

同濟大學

TONGJI UNIVERSITY

毕业设计（论文）

课题名称 非阿贝尔拓扑荷性质研究

副标题

学院 物理科学与工程学院

专业 光电信息科学与工程

学生姓名 李星汉

学号 1953079

指导教师 姜天舒

日期 2025 年 4 月 21 日

## 非阿贝尔拓扑荷性质研究

## 摘要

拓扑相变研究为物质分类提供了超越传统 Landau-Ginzburg 理论范式的新视角。在单带隙体系中，哈密顿量的拓扑分类通常由阿贝尔群描述；而当考虑多带隙耦合体系时，则需要引入非阿贝尔拓扑理论来刻画更丰富的量子物态特性。研究表明，非阿贝尔拓扑荷作为新的拓扑不变量，可以同时预测所有带隙中边界态的数量和空间分布特征。

本文系统研究了凝聚态体系中拓扑物相的微观起源，以 Su-Schrieffer-Heeger (SSH) 模型为范例，阐明了拓扑相变的关键特征。通过构建四能级宇称-时间 (PT) 对称哈密顿量，并基于准一维光子晶体平台，在实验上实现了非阿贝尔拓扑荷的观测与操控。理论计算与实验结果的吻合验证了非阿贝尔拓扑保护的鲁棒性。本研究为光子体系中拓扑边界态的主动调控提供了新思路，对开发新型拓扑光子器件具有指导意义。

**关键词：**拓扑绝缘体，非阿贝尔拓扑荷，宇称-时间对称

# Research on the Properties of Non-Abelian Topological Charges

## ABSTRACT

The study of topological phase transitions provide a new perspective beyond the traditional Landau-Ginzburg symmetry-breaking paradigm. In single-bandgap systems, the topological classification of Hamiltonian is usually described by Abelian group. When multiple-bandgap system is considered, non-Abelian topology is needed to depict the richer quantum state properties. Studies show that non-Abelian topological charge as a new topological invariant can predict both the number and spatial distribution of edge states in all bandgaps.

In this paper, we systematically study the microscopic origins of topological matter in condensed systems. We use the Su-Schrieffer-Heeger(SSH) model as an example to illustrate the key features of topological phase transition. By constructing four-level parity-time (PT) symmetric Hamiltonian based on quasi-one-dimensional photonic crystal system, we experimentally realize the observation and control of non-Abelian topological charges. The agreement between theory and experiment verifies the robustness based on non-Abelian topology. Our study provides new ideas towards the active control of topological edge states in photonic systems and is of guiding importance for the development of new topological photonic devices.

**Key words:** topological insulator, non-Abelian topological charge, parity-time symmetry

## 目 录

1	引 言.....	1
1.1	拓扑物理研究背景.....	1
1.2	非阿贝尔拓扑研究.....	1
1.3	本文所作的工作.....	1
2	非阿贝尔拓扑理论基础.....	3
2.1	拓扑分类的初步认识.....	3
2.2	简单拓扑模型：SSH 模型.....	3
2.3	同伦理论.....	4
2.4	PT 对称性、序参量.....	5
2.5	光子晶体中的本征值问题.....	5
3	非阿贝尔拓扑模型.....	9
3.1	模型示意图.....	9
3.2	拓扑荷的几何意义.....	10
3.3	数值计算方法.....	10
3.4	边界态的验证.....	11
3.5	本征态的演化.....	13
3.6	非阿贝尔体边对应关系.....	13
4	实验.....	15
4.1	实验细节.....	15
4.2	实验结果.....	16
5	分析和讨论.....	19
5.1	实验理论对比.....	19
5.2	实验装置缺陷.....	19
6	总结展望.....	20
6.1	总结.....	20
6.2	展望.....	20
	参考文献.....	21
	谢辞.....	23

## 1 引言

### 1.1 拓扑物理研究背景

凝聚态中最早的拓扑物态起源于量子霍尔效应（QHE）<sup>[1]</sup>，该效应首次在二维电子气系统中被发现，其中霍尔电导表现为量子化平台：

$$\sigma_{xy} = \frac{ve^2}{h} \quad (1.1)$$

其中 $v$ 是一个整数（或在分数量子霍尔效应中为有理数），代表拓扑不变量。最初人们认为这种现象源于朗道能级的填充，但随后 Thouless-Kohmoto-Nightingale-den Nijs（TKNN）的工作表明：整数量子霍尔电导实际上与陈数（Chern number）这一拓扑不变量直接相关<sup>[2]</sup>，揭示了拓扑与物理可观测量之间的内在联系。

这一发现促进了对于无外磁场以及朗道能级系统的研究。1988年 Haldane 提出了反常量子霍尔效应（Anomalous Quantum Hall Effect）<sup>[3]</sup>。在这个模型中系统不含有磁场，但是具有非零的陈数，说明时间反演对称性的打破可以实现拓扑态。2005年 Kane 和 Mele 基于石墨烯提出量子自旋霍尔效应（Quantum Spin Hall Effect）<sup>[4]</sup>，指出即使不打破时间反演对称性，也能通过自旋-轨道耦合（spin-orbital coupling）实现拓扑绝缘态，这一研究将拓扑物态推广到了更广泛的材料体系中去。

在不同的维度上，人们陆续发现并预测了各种类型的拓扑绝缘体。1979年 Su, Schrieffer 和 Heeger 在 1979 年提出的 SSH 模型作为最简单的一维拓扑物态，成功解释了聚乙炔的导电性<sup>[5]</sup>。2006年 Bernevig 等基于 HgTe 的能带结构构建了二维模型，预测 CdTe/HgTe/CdTe 量子阱具有强烈的自旋轨道耦合，可以实现量子自旋霍尔效应<sup>[6]</sup>。该预测于 2007 年被 König 等人的实验首次证实<sup>[7]</sup>。对于三维的拓扑绝缘体，2007 年 Fu 和 Kane 预测了 Bi<sub>1-x</sub>Sb<sub>x</sub> 作为强拓扑绝缘体的潜力<sup>[8]</sup>，2008 年 Hsieh 等验证了其拓扑特性<sup>[9]</sup>。

此后拓扑物理迅速扩展到其他体系中，如拓扑超导体<sup>[10]</sup>，拓扑光子晶体<sup>[11,12]</sup>与声子晶体<sup>[13,14]</sup>，非厄密系统的拓扑态<sup>[15]</sup>等。拓扑成为理解物理体系全局性质和稳定性的重要工具。

### 1.2 非阿贝尔拓扑研究

多条能带系统的拓扑不变量往往是非阿贝尔的。2019 年 Wu 等首次提出非阿贝尔拓扑荷<sup>[16]</sup>，用于解释能带中某些不可去除的交叉点（如 Weyl 点、结点线等），并且拓宽了传统的拓扑分类。实验上，2021 年 Guo 等利用传输线网络实现三能带模型<sup>[17]</sup>，测量到本征态在动量空间的旋转，同年 Jiang 等对 PT 对称的四能带系统进行研究<sup>[18]</sup>，并提出了非阿贝尔体边对应关系。这些研究为后来光学和声学系统的研究奠定了基础。

