbol{P} d\boldsymbol{r}' + \frac{k_d^2}{10}\int \frac{15 j_2(k_d r')}{(k_d r')^2}\left[(\boldsymbol{r}'\cdot\boldsymbol{P})\boldsymbol{r}' - \frac{1}{3} r'^2\,\boldsymbol{P}\right] d\boldsymbol{r}',$$

$$\boldsymbol{m} = -\frac{3}{2} i\omega \int \frac{j_1(k_d r')}{k_d r'}[\boldsymbol{r}'\times\boldsymbol{P}]\, d\boldsymbol{r}',$$

$$\widehat{M} = -5i\omega \int \frac{j_2(k_d r')}{(k_d r')^2}([\boldsymbol{r}'\times\boldsymbol{P}]\otimes\boldsymbol{r}' + \boldsymbol{r}'\otimes[\boldsymbol{r}'\times\boldsymbol{P}]) d\boldsymbol{r}' \tag{S18}$$

$$\hat{Q} = \int \frac{3 j_1(k_d r')}{k_d r'}\left[3(\boldsymbol{r}'\otimes\boldsymbol{P} + \boldsymbol{P}\otimes\boldsymbol{r}') - 2(r'\cdot\boldsymbol{P})\bar{\bar{I}}\right] d\boldsymbol{r}'$$

$$+ 6k_d^2 \int \frac{j_3(k_d r')}{(k_d r')^3}\left[5\,\boldsymbol{r}'\otimes\boldsymbol{r}'(\boldsymbol{r}'\cdot\boldsymbol{P}) - r'^2(\boldsymbol{P}\otimes\boldsymbol{r}' + \boldsymbol{r}'\otimes\boldsymbol{P}) - (\boldsymbol{P}\cdot\boldsymbol{r}')r'^2\bar{\bar{I}}\right] d\boldsymbol{r}'$$

其中，$\boldsymbol{D}$ 表示精确总电偶极矩（TED），$\boldsymbol{m}$ 表示精确磁偶极矩（MD），而 $\hat{Q}$ 和 $\widehat{M}$ 分别表示电四极矩（EQ）和磁四极张量（MQ）。算符 $\cdot$、$\times$ 和 $\otimes$ 分别表示标量积、向量积和张量积。

补充表1至3

补充表 1 | 纯TE波段的五阶多项式拟合。只有R0和R90实现了解耦，因此可以直接拟合（R^2 显示直接拟合的值）。中间角度拟合通过对R0和R90拟合的系数进行线性插值得出。

反槽光子晶体波导	p_1	p_2	p_3	p_4	p_5	p_6	R^2
R0	-118.59	140.70	-17.90	-37.80	17.86	-2.03	0.9966
R15	139.71	-372.56	386.07	-195.04	48.06	-4.32	--
R30	398.00	-885.81	790.04	-352.28	78.26	-6.60	--
R45	656.29	-1399.07	1194.01	-509.51	108.45	-8.89	--
R60	914.58	-1912.32	1597.98	-666.75	138.65	-11.17	--
R75	1172.87	-2425.58	2001.95	-823.99	168.85	-13.46	--
R90	1431.17	-2938.83	2405.92	-981.23	199.05	-15.75	0.9977

补充表 2 | 纯LE能带的五阶多项式拟合。只有 R0 和 R90 解耦后能够直接拟合（R^2 显示直接拟合的值）。中间角度拟合是通过对 R0 和 R90 拟合的系数进行线性插值得出的。

