有限尺度与随机无序对耦合光学阵列的影响

讨论班讲义

物理科学与技术学院 物理学（弘毅）

2025 年 5 月 18 日

目录

制造误差（随机无序）对光子器件的实用性挑战

- 光子器件的制造中存在不可避免的误差，为光子器件的实际应用带来挑战
- 拓扑光子器件，尽管声称其鲁棒性源于对称性保护的拓扑光子态，例如基于谷量子霍尔效应的光子晶体波导，但是在实际实验中仍观察到了由纳米级的孔刻蚀误差引起的强烈背向散射效应（工作波长为 1550 纳米附近）

nature photonics

Article https://doi.org/10.1038/s41566-023-01189-x

Observation of strong backscattering in valley-Hall photonic topological interface modes

耦合光学阵列尺寸对其性能表达的限制

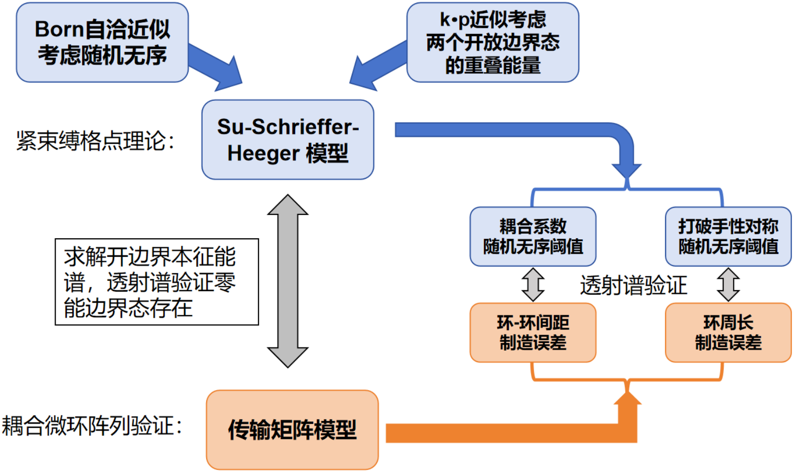
- 对于基于光子能带和光子带隙设计的耦合阵列器件，其性质依赖于离散偏移对称性。
- 实际的光子器件总是有限尺寸的，不具有周期性。尽管在大尺寸下可以近似看成周期性的，其由于边界条件的改变性质总会有所变化，例如周期边界下光子晶体板 (PCS) 中支持的具有无限大品质因数 Q 的连续谱中束缚态 (BIC) 通常会由于有限边界导致的侧漏等因素变为仅具有有限 Q 值 (quasi-BIC)

传统的纯数值方法在随机无序问题研究中的局限

- 需要对规模较大的耦合腔/环系统进行直接求解 (例如使用 COMSOL Multiphysics 等)，并且要进行随机无序分析则需要多次采样，这对算力要求极高
- 需求一套理论方法，使得其能有效预言在多大的随机无序强度和至少多大的尺寸下所设计的光学阵列性质得以保留，尝试给出随机无序强度的阈值，进而对工艺误差提出限制条件。

本研究目标与框架

- 建立随机无序的理论模型从而给出工艺误差上限

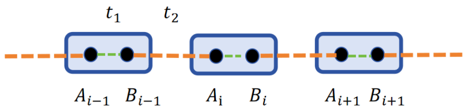


Su-Schrieffer-Heeger 模型简介

- 两类同质量原子 A, B 交替排列成一维链状结构，仅考虑相邻格点的相互作用，原胞内跳跃系数记作 t_1，胞间跳跃系数记作 t_2，以下均有 $t_{1,2} > 0$
- 实空间哈密顿量为：