### 1.3 本文所作的工作

本文研究了光子晶体中的非阿贝尔拓扑荷，主要做了以下工作：

- （1）介绍了拓扑绝缘体的研究背景以及非阿贝尔拓扑的近期进展。

(2) 从理论上介绍了拓扑物理的有关概念，包括简单的拓扑模型和需要的数学工具。

(3) 使用 COMSOL Multiphysics 仿真非阿贝尔拓扑模型，计算了不同情况下的拓扑荷，并验证了非阿贝尔体边对应关系。

(4) 在光子晶体平台中实现边界态的观测。

(5) 分析讨论。

(6) 展望。

装

订

线

## 2 非阿贝尔拓扑理论基础

### 2.1 拓扑分类的初步认识

根据固体能带论，导体具有半满的能带，使得电子可以自由跃迁；绝缘体的禁带宽度较大，某些能量的电子态不被允许，因此表现出绝缘性质；而半导体则有较小的禁带宽度，在一定外界条件下电子可以发生跃迁，从而参与导电。这对物质的导电性质作了初步分类。然而某些特殊的体系成为反例，比如量子霍尔态，其中朗道能级

$$E_n = \hbar \omega_c \left( n + \frac{1}{2} \right) \quad (2.1)$$

呈现出分立的特征，这表面上符合绝缘体的特点，但是该系统拥有一个导电的边界态，说明其导电机制与传统的材料有所不同。

对于一个通常的绝缘体，其具有完全填满的价带与宽禁带。由于价带所有状态都被电子占据，外电场无法使电子自由移动，常温下电子几乎无法从价带跃迁到导带，因此电导率极低。对于半导体，其能隙较小，在一定温度或者外场激励下电子可以跃迁。如果考虑连续调整哈密顿量中的参数，使得能带在不发生简并的情况下连续变形，这样的过程在不同绝缘态之间定义了拓扑等价类，从这个意义上，二者属于同一种物相。这样的绝缘体和真空等价，因为其同样具有对应正电子的价带和电子的导带，并且拥有能隙。

对于量子霍尔态而言，这样的拓扑分类同样适用吗？答案是否定的。传统能带理论中电子状态由布洛赫波函数描述，其中准动量  $k$  是平移对称性对应的好量子数，标志着电子在倒空间中的状态。当施加外界磁场时，由于哈密顿量中多出一项矢势，系统不再有晶格平移对称性，此时  $k$  不再是好量子数，这样的态可以通过时间反演对称性分类。

### 2.2 简单拓扑模型：SSH 模型

以 SSH 模型为例，原胞中有两种不同类型的格点 A 和 B，原胞内耦合强度记为  $v$ ，原胞间耦合强度记为  $w$ ，其动量空间哈密顿量为：

$$H(k) = \begin{bmatrix} 0 & v + we^{-ik} \\ v + we^{ik} & 0 \end{bmatrix} \quad (2.2)$$

当  $v$  与  $w$  不相等时，能隙打开，此时我们可以计算两条能带的 Zak 相位。当  $v > w$  时，Zak 相位为 0，记作拓扑平庸的；当  $v < w$  时，Zak 相位为  $\pi$ ，记作拓扑非平庸的。此时系统在开放边界下可以观察到有边界态出现，其能量落在能隙之中。

根据 TKNN 的工作，系统的导电特性可以由一个拓扑不变量刻画，它在哈密顿量的绝热演化下是不变的，在 SSH 模型中为 Zak 相位。当两种不同拓扑不变量的结构交界时，能带必须在其内发生闭合，在该处电子可以发生跃迁，因而出现了导电的边界。量子霍尔效应中的霍尔电导可以表示为贝利通量在布里渊区的面积分，它和狄拉克磁单极子的原理一样是量子化的。对于量子霍尔态，其拓扑不变量可以理解为二维到三维的映射，这描述了一个曲面，通常的绝缘态没有亏

格，而量子霍尔态亏格数为 1，这样从拓扑意义上区分了两种不同的物态。

从手性对称性角度理解，哈密顿量满足

$$\sigma_z H(k) \sigma_z^{-1} = H(k) \quad (2.3)$$

其可以写成

$$H(k) = \vec{d}(k) \cdot \vec{\sigma} \quad (2.4)$$

其中

$$\vec{d}(k) = (d_x(k), d_y(k), 0) \quad (2.5)$$

$\vec{\sigma}$  是泡利矩阵的矢量形式。 $\vec{d}(k)$  在布里渊区的环绕次数 1 和 0 对应了拓扑非平庸和平庸相。

从波函数的角度，这种现象可以理解为  $v/w$  作为系统的“质量项”在边界处变号，类似于 Jackiw-Rebbi 模型中零能态的出现条件。更直观一些可以取  $v$  趋向 0 的极限，此时两边的原子出现未配对的原子轨道，形成局域态。根据上文真空可以理解为平庸相，如果拓扑非平庸的能带与平庸的能带对应的结构在真实空间中交汇，那么在其中的某处能隙必须消失，否则拓扑不变量不可能改变，这样在能隙闭合打开的过程中，能隙为 0 的地方出现一个低能导电态。对于这种表面态，小的扰动不能破坏其状态，这就导致了其非常高鲁棒性的电子输运性质。

## 2.3 同伦理论

在物理学中，同伦理论可以用来分类液晶的缺陷。对于液晶中的缺陷，我们把它映射到参数空间中，系统的缺陷性质由参数空间的性质表征，这样就将缺陷在连续形变的意义下进行了分类。

首先定义  $x$  点的环圈（loop）。数学上的环圈是拓扑空间  $X$  上的连续函数  $f$ ，定义域为  $[0,1]$ ，并满足  $f(0) = f(1) = x$ 。

两个环圈在  $x$  点的同伦（homotopy）直觉上是指它们之间可以通过连续形变收缩到同一个点上，用映射的语言定义为：两个环圈  $f$  和  $g$  在  $x$  点同伦，如果存在一个映射  $h_t(z), t \in [0,1]$  使得

$$\begin{aligned} (1) & h_0 = f, \\ (2) & h_1 = g, \\ (3) & \forall t, h_t(0) = h_t(1) = x \end{aligned} \quad (2.6)$$

为了描述中途不依赖于  $x$  的连续变形，需要定义环圈的乘积。 $f$  和  $g$  的乘积定义为

$$f \circ g(z) = \begin{cases} f(2z), 0 \leq z \leq \frac{1}{2} \\ g(2z-1), \frac{1}{2} \leq z \leq 1 \end{cases} \quad (2.7)$$

几何意义上它代表先绕  $f$  再绕  $g$  的路径，此时我们可以定义乘积的同伦，用等价类  $[f]$  表示与  $f$  在  $x$  点同伦的环路的集合，可以证明这是不依赖于代表元选取的。

定义等价类的乘积

$$[f] \circ [g] = [f \circ g] \quad (2.8)$$



经过群的定义的验证，我们发现等价类对于上述定义的乘法自然形成了群的结构，这得益于我们使用等价类的乘法，而不是环圈本身的乘法，直观上理解是我们忽略了路径路径中途的速度、参数化信息，而是直接保留了路径本身的拓扑结构。

于是我们可以定义以  $x$  为基点的所有闭路类的集合为以  $x$  为基点的基本群，记为

$$\pi_1(X, x) \quad (2.9)$$

这样的群描述了空间的拓扑性质，如果把拓扑空间  $X$  取为圆环  $S^1$ ，则其基本群为整数群  $Z$ ，表示圆环上的环路可以按照绕环  $0, \pm 1, \pm 2, \dots$  次分类。对于球面  $S^2$  其基本群为  $0$ ，其拓扑结构是平庸的，因为球面上的环路都可以连续变形到一点。