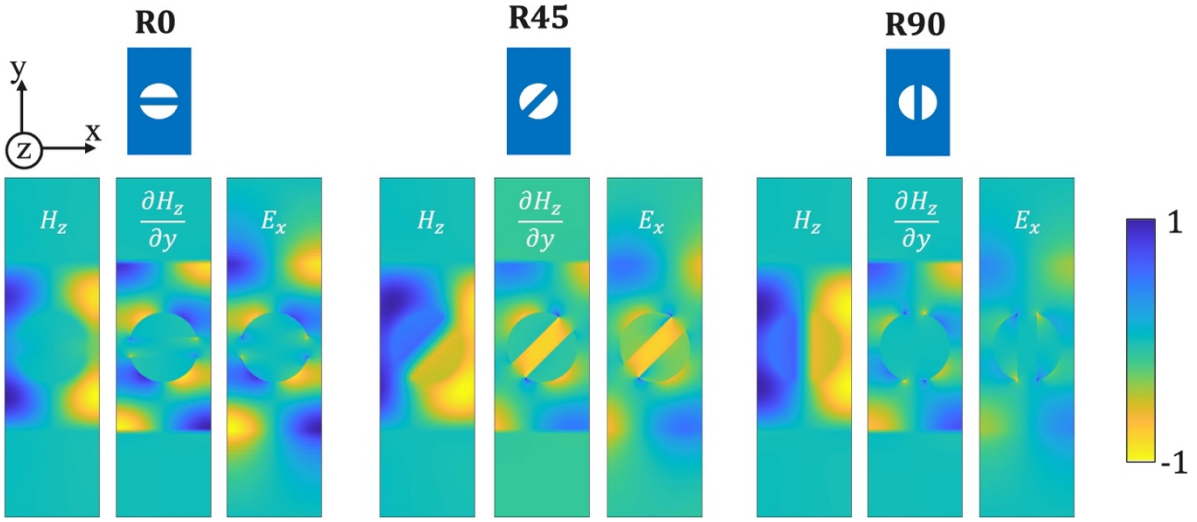
反槽光子晶体波导	p_1	p_2	p_3	p_4	p_5	p_6	R^2
R0	25.60	-69.52	70.14	-33.79	8.09	-0.51	1.0000
R15	40.29	-99.66	94.77	-43.86	10.15	-0.68	--
R30	54.98	-129.78	119.39	-53.93	12.21	-0.84	--
R45	69.67	-159.94	144.01	-64.00	14.26	-1.01	--
R60	84.36	-190.08	168.63	-74.07	16.32	-1.17	--
R75	99.04	-220.22	193.25	-84.14	18.38	-1.34	--
R90	113.73	-250.36	217.87	-94.21	20.44	-1.50	1.0000

补充表 3 | 不同自由空间和导波系统中与纵向电场相关属性的比较。

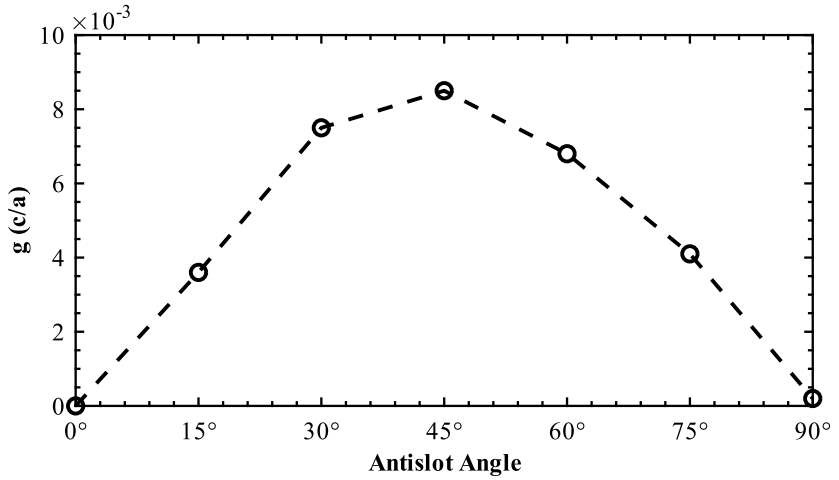
	系统类型	$\frac{\partial \varepsilon}{\partial x} \neq 0$	显著的纵向电场分量	混合 纵向电-横向电模式	参考文献
自由空间	激光束	**No**	**No**	-	-
	聚焦激光束	**Yes**	**Yes**	-	例如，[9]
导波	脊形波导	**No**	**No**	**No**	-
	纳米线波导	**No**	**Yes**	**No**	例如，[2]
	传统光子晶体波导	**Yes**	**No**	**No**	-
	旋转反槽光子晶体波导	**Yes**	**Yes**	**Yes**	This work