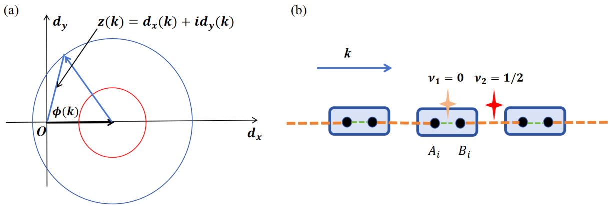
$$H = \sum_i t_1 c^\dagger_{A,i} c_{B,i} + t_2 c^\dagger_{B,i} c_{A,i+1} + h.c.$$

- $c^\dagger_{A,i}, c^\dagger_{B,i}$ 是 A_i, B_i 的产生算符，$[c_i, c^\dagger_j] = \delta_{ij}$



- 周期边界条件：$c_n = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k c_k e^{ikn}$，$H = \sum_k c^\dagger_{a,k} h_{ab}(k) c_{b,k}$

- $h(k) = \mathbf{d}(\mathbf{k}) \cdot \sigma = (t_1 + t_2 \cos(k))\sigma_x + t_2 \sin(k)\sigma_y$
- $E_\pm(k) = \pm\sqrt{(t_1 + t_2 \cos(k))^2 + t_2^2 \sin^2(k)} = \pm|\mathbf{d}(\mathbf{k})|$
- $|u_k\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(1, e^{-i\phi(k)})^{\mathsf{T}}$，其中 $\phi(k) = arg(d_x(k) + id_y(k))$
- $\gamma_{Zak} = \int_{BZ} \langle u_k| i\partial_k |u_k\rangle\, dk = \int_{BZ} \frac{1}{2}\partial_k\phi(k)dk = 2\pi\nu$



- 在 $t_1 < t_2$ 时系统有非平庸的 Zak 相位和 Wannier 中心

$\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}$ 近似下有限尺度效应建模

- 能隙位于 $k=\pm\pi$ 令 $k=\pm\pi+q$，q 为微扰量

$$h(q)=(t_1-t_2)\sigma_x-q\sigma_y=\begin{pmatrix}0 & (t_1-t_2)+it_2q\\ (t_1-t_2)-it_2q & 0\end{pmatrix}$$

- 开边界下 $q=-i\partial_x$，在 $[0,+\infty)$ 上令 $E=0$ 解得

$$\hat{\psi}_{edge}(x)=\sqrt{2/\xi}(1,0)^{\mathsf{T}}exp(-\frac{x}{\xi})$$

指数衰减的形式表示这是一个短程态，局域化长度

$$\xi=1/|t_1/t_2-1|$$

而能隙 $\Delta=2|t_1-t_2|$，说明局域化长度与能隙之间是反比的

- 实际的晶格尺寸总是有限的，假设链的边界为 $x = 0, L$
- 左右两个端点的局域态记作 $\hat{\psi}_{edgeL}(x)$ 和 $\hat{\psi}_{edgeR}(x)$，这两个态在有限的尺寸下会发生交叠从而导致零能态不严格，计算可知重叠能量 ϵ 与能隙 Δ 的比值是：

$$\epsilon/\Delta = L/\xi e^{-L/\xi}$$

- 可以认为一个良好局域化的系统一般要具有至少 6ξ 个原胞，因为 $6e^{-6} \approx 0.014 < 2\%$ 已经基本满足微扰要求，反之可以认为在能隙中的边缘态会与体拓展态进行杂化，从而不具有良好的局域性。

自洽 Born 近似方法

- 对于哈密顿量 H，其格林函数 $G = (E - H)^{-1}$ 表示系统对外的单位响应。
- 含随机无序项 V 的哈密顿为 $H' = H + V$，其对应的格林函数为 $G' = (E - H - V)^{-1}$
- 定义具有分布函数 $p(\sigma)$ 的随机项 σ 对应的随机平均算符 $\langle f(x,\sigma)\rangle = \int d\sigma p(\sigma) f(x,\sigma)$
- $\langle G'\rangle$ 则代表了含有随机无序的系统对外界的平均响应，计算有：

$$\langle G'\rangle = (E - H - \Sigma)^{-1}$$

  其中 $\Sigma = \langle VGV\rangle + O(V^3)$ 是有效自能（一阶项 $\langle V\rangle = 0$）
  由此可定义平均哈密顿量 $H_{avg} = H + \Sigma$
- 无序强度较小时 H_{avg} 将保留 H 中的对称性