## 2.4 $PT$ 对称性、序参量

宇称算符  $P$  描述了空间反演对称性，其作用效果为

$$P: x \rightarrow -x, i \rightarrow i, p \rightarrow -p \quad (2.10)$$

$T$  算符描述时间反演对称性：

$$T: x \rightarrow x, i \rightarrow -i, p \rightarrow -p \quad (2.11)$$

如果一个哈密顿量在  $PT$  联合作用下不变，则称这个系统有  $PT$  对称性，即

$$(PT)H(PT)^{-1} = H \quad (2.12)$$

序参量是物理学中描述系统有序程度的物理量，在相变和对称性破缺中扮演核心角色。假设自由能在相变点处可以按照序参量  $\eta$  展开

$$F(T, \eta) = F_0(T) + a(T)\eta^2 + b(T)\eta^4 + \dots \quad (2.13)$$

通过自由能的极小值条件  $\partial F / \partial \eta = 0$ ，得到无序解  $\eta = 0$  和有序解  $\eta = \pm(-a/2b)^{1/2}$ ，此时可以令  $a$  为温度的线性函数  $a(T - T_c)$ ，其中  $T_c$  是临界温度，当高于临界温度时，系统处于混乱的无序相，只有无序解。当低于临界温度时，存在有序解，此时序参量的物理意义可以认为是取向的磁化强度。

序参量可以是标量、矢量或者复数、算符，这取决于系统的具体类型，把序参量作为自变量的参数空间称为序参量空间。

## 2.5 光子晶体中的本征值问题

光子晶体的概念来源于电子晶体的类比，在介电常数周期性排列的介质中，某些波段的电磁波因为干涉相消无法传递，这就导致了光子带隙。周期性变化的介电常数相当于周期性势场，可以按照平移对称性对本征态进行归类，这就导致了其能带结构。

在光子晶体中，由于多重干涉，光可以局域在某些缺陷或特殊调控的位置，支配其行为的方程是麦克斯韦方程，它可以在一定边界条件下写成薛定谔方程的形式。与电子晶体不同的是，光子是自旋为 1 的玻色子，而电子是自旋为 1/2 的费米子，光子之间不存在相互作用，而电子之间存在很强的相互作用。

在光子晶体中，其周期性排列的结构导致了对波前的调控，对于这样的结构通常用倒格子描述。

对于一个周期函数  $u(\vec{r})$ ，其周期为  $\vec{R}$ ，将其作傅里叶变换

$$u(\vec{r}) = \int d^3q g(\vec{q}) e^{i\vec{q} \cdot \vec{r}} \quad (2.14)$$

根据实空间的周期性，倒空间矢量满足

$$e^{i\vec{q} \cdot \vec{r}} = 1 \quad (2.15)$$

这样可以知道，倒空间作为实空间的对应，应该也有三个独立的基矢量，其中它们也形成周期性的晶格。选取一个特定的晶格点(原点)，画出从原点开始的每个晶格矢量的垂直平分线，每个平分线将晶格分为两个半平面，其中一个平面包含原点，所有包含原点的半平面重合区域就是布里渊区。布里渊区之外的矢量可以通过布里渊区内的矢量加上倒格矢表达出来。

在时谐场假设下，麦克斯韦方程组导出

$$\nabla \times \left( \frac{1}{\mu} \nabla \times E \right) - \omega^2 \epsilon E = 0 \quad (2.16)$$

$$\nabla \times \left( \frac{1}{\epsilon} \nabla \times H \right) - \omega^2 \mu H = 0 \quad (2.17)$$

这是关于电场和磁场的线性方程，可以看出这是本征值方程的形式。通过选取恰当的基底，可以把线性算符写成矩阵形式，这样可以用矩阵描述电磁场模式分布。

和电子受到周期势调控等同，在光子晶体中传播的电磁场也具有布洛赫波的形式，这可以通过微纳结构对波前的调控理解。当一束平面波被周期结构调制时，它在原来的基础上拥有了和结构一样的周期性，超表面的信息在这个过程中传递到波前。对于主方程来说，解的线性组合仍是其解，这样将那些差异仅仅体现在一个乘数因子上的场归类为同一个模式。

另外主方程的算符是厄米算符，这导致其本征值为实数，不同本征值对应的本征态是正交的。对于相同本征值对应的不同本征态不一定正交，这起源于系统结构的对称性。对于周期结构来说，主方程是尺度不变的，新的谐波的模式分布和频率仅仅是在原来的模式分布上进行了简单缩放。只要求解该系统在某一个特定尺度上的解，其他尺度的解全部可以得到。这在 COMSOL 仿真过程中提供了尺度上的自由度，在仿真之前的参数定义过程中，可以定义一个尺度因子，在较小模型下计算的结果可以减小计算时间，方便复杂结构的设计。

因此基于上述原理，可以在 COMSOL 软件中进行仿真计算，仿真的步骤依次为：

(1) 选择建模环境，对于我们的模型为二维，物理场选为电磁波，频域，研究选为特征频率。

(2) 定义正格子和倒格子，对于一维模型只有 x 方向是周期性的，因此只需在 x 方向设置周期边界，y 方向设置散射边界。对于边界条件的选取在 y 方向添加完美匹配层，这可以实现对于无限延伸的区域的有限仿真。

(3) 几何结构建模。对于初始仿真，原胞选为正方形，电介质为圆形，这可以简单通过 COMSOL 中的几何单元实现，对于后续模型，电介质中有小孔以及有限周期排列可以通过其组合，阵列方式实现。

(4) 定义材料参数。为了保证电场有效局域在电介质之中，而不是溢出至空气中，材料选择较大的介电常数，以 30 为宜。在实现过程中可以简单将空气的介电常数和折射率的实部进行

修改。

（5）划分网格。点击网格，选择默认的物理场控制网格，选择最大网格单元大小控制参数为波长，输入最小真空波长。求解的电场分量为面外矢量。对于完美匹配层的网格，选取映射网格（三维扫掠网格），实现网格与坐标拉伸方向的匹配。并且从这些域中的至少五个单元执行细化研究。

（6）右键研究，点击参数化扫描，添加扫描参数  $k$  的范围。设置特征频率研究，填入所需特征频率数、特征频率搜索基准值，微扰偏移量的特征频率搜索方法选择更大的实部。

通过简单的步骤可以实现光子晶体的能带图仿真，这就完成了 COMSOL 的主要功能，对于数据的处理使用 MATLAB，首先要将计算结果进行取点，并且导出。

首先选择结果-数据集，添加二维截点。对于我们的模型，步长设置为  $\text{range}(-a/2, a/30, a/2)$ 。然后在派生值中选择点计算，通过表格中的导出功能获得电场-特征频率的矩阵。

我们以计算逆参与比(IPR)为例介绍 MATLAB 程序对 COMSOL 数据的处理。首先用 `dlmread` 函数读取包含电场和特征频率的矩阵，对于 COMSOL 的导出数据，前五行为系统信息，因此跳过。接着在原矩阵中新建一列，按照  $\text{numerator} = \text{sum}(\text{abs}(\text{row\_data}).^4)$ ，计算电场模的四次方并存入到新的一列中，作为 IPR 的分子。 $\text{denominator} = \text{sum}(\text{abs}(\text{row\_data}).^2)^2$  作为分母，按照公式计算每个解对应的 IPR。