注：x 表示沿波导的传播方向

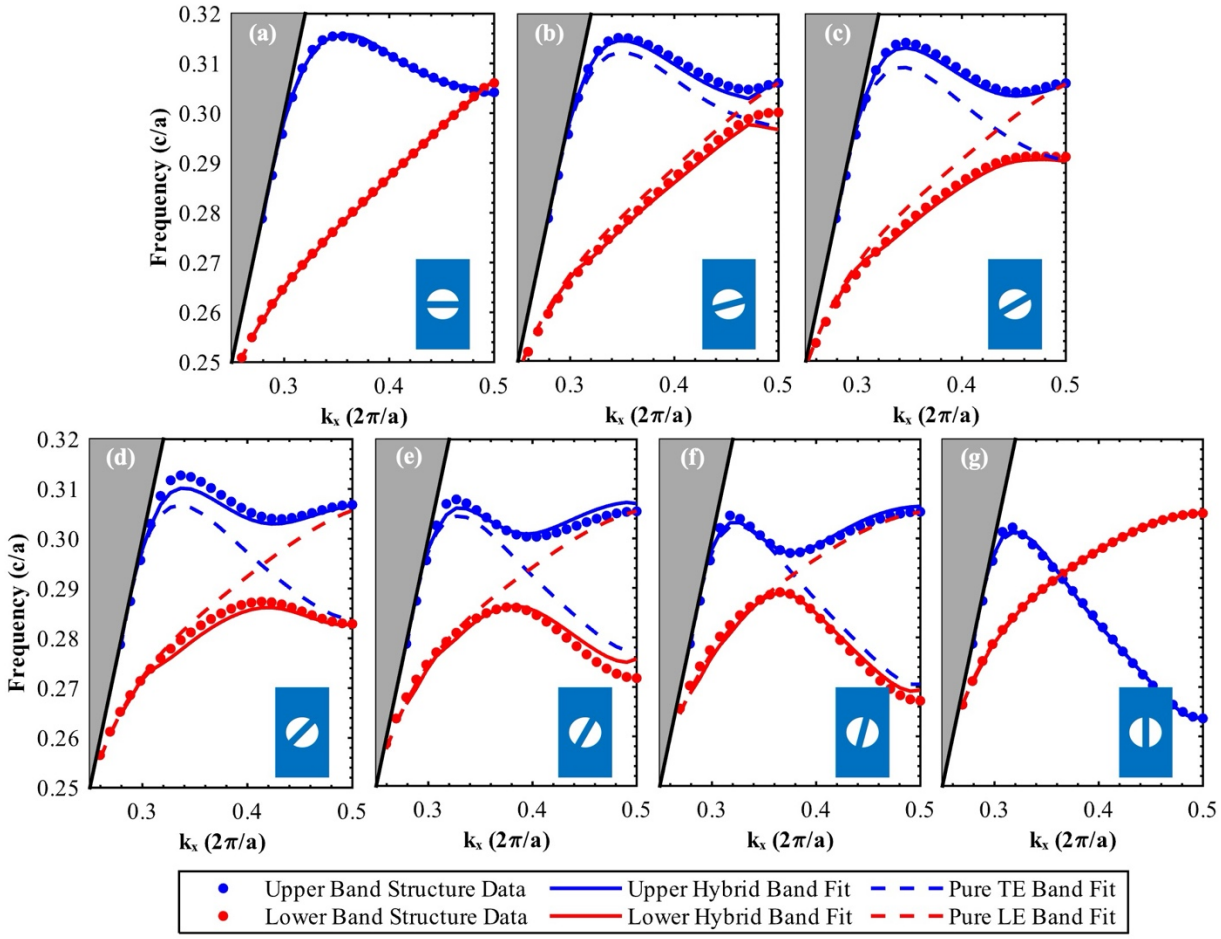
补充图 1 至 4



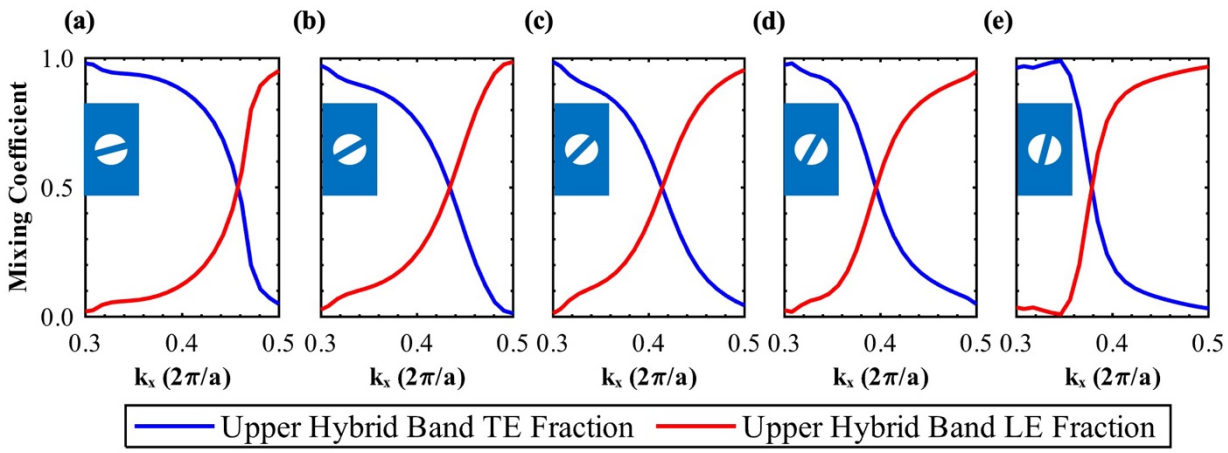
补充图 S1 | 不同反槽光子晶体波导单元的比较，包括其仿真H_z分布、计算得到的$\partial H_z/\partial y$以及仿真E_x 分布。H_z 和E_x 分布为直接仿真结果。$\delta H_z/\delta y$ 分布仅使用H_z 仿真数据计算得出，并与E_x仿真结果成正比，这一点可从匹配的空间场分布看出。这种良好的一致性表明，H_z 是E_x 分布的关键贡献因素。



补充图 S2 | 各反交叉点处耦合强度系数随反狭缝角的变化（g（k_x =反交叉））。在反交叉点处，g 在物理上代表带隙宽度的一半。



补充图 S3 | （a）R0、（b）R15、（c）R30、（d）R45、（e）R60、（f）R75 和（g）R90 的能带结构数据及拟合结果。圆形标记表示通过能带结构模拟（即 MPB）确定的数据。虚线表示假定的未耦合的纯 TE 和纯 LE 能带，这些能带是利用表 S1 和 S2 中的拟合结果近似得到的。实线表示用于描述杂化的耦合模理论拟合结果——该拟合仅使用近似的纯 TE 和 LE 模式以及平均拟合g 系数。该拟合结果与模拟能带结构数据高度吻合，表明该模型能够充分描述能带杂化。



补充图 S4 |（a）R15、（b）R30、（c）R45、（d）R60 和（e）R75 上杂化带的混合系数。未显示 R0 和 R90，因为对于非耦合系统，上杂化带和下混合能带的定义并不明确。越接近 R45，杂化模式保持显著混合状态的时间就越长，k_x

补充信息参考文献