不打破手性对称的随机无序

- 在周期边界 SSH 模型的哈密顿量 H 的背景下计算自能
- 考虑跳跃系数上的随机无序扰动量 $\Delta t_{1,2}$ 与未扰动量 $t_{1,2}$ 之比符合高斯分布：$\Delta t_1/t_1, \Delta t_2/t_2 \sim N(0, W^2)$,$W$ 代表了随机无序的强度
- 计算得自能的 2×2 分块形式为：

$$\Sigma = \begin{pmatrix} \Sigma_0 & \Sigma_1 & \mathbf{0}_{2\times 2} & \mathbf{0}_{2\times 2} & \cdots & \Sigma_{-1} \\ \Sigma_{-1} & \Sigma_0 & \Sigma_1 & \mathbf{0}_{2\times 2} & \cdots & \mathbf{0}_{2\times 2} \\ \mathbf{0}_{2\times 2} & \Sigma_{-1} & \Sigma_0 & \Sigma_1 & \cdots & \mathbf{0}_{2\times 2} \\ \mathbf{0}_{2\times 2} & \mathbf{0}_{2\times 2} & \Sigma_{-1} & \Sigma_0 & \cdots & \mathbf{0}_{2\times 2} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \\ \Sigma_1 & \mathbf{0}_{2\times 2} & \mathbf{0}_{2\times 2} & \mathbf{0}_{2\times 2} & & \end{pmatrix}$$

- 与 H 的形式对比可发现将随机无序效应平均地考虑进哈密顿量中，相当于跳跃系数存在一个增（减）量，对称性不变。这与之前的预期是相符的。对应新的跳跃系数分别为：

$$\widetilde{t_1}=t_1+\frac{t_1}{t_2}W^2\frac{t_1+t_2\eta_1}{\eta_2-\eta_1},\widetilde{t_2}=t_2+\frac{t_2}{t_1}W^2\frac{t_1\eta_1+t_2}{\eta_2-\eta_1}$$

- η_1,η_2 是方程 $z^2-2\alpha(E)z+1=0$ 的两根，其中 $\alpha(E)=\frac{E^2-(t_1^2+t_2^2)}{2t_1t_2}$。
- 考察边缘态对应的 $E=0$ 位置，此时 $\eta_1=-t_1/t_2$，$\eta_2=-t_2/t_1$，代入有：

$$\widetilde{t_1}=t_1,\widetilde{t_2}=t_2-t_2W^2$$

,

- 此时边缘态的局域化长度 $\xi_W = 1/(1 - t_1/(t_2 - t_2 W^2))$
- 根据判据 $L > 6\xi_W$，给出：

$$W < W_c = \sqrt{1 - t_1/t_2(\frac{L}{L-6})}$$

- 有限尺度因子 $L/(L-6)$ 起到了放大随机无序限制的作用，说明了尺寸越小的体系将对随机无序更加敏感。
- 例如对于 $t_1/t_2 = 1/2$ 的系统，无限长的情况 $W_c = 1/\sqrt{2}$，而对于 $L = 15$ 的情况 $W_c' = 1/\sqrt{6}$，比无限长情况要求更高，这说明尺寸越大的系统抗无序性能越好。

对角项（打破手性对称）的随机无序

- 对于所有的格点，假设其格点上存在随机无序势能：

$$V_d = \omega_0 diag\left(\delta_{11}, \delta_{12}, \delta_{21}, \ldots\right)$$