对于大量数据，很难靠人工判断是否为边界态，逆参与比描述了电场局域的程度，一般来说边界态是指指数衰减的，其逆参与比衰减很快，因此可以设置一个阈值，将能带图上的点按照 IPR 赋予不同颜色，通过明显的颜色对比判断可能存在的边界态。因此我们按照指数映射配色，即 `scatter(x, y, 10, log(c), 'filled')`。得到如下所示的能带图。

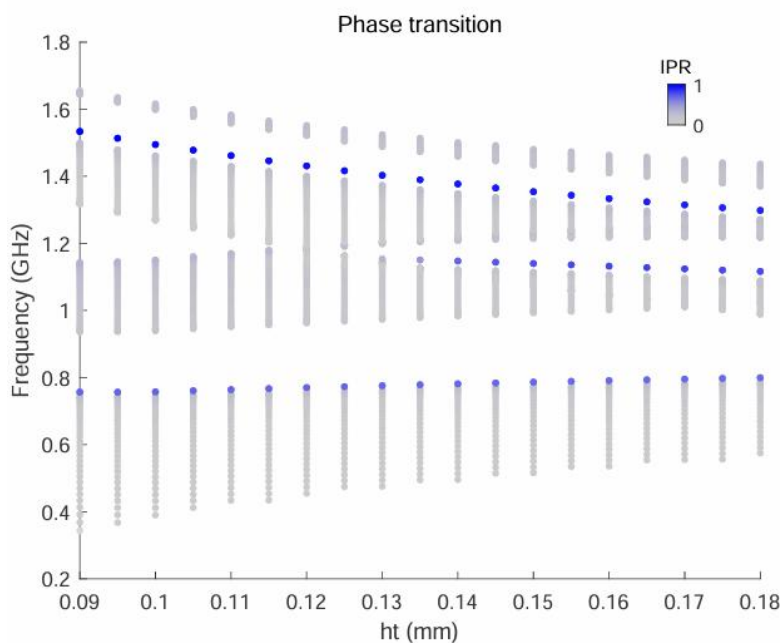


图 2.1 带有逆参与比的能带图，蓝色部分为边界态分布

通过可视化的 IPR，我们可以在大量计算数据下简单地判断拓扑相变发生的点。如上图所示，通过改变两耦合结构之间的间距  $ht$ ，在四条分立的能带之间可以得到不同边界态的分布，这正是从  $q_{1234}$  到  $q_{14}$  的相变，在相变点处能带 2、3 发生简并，可以看出逐渐出现了局域分布的边界态。

另外也可以从宇称的角度判断不同能带的 Zak 相位。具有非平庸几何相位态在布里渊区边界和中心具有相反的宇称，而平庸几何相位的态则有相同宇称，这种方法的局限性在于  $k=0$  且特征频率极小的点具有比较高的奇异性，它的电场分布不具有明显宇称，因此对于第一条能带，直接计算 Zak 相位的方式能够准确判断系统的拓扑荷。

实验数据的处理使用 Python。对于大量实验数据，包含位置和电场实部虚部，我们主要采用批处理的方法。对于电场-频率分布数据，我们在样品边界放置探针，在特征频率 0.1-4GHz 之间扫描电场分布。在能隙中如果出现一个高峰，则说明这是想要得到的边界态，于是我们的纵坐标取为电场模，横坐标为特征频率，将所有数据遍历输出。对于电场-位置分布数据，有效数据只在样品内部而不是探针移动的外部路径，因此可以按照模 3 的规则，基于探针路径的代码(对于网分仪的控制使用自己编写的软件，其中路径也是由 MATLAB 生成的)把有效点提取出来。网分仪输出数据是每个点的电场以及特征频率，因此我们把所有路径点的所有频率下的图像绘制出来需要大量时间，此时可以先按照电场-频率分布数据，确定边界态对应的频率范围，然后在代码中设置输出目标范围内的图像，从而减小输出时间。

综上所述，在软件计算的过程中主要使用了 COMSOL, MATLAB 和 Python 软件。我们在后来部分展示了这些计算的子程序可以集成到 GUI 之中，实现图形化计算，以解决纯代码处理问题的难以维护。限于计算资源以及内存，主要的仿真工作在二维下实现，对于三维模型会生成更大量的数据，可以采用更灵活的方法，例如使用 Tensorflow 训练神经网络，实现超越传统物理学范式的更高效方法预测边界态的位置，并可以建立参数-性质映射，指导光子晶体的反向设计。

### 3 非阿贝尔拓扑模型

#### 3.1 模型示意图

图 3.1(a)是我们设计的模型基本参数,  $l1$  和  $l2$  是上下两组圆柱可变的胞内距离,  $ht=8\text{mm}$  是两组圆柱之间的距离, 介质的相对介电常数取为 36, 晶格常数  $a=40\text{mm}$ 。

整个系统是  $PT$  对称的, 这样选取适当的基底后, 系统的哈密顿量可以在任何布洛赫  $k$  下保持实数

$$H(k) = H^*(k) \quad (3.1)$$

对于具有  $PT$  对称性的四能带哈密顿量, 其序参量空间可以表示为

$$M_4 = O_4 / Z_2^4 \quad (3.2)$$

其中  $O_4$  为四维正交群,  $Z_2^4$  表示每个本征态具有  $\pm 1$  的规范自由度。该系统的拓扑性质可由基本群  $\pi_1(M_4) = Q_{16}$  表示, 其中  $Q_{16} = \{\pm e_1^{n_1} e_2^{n_2} e_3^{n_3}\}, n_i \in \{0,1\}$  为一四元数群, 群元素满足  $\{e_i, e_j\} = -2\delta_{ij}$ 。通过对群元素进行一一重命名, 我们得到描述四个能带 Zak 相位分布的能带指标标记——例如  $\pm q_{12}$  表示第 1 和第 2 能带同时获得  $\pi$  的 Zak 相位。

表 3.1 Clifford 代数与能带序号表示对应关系

Clifford 代数表示	能带序号表示
$\{+1\}, \{-1\}$	$\{+1\}, \{-1\}$
$\{\pm e1\}$	$\{\pm q12\}$
$\{\pm e2\}$	$\{\pm q13\}$
$\{\pm e3\}$	$\{\pm q14\}$
$\{\pm e1e2\}$	$\{\pm q23\}$
$\{\pm e1e3\}$	$\{\pm q24\}$
$\{\pm e2e3\}$	$\{\pm q34\}$
$\{+e1e2e3\}, \{-e1e2e3\}$	$\{+q1234\}, \{-q1234\}$