1. C. L. 徐、W. P. Huang、M. S. 斯特恩与S. K. Chaudhuri. 通过有限 ite

差分法进行模式的全矢量计算。*IEE*《光电子学》 **141**，281–286（1994）。2. J. B. Driscoll 等。硅纳米线波导中的大纵向电场（Ez）。《光学快报》，*OE* **17**，2797–2804（2009）。3. J. D. Joannopoulos、S. G. Johnson、J. N. Winn与R. D. Meade。光子晶体：塑造光的传播。载于《光子晶体：塑造光的传播（第二版）》（普林斯顿大学出版社，2011）。4. P. Chak、S. Pereira与J. E. Sipe。周期性侧耦合微腔和光子晶体结构的耦合模理论。物理评论*B* **73**，035105（2006）。5. A. Tuniz、A. Y. Song、G. Della Valle与C. M. de Sterke。等离激元耦合器的耦合模理论。《应用物理评论》 **11**，021309（2024）。6. A. B. Evlyukhin与B. N. Chichkov。定向光散射的多极分解。物理评论*B* **100**，125415（2019）。7. K. Koshelev与Y. Kivshar。介质共振超光子学。*ACS Photonics* **8**，102–112（2021）。8. H. B. Sedeh与N. M. Litchinitser。由人工设计光学材料赋能的奇异光学

.

《纳米光子学》 **12**, 2687–2716（2023）。9. Novotny, L., Beversluis, M. R., K. S. 杨沃思 & Brown, T. G. 通过单分子探测纵向场模式。*Phys. Rev. Lett.* **86**, 5251–5254（2001）。