ω_0 代表了孤立格点的本征能量，在不存在无序时所有的格点本征能量是一样的，这使得哈密顿量满足手性对称性。

- δ 是设置的随机项，其下标标记不同的格点。假设其满足高斯分布：$\delta \sim N(0, W_d^2)$，W_d 即代表了无序强度。
- 由此计算得

$$\Sigma_d = \langle V_d G V_d \rangle = \mathbf{I} W_d^2 E \omega_0^2 / (t_1 t_2 (\eta_2 - \eta_1))$$

正比于单位阵 $\mathbf{I}$，这说明对角项随机无序不会导致能隙变化。

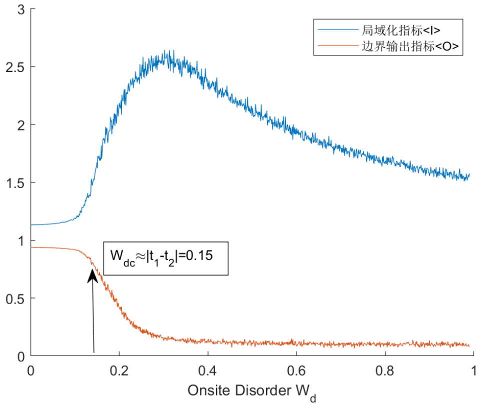
- 注意到在不保持手性对称的情况下，能隙本身其实是不具有良定义的，其零能边缘态也不再稳定。所以研究随机无序对于边缘态的平均效应是不合适的
- 定性角度，由于开边界局域态的高局域性，可以认为局域态的能量仅受到局域点处本征能量随机无序的支配，即 $|\Delta E_{edge}| \sim \omega_0 W_d$。
- 随着无序强度 W_d 的增加，当这个局域态能量大到与体态能量可比拟时，局域态有较大概率跃迁到体态中，可认为局域态不复存在，即临界的对角项随机无序强度满足：

$$\omega_0 W_{dc} = |t_1 - t_2|$$

- 为了验证该观点，定义局域化指标 I 和边界输出 O:

$$I = 1/\sum_j |\psi_j|^4, O = |\psi_1|^2 + |\psi_{2N}|^2$$

- 其中 $t_1 = 0.02$,$t_2 = 0.05$,$\omega_0 = 1$



传输矩阵模型

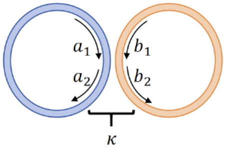
- 将很多处于相同本征频率 ω_m 下的谐振环耦合起来，系统会有集体失谐 $\delta\Omega = \omega - \omega_m$，$\omega$ 是集体共振频率
- 对于一个谐振环，在两个耦合点（θ_1, θ_2）之间，环内电场可写为：

$$E(\theta) = E_{1,2}\exp\left(\pm i(m + \delta\Omega l/2\pi v_g)(\theta - \theta_1)\right)(\theta_1 < \theta < \theta_2)$$

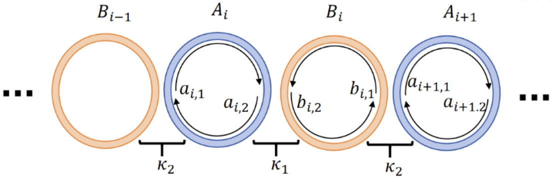
其中 m 是谐振级次，v_g 是群速度，l 是环周长

- 在耦合点处，散射关系如图所示

$$\begin{pmatrix} a_2 \\ b_2 \end{pmatrix} = S(\kappa)\begin{pmatrix} a_1 \\ b_1 \end{pmatrix}, S(\kappa) = \begin{pmatrix} \sqrt{1-\kappa^2} & i\kappa \\ i\kappa & \sqrt{1-\kappa^2} \end{pmatrix}$$



- 尝试利用微环阵列构造 SSH 模型，先将 2N 个相同的，且都处于 m 级谐振的谐振环排成一列，其次引入两种耦合系数 κ_1, κ_2 交替排列，周期性结构如图所示