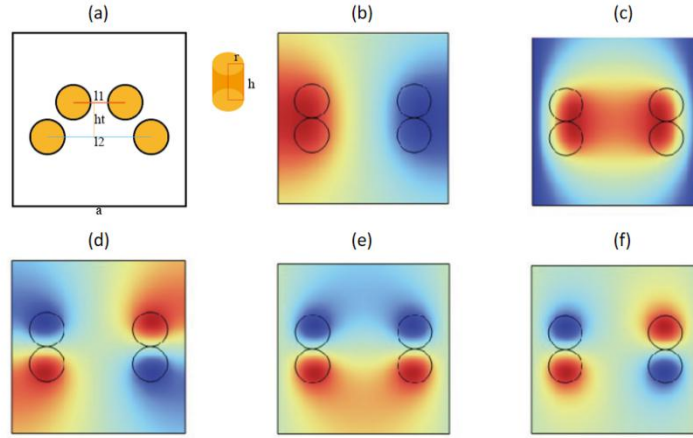


图 3.1 a 模型示意图。b-e 能带 1-4 的本征态在布里渊区边界处分布。f 第四条能带的本征态在布里渊区原点的分布

### 3.2 拓扑荷的几何意义

这类拓扑荷的几何意义可通过  $n$  维空间的旋转理解。在不失一般性的情况下， $PT$  对称哈密顿量可表述为

$$H(k) = R(k) \text{diag}(\lambda_n) R^T(k) \quad (3.3)$$

其中  $R(k) \in SO(n)$  属于  $n$  维特殊正交群。当波矢  $k$  扫过第一布里渊区时，本征态  $|n\rangle$  连续旋转至  $|n\rangle$  或  $-|n\rangle$ ，分别对应 Zak 相位为  $0$  或  $\pi$ 。以三维旋转为例，本征态可以视为三维实空间中的正交框架，类似于双轴液晶分子的取向。当系统沿闭合路径绕缺陷运动时，本征态框架会发生旋转，其拓扑荷由四元数群的元素描述。例如，拓扑荷  $i$  表示绕主轴旋转  $\pi$  角度，而  $-1$  则表示旋转  $2\pi$  角度。

从能带简并的角度看，不同的拓扑荷对应不同的能带简并模式。拓扑荷  $i$  会导致第二、三能带简并，而  $j$  表示能带一三简并， $k$  则表示能带一二简并。在能带闭合再打开的过程中会出现相应位置的边界态。在不同拓扑荷接触的畴壁，由于其是拓扑不变量，会产生不同的编织情况，这就导致了其非阿贝尔的本性。

### 3.3 数值计算方法

通过改变电介质柱的距离可以调节胞内耦合强度  $v$  和胞间耦合强度  $w$ ，对于离散模型的几何相位可以按照数值方法求解，即：

$$\Phi = -\sum_i \text{Im} \ln \langle u_i | u_{i+1} \rangle \quad (3.4)$$

其中  $|u_i\rangle$  为某个布洛赫  $k$  下的电场强度  $z$  分量。

根据电场分布计算逆参与比（IPR）：为了直观看出边界态的分布，可以通过计算 IPR 来表征波函数的局域化程度，IPR 的定义为：

$$IPR = \frac{\sum_i |\phi_i|^4}{(\sum_i |\phi_i|^2)^2} \quad (3.5)$$

计算部分的功能可以集成到 GUI 中，实现图形化操作，如下图所示：

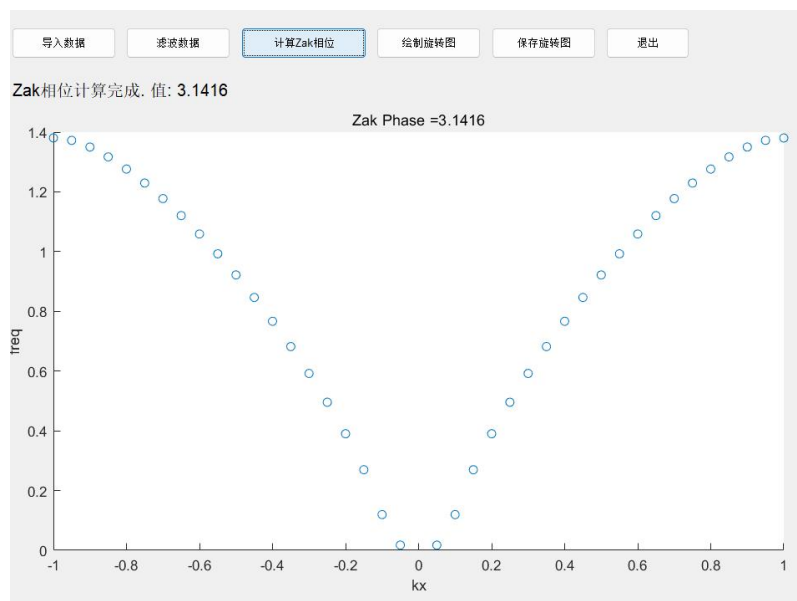


图 3.2 计算 Zak 相位相关功能界面，图示为滤波后对能带 2 进行计算

### 3.4 边界态的验证

仿真软件使用 COMSOL Multiphysics。对于周期性能带的仿真，在 x 方向上设置周期性边界条件，y 方向上使用完美匹配层加散射边界条件。对于开边界则都采用完美匹配层加散射边界条件。三维仿真时，在 z 方向上设置完美电导体边界可以使电场在 z 方向上均匀分布，结果与二维仿真非常相近，因此以下讨论以二维仿真为例。

因此由之前的讨论，通过改变介质圆柱间距离改变耦合强度，从而得到不同类的哈密顿量，相应的拓扑荷可以通过计算 Zak 相位和观察边界态分布检验。我们在仿真中成功得到了所有类型的拓扑荷。

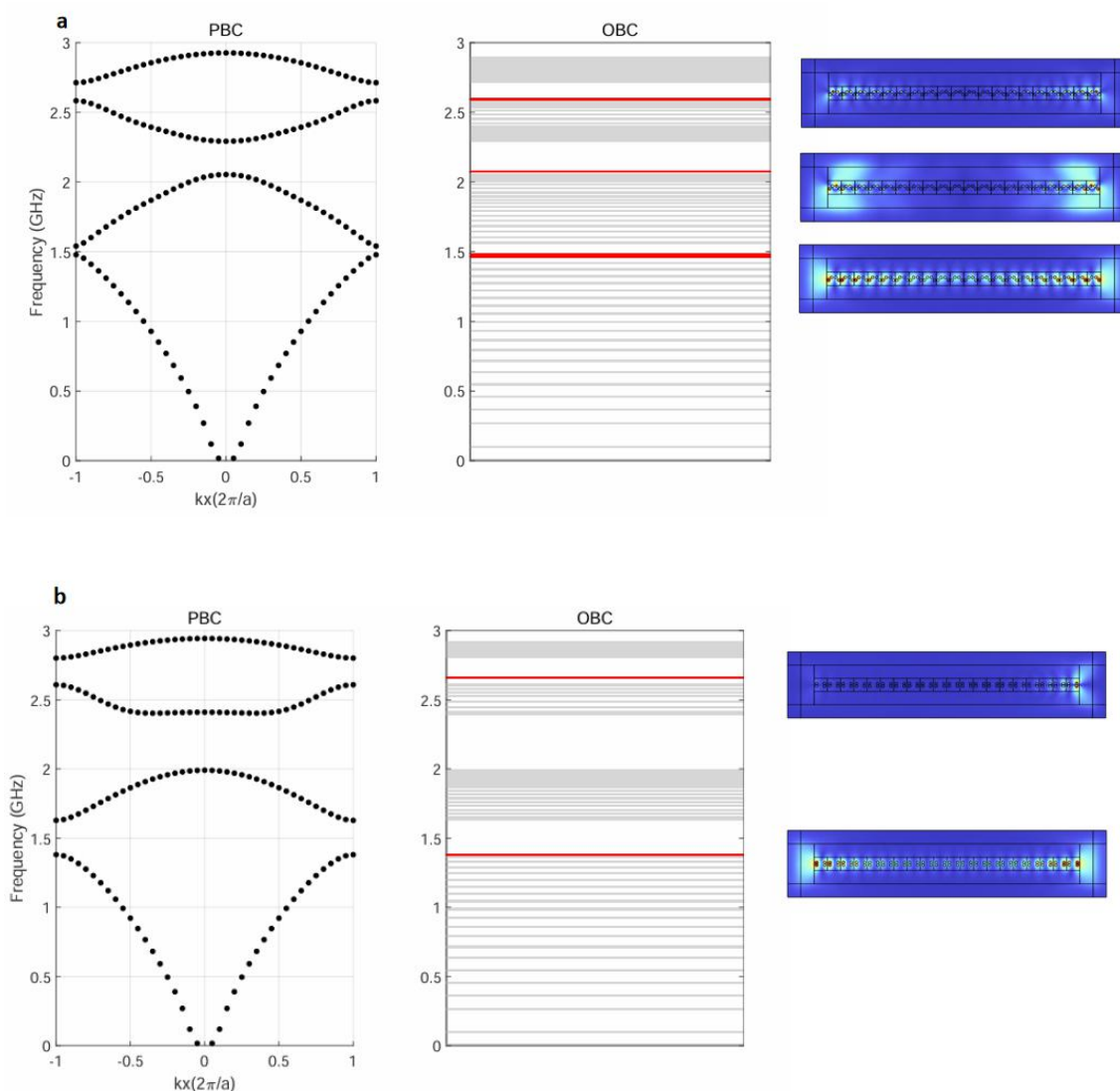


图 3.3 周期边界、开边界条件下的特征频率以及场分布 a: q14 b: q1234

以  $q_{14}$  ( $l_1 = 0.3a, l_2 = 0.8a$ ) 和  $q_{1234}$  ( $l_1 = 0.6a, l_2 = 0.6a$ ) 为例，在周期边界条件下，它们都有完全的带隙，如果在有限长模型中，取开边界条件，可以观察到电场在带隙对应的特征频率处局域在一侧，即体边对应关系的结论。边界态的位置由能带的 Zak 相位决定，在非平庸的能带之间会出现边界态。上图中左边为周期边界下的能带分布，横坐标为布洛赫  $k$ ，纵坐标是特征频率，可以看出其带隙位置与右图所示边界态是对应的。在开边界条件下，体态的能态用灰色表示，边界态能带用红色表示，最右边是边界态电场分布。对于高频分量(大于 2GHz)电场局域效应较好，低频分量则衰减较慢，这在后续的实验中也得到了证实，在低频段电场分布具有很高的  $Q$  值，表现为很窄的尖峰，而在高频电场  $Q$  值较低。

我们理论上取了最低的四条能带，在单极子近似的意义下，介电材料可以认为是谐振腔，相应会有四条能带。实际上系统的能带还有更高阶部分，如偶极子和四级子模式，这同样会带来边



界态分布和不同能带的简并。有趣的是高阶模式具有更多的边界态，这是由于对称性导致的，由于高阶模式具有更高对称性，表现为同一个频率有不同方向的偏振。在高频段能隙较小，因此本文只采用最低四条能带进行研究。对于高阶能带的拓扑研究中，发现存在偶然的畴壁电荷，在两组能带位置差别较大的情况下，可能会出现多于非阿贝尔商法则预测的畴壁电荷，当两组能带对齐时，没有发现意外的畴壁电荷，对于多出的态来说，其同样具有对微扰的稳定性，这个问题仍然开放。

### 3.5 本征态的演化

我们用 MATLAB 计算本征态的演化。对于我们的准一维模型，在紧束缚近似下，波函数的分量用介质圆柱里的电场  $z$  分量表示。对于非平庸能带，其本征态经过演化后加一个负号，对于平庸能带则回到原始状态。在布洛赫球上画出波函数的投影如下。

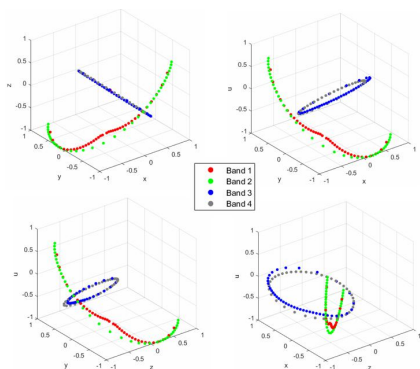


图 3.4 q1234 本征态的演化

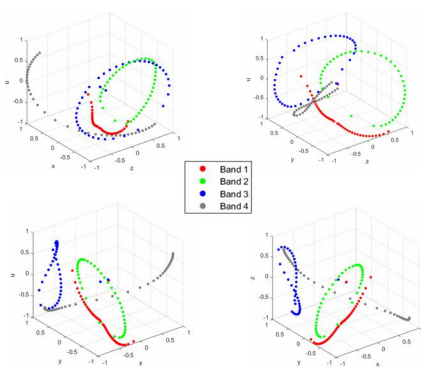


图 3.5 q14 本征态的演化

### 3.6 非阿贝尔体边对应关系

当具有两种不同拓扑荷的材料交接时，电场会强烈地局域在界面处，形成畴壁电荷，对于非

阿贝尔拓扑荷，这样的关系表示为

$$\Delta Q = Q_L / Q_R \quad (3.6)$$

我们选取两组能带位置接近的情况，即  $q_{14}$  和  $q_{1234}$ ，按照公式（3.6）计算结果为  $q_{23}$ ，即在能带 2 和 3 之间出现了拓扑保护的边界态，这验证了非阿贝尔体边对应关系。

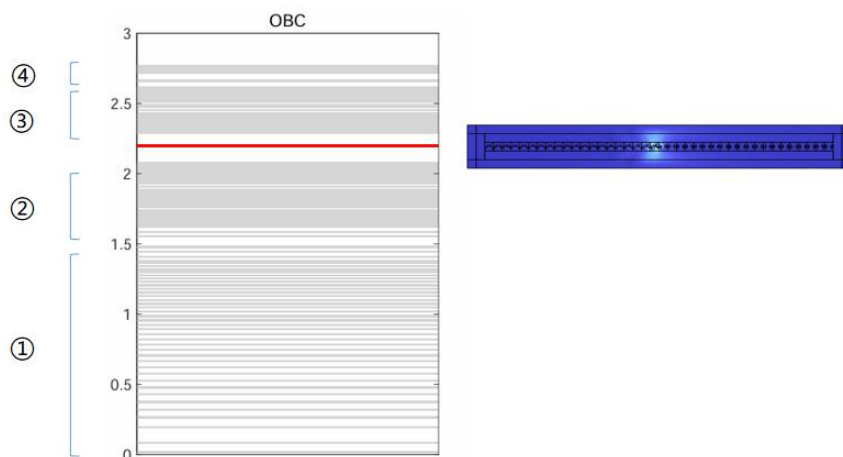


图 3.6 两种不同拓扑荷材料拼接

## 4 实验

### 4.1 实验细节

使用矢量网络分析仪，在打孔铝板（圆孔直径 2mm，行间圆心间距 5mm，两行间距 8mm，每行 101 个孔）上测量电场 z 分量。为了保证边界态的有效激发。激励源的位置选在右边界，为了保证有效测量介质中的电场，实验中的介电材料中心有内径 1.8mm 的小孔，探针伸入右边界位置的介电材料中测量，如图所示。