记一周的失谐相位为 $\delta = \delta\Omega l/v_g$，则递推散射关系为

$$\begin{pmatrix} a_{i,2} \\ b_{i,2} \end{pmatrix} = S(\kappa_1)e^{i(\delta/2+m\pi)}\begin{pmatrix} a_{i,1} \\ b_{i,1} \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} a_{i+1,1} \\ b_{i,1} \end{pmatrix} = S(\kappa_2)e^{i(\delta/2+m\pi)}\begin{pmatrix} a_{i+1,2} \\ b_{i,2} \end{pmatrix}$$

传输矩阵与格点模型对应

- 周期边界下 $a(b)_{i+1,1(2)} = a(b)_{i,1(2)}e^{ik}$
- 则由散射关系可以导出：

$$\begin{pmatrix} e^{-ik} & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} S(\kappa_2) \begin{pmatrix} e^{ik} & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} S(\kappa_1) \begin{pmatrix} a_{i,1} \\ b_{i,1} \end{pmatrix} = S(k) \begin{pmatrix} a_{i,1} \\ b_{i,1} \end{pmatrix} = e^{-i\delta(k)} \begin{pmatrix} a_{i,1} \\ b_{i,1} \end{pmatrix}$$

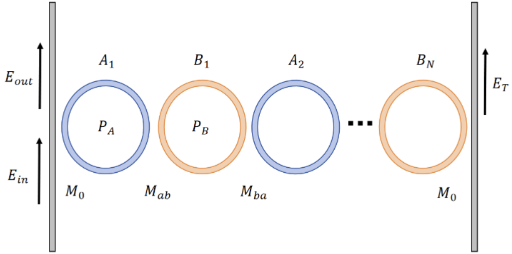
- 在弱耦合近似 $(\kappa_1, \kappa_2 \ll 1)$ 下，可解得失谐的带结构为

$$\delta(k) = \pm\sqrt{\kappa_1^2 + \kappa_2^2 + 2\kappa_1\kappa_2 \cos k}$$

与紧束缚模型中的结果一致

透射谱

- 透射谱是研究光子晶体的重要实验方法，能在实验上测得光子带隙
- 在开边界微环阵列的一端通过直波导将入射光耦合进阵列中，在另一端再用一个直波导耦合透射光，以此模拟一维微环阵列在存在外界入射光时的情况，而反射光将从入射端波导耦合出去。这一建模如图所示

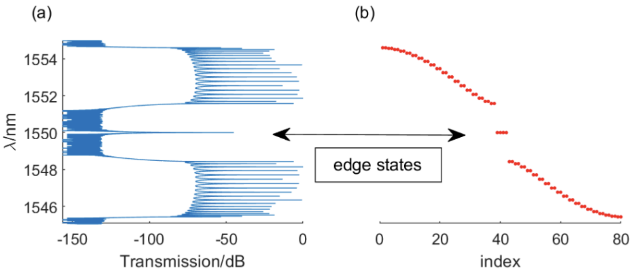


- 假设输入光频率为 ω，由散射关系出发，可得到每一次耦合的层递推矩阵 M 和环内传输矩阵 P，从入射位置递推至出射位置，最终的形式为

$$\begin{pmatrix} E_{in} \\ E_{out} \end{pmatrix} = M_0(P_A M_{ab} P_B M_{ba})^{N-1} P_A M_{ab} P_B M_0 \begin{pmatrix} E_T \\ 0 \end{pmatrix} = \mathbf{M}(\omega) \begin{pmatrix} E_T \\ 0 \end{pmatrix}$$

- 由此可得强度透射率
$T(\omega) = 1 - |E_{out}/E_{in}|^2 = 1 - |\mathbf{M}_{21}/\mathbf{M}_{11}|^2$

- 绘制透射率与真空中的波长 $(\lambda = 2\pi c/\omega)$ 关系，与开边界能谱对比有:



在带隙位置，透射率保持为 0，不允许光射入其中。但因为有边缘态的存在，透射率在能隙的中间也存在一个峰值（事实上是两个态几乎简并了），其仅在拓扑情况（$\kappa_1 < \kappa_2$）存在。

环-环间距误差与环周长误差对透射谱的影响

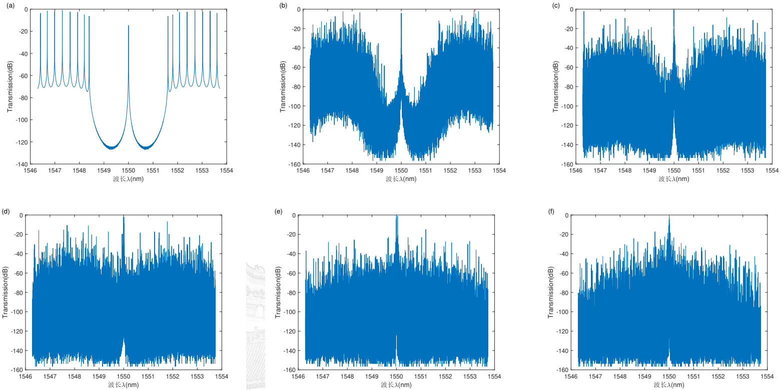
环-环间距误差:

- 微环之间采用隐失波耦合，两个距离为 r 的波导耦合系数为:

$$\kappa = \kappa_0 exp(-\frac{r}{r_0})$$

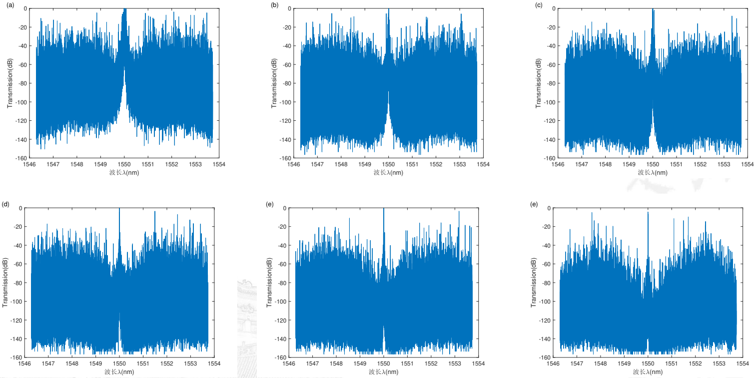
  相对耦合误差 $|\Delta\kappa/\kappa| = |\Delta r/r_0| \sim N(0, W^2)$ 对应到格点模型中跳跃系数随机无序 $\Delta t/t$ 中
- 对于文中 (21 页表 3.1) 的耦合系数数据，要设计 $L = 15$ 的器件，则其无序强度阈值为 $W_c \approx 0.4$, 不考虑有限尺度效应的阈值为 $W_c' \approx 0.7$

- 数值结果 1：保持无序强度 $W = 0.4$, 验证含有限尺度效应的阈值 $W_c = 0.4$, 而并非 $W_c' = 0.7$



固定阵列长度，只改变耦合制造下的随机无序下绘制的透射率包络。其无序强度从编号 (a) 到 (f) 各为 $W = 0, 0.2, 0.35, 0.45, 0.6, 0.71$

- 数值结果 2：尺寸越大的系统边缘态越稳定，越抗无序



保持无序强度 $W = 0.4$ 不变，仅改变系统原胞数（尺寸）下绘制的透射率包络，其无序强度从编号 (a) 到 (f) 各为：$L = 8, 11, 13, 15, 17, 20$