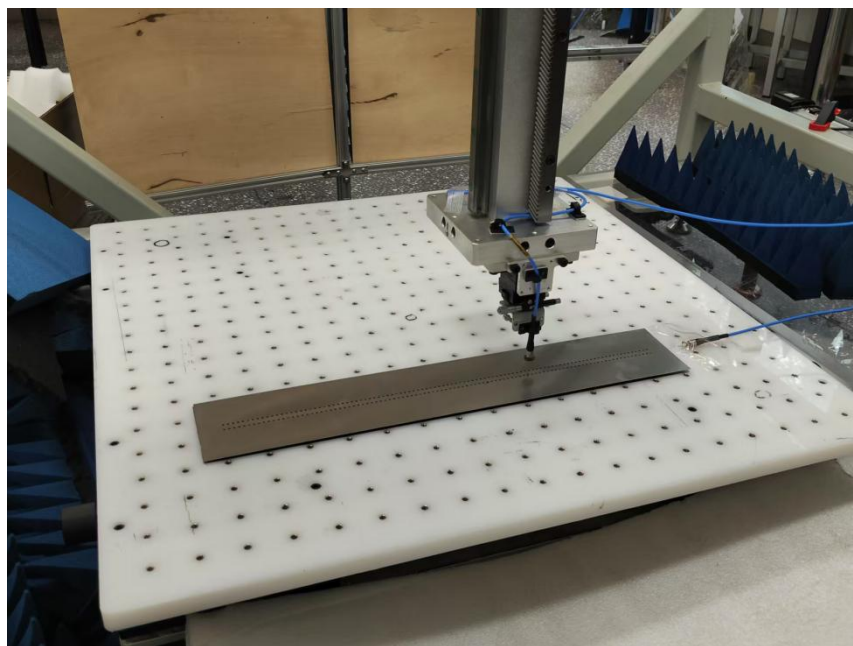


图 4.1 实验图示，使用矢量网络分析仪逐点扫描

电介质选择内径 1.8mm，外径 6mm，高度 2mm 的介电圆柱，相对介电常数为 30（Temex-Ceramics, E4000），其中内径小孔的作用是方便探针插入（1mm）测量电介质中的电场。考虑到电场的趋肤深度以及材料的强度，铝板厚度为 1mm。在扫描的过程中，首先通过 MATLAB 生成探针移动的路径，这是通过简单的循环实现的。我们测量所有圆孔内的电场分布，可以设置扫描一条路径，然后移动探针初始位置，再扫描另一条平行的路径。对于 q1234 的测量，由于系统在两条链上是完全对称的（不考虑固定误差），因此我们只选取了其中一条链测量。对于 q14 的测量，边界态在上下两链中都有分布，我们在实验上测量了两个边界的电场-频率分布，由于实验结果相近，只保留下链数据作为边界态位置的粗略判定，通过电场-位置分布作进一步精确测量。

我们首先将电介质用环氧树脂胶水固定在下层铝板上，紧接着按照平台上圆孔位置将下层铝板放置平行，覆盖上层铝板。先令探针对准左边界圆孔，按照预设的平行路径移动至右边界圆孔，如果仍然处于圆孔中心，则认为系统已经校准平行。这时就可以将下面探针放置在校准后的样品的右侧。用胶带固定，使其处于两层铝板之间。受限于实验台位置，探针可能接触铝板，这时候

可以从网分仪的显示界面看出电场出现了较大幅度的偏移，此时应该及时移动探针位置，避免实验数据的误差以及造成探针的损坏。

对于完美匹配层的模拟，我们在  $y$  方向两侧放置图中的吸收材料（黑色三角形），从而避免回波的干扰。 $x$  方向是周期边界条件，在不放置吸收材料的情况下与理论符合较好。

## 4.2 实验结果

边界态的检验如下图所示。网分仪频率范围为 0.1 至 4.0GHz，红色虚线表示的是理论预测的边界态频率，可以看出  $q1234$  情况下，1.94GHz 对应的频率落在能带 1、2 之间，3.59GHz 对应的频率落在能带 3、4 之间，对于  $q14$  则存在有三个边界态。从图 4.2 中红色虚线标出的边界态与蓝色代表的体态来看， $q14$  情况下实验值比理论值偏高，并且能隙间距较窄，这是由于在测量中适用了环氧树脂的胶水层固定光子晶体，以及在铝板不平整带来的空气层导致的，这等效于减少了介电常数。在准一维非厄密的光子晶体中，需要较大介电常数以及较近的间距实现介质之间的耦合，因此这样的实验装置带来能带位置偏高，电场稍微偏离探针测量的中心位置。

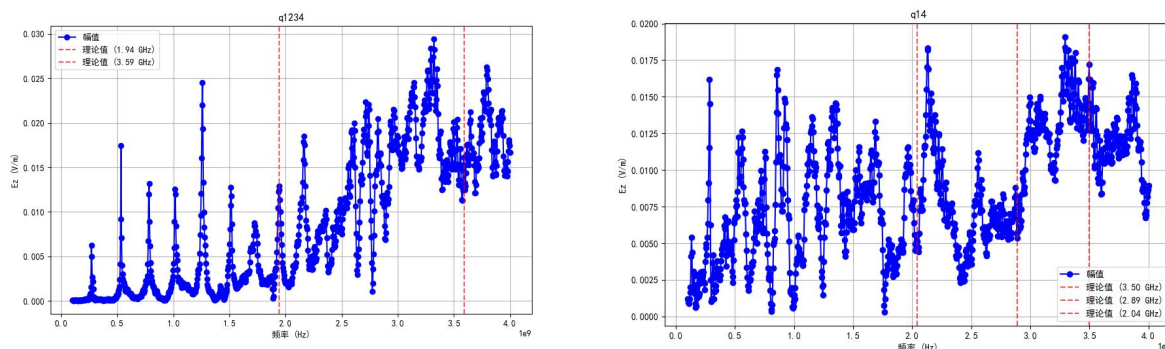


图 4.2 场强  $z$  分量-频率分布，分别在两种周期结构边界测量得到

将两种结构对接，测量结果如下图所示。理论预测的畴壁电荷在 3.12GHz 处，从实验数据来看，畴壁电荷的测量并没有出现在明显带隙之中，这是由于探针激励距离界面中心有一定距离，我们的光子晶体高度为 2mm，探针侧面固定装置稍大于光子晶体高度，因此无法有效从侧面插入铝板之中。

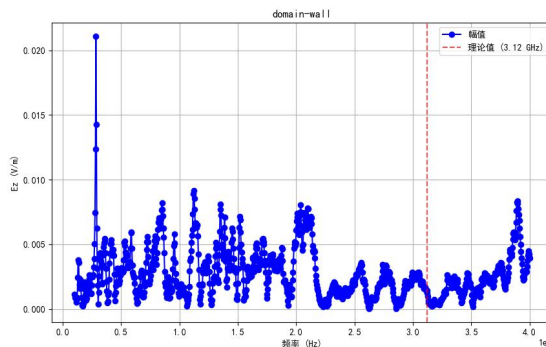


图 4.3 畴壁处对应场强  $z$  分量-频率分布

对于 q1234, 在两个边界态对应特征频率下, 我们逐点测量不同位置的场强, 画出场强-位置分布图。横坐标为从激发探针到最远处孔的序号。在接近激发探针处, 有强烈局域的电场, 这是由于不同拓扑荷交界处。能带闭合打开导致的。在体态中, 电场呈现均匀的分布, 这与仿真预测结果一致。实验测量中采用 MATLAB 生成探针的三维扫描路径坐标, 按照每个孔的位置进行扫描, 由于探针经历插入-抬起-平移的三个过程, 在介质之外的电场理论上不是我们关心的物理量, 因此数据点只保留了探针插入介质中的电场强度。