环周长制造误差

- 微环周长的制造误差以致于各个环的本征频率存在差别，由于本征频率满足：

$$n_{eff}\omega_m l/c = 2\pi m$$

将其微分得到：$|\Delta\omega_m/\omega_m| = |\Delta l/l| \sim N(0, W_d^2)$ 对应着对角项上的随机无序。

- 将失谐相位的带隙换算至圆频率上，可知：

$$\Delta\Omega_{gap} = 2|\kappa_2 - \kappa_1| \cdot \frac{c}{n_g l}$$

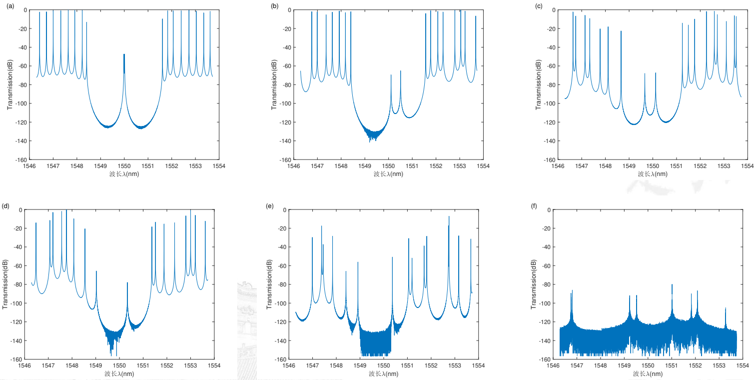
- 根据第二章给出的判据，无序导致的能量差不能使得边界态跃迁至体态中。这给出了 $W_d\omega_m < \frac{1}{2}\Delta\Omega_{gap} = |\kappa_2 - \kappa_1| \cdot \frac{c}{n_g l}$

由此可以解得无序强度阈值为

$$W_d < |\kappa_2 - \kappa_1| \cdot \frac{n_{eff}}{n_g 2\pi m} \approx 0.00098$$

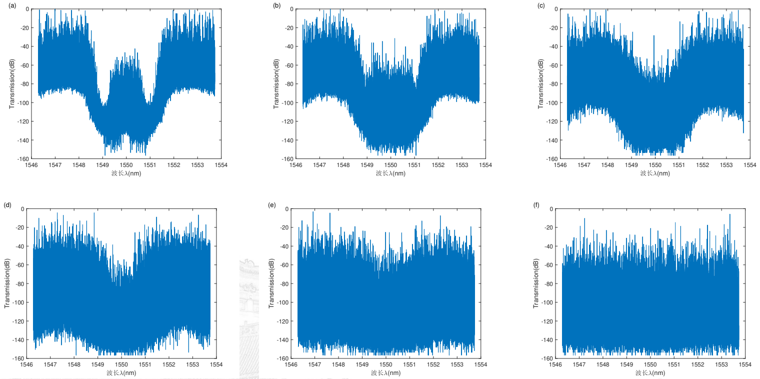
进而给出环周长制造误差的要求。

- 数值结果 3：验证对角项无序阈值 $W_{dc} = 0.00098$



考虑环周长制造误差时的单次采样透射谱，从 (a) 到 (f) 无序强度依次为 $W_d = 0.0001, 0.0005, 0.0008, 0.001, 0.0015, 0.01$

- 数值结果 4：验证无序强度 W_d 跨越 W_{dc} 和 $2W_{dc}$ 时系统的边界态消失和能隙消失行为



考虑环周长制造误差时的多次采样透射率包络，从 (a) 到 (f) 无序强度依次为 $W_d = 0.0004, 0.0007, 0.001, 0.0015, 0.002, 0.0025$

结论与展望

本文结论

- 得到对应的工艺误差阈值为：
  $|\Delta r| = r_0 W_c \sim 45.7\text{nm}, |\Delta l| = W_{dc} l \approx 2.93\text{nm}$
- 联合有限尺度效应的耦合系数随机无序的阈值
- 对角项随机无序阈值与系统的转变
- 耦合微环阵列的透射谱验证

展望

- 非紧束缚模型
- 更多参数，更多维误差分析