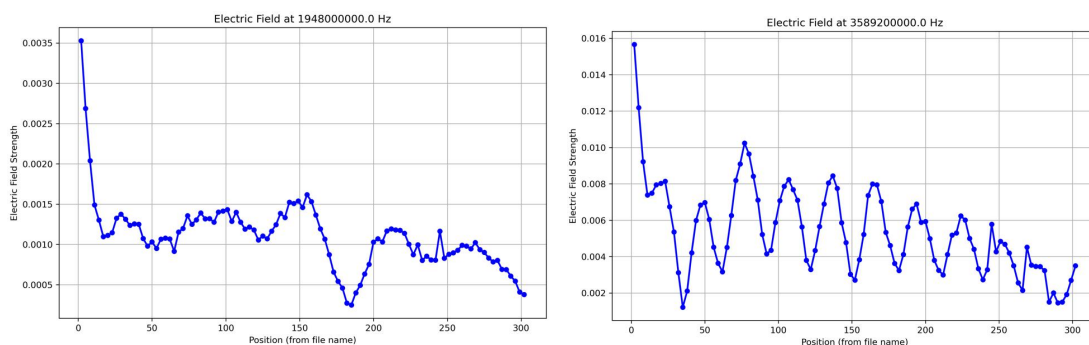


图 4.4 q1234 两组场强 z 分量-位置分布, 横坐标 0 表示从最接近激发位置开始测起, 300 为最远离激发位置

q14 的场强-位置分布对应有三组数据, 与上述结果类似, 电场局域在其中一边界, 注意到第二、三幅图中出现在右边界的电场, 这是由于边界态衰减不充分导致的, 在仿真中同样得到了类似的结果。综合考虑单元数目和边界态位置的准确性, 我们选取单元数为 10, 以保证理想的实验结果。

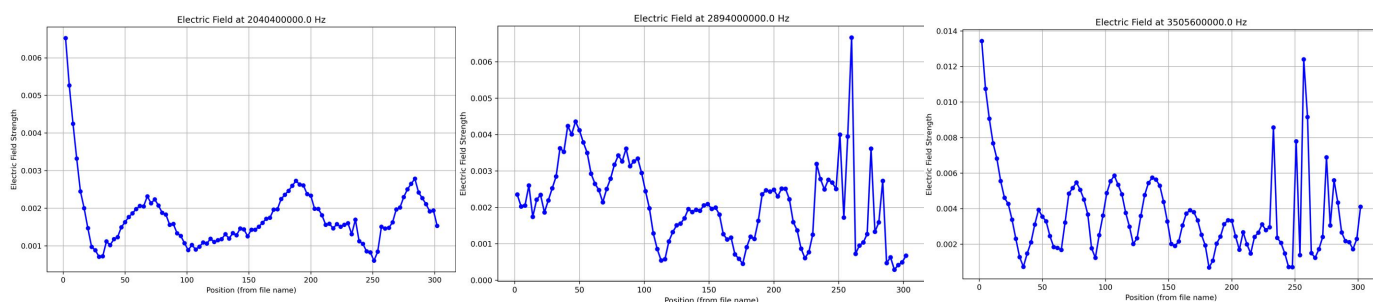


图 4.5 q14 三组场强 z 分量-位置分布

将探针放置于第 50 个孔处, z 方向进入样品 1mm, 我们测量了畴壁电荷, 结果如下图所示。理论上在中间位置电场出现峰值, 但是在实验中没有测量得到, 这受到探针激发位置的影响, 在边界处的探针无法有效激励中间位置, 反而带来了边界处较强的电场分布。进一步改进的措施是增大电介质高度, 减小下表面探针直径, 给探针留下足够空间激发中间位置。

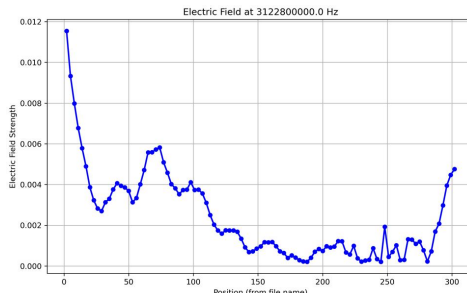


图 4.6 畴壁电荷场强 z 分量-位置分布

本章围绕非阿贝尔拓扑荷所引发的边界态与畴壁电荷，设计并开展了系统的实验测量。通过在打孔铝板结构中嵌入介电材料并结合矢量网络分析仪扫描，我们实现了对不同拓扑构型中电场 z 分量的定点测量。实验结果在频率与空间分布两个维度上均验证了非阿贝尔拓扑荷与边界态之间的对应关系，其中 q1234 和 q14 两种结构展现出显著不同的边界态数量与频率响应。尽管实际测量中受到如铝板不平整、固定胶水层引入空气间隙等实验条件的影响，导致频率偏移与能隙缩窄，但整体趋势与理论预测保持一致，进一步印证了所设计光子晶体结构中非阿贝尔拓扑荷的物理可观测性。

在畴壁电荷的测量中，由于探针在界面附近的物理限制及结构尺寸的制约，实验中尚未清晰观测到理想化的电场分布，这也突显了高精度边界激励与探测在该类实验中所扮演的重要角色。未来工作中，可考虑优化光子晶体的结构设计与探针几何，使其更贴合激励和测量需求，以进一步提升实验对非阿贝尔拓扑效应的解析能力。



## 5 分析和讨论

### 5.1 实验理论对比

从仿真计算结果来看，在光子晶体中设计的非阿贝尔拓扑荷存在，并且畴壁电荷是稳定的，这是因为它的出现受拓扑保护，在外界条件微扰下（相对介电常数由 36 连续降低到 20，在结构中心引入空气孔等）稳定存在。此结果在 q1234 的实验中符合较好，理论预测 1.94GHz/3.59GHz 出现的边界态均在实验中得到验证。

对于 COMSOL 仿真，我们在 x 方向上采用周期边界条件，在 y 方向采用晶格周期一半长度的完美匹配层，和一阶散射边界条件。网格最小单元为 2.88E-4m。对于这样的参数，在晶格单元选取为 20 时仿真上有明显局域于系统单侧的边界态，当单元数减少为 10 时，边界态对应位置扩展到系统两侧，这是由于没有足够单元提供衰减导致的，考虑到探针激发距离有限，在实验中选取单元数为 10 带来了边界态位置的一定误差，但保证了信号探测的强度。

### 5.2 实验装置缺陷

对于 q14 和畴壁电荷，考虑到探针位置固定，太远位置的场可能不被激发，而近距离难以确定是边界态还是激发的电场，这给判断边界态带来了困难。测量畴壁电荷时，受探针尺寸所限，无法有效激励中间部分，因此得到的场分布中间没有明显高峰。

另外，两层铝板由于过于细长且有打孔，造成表面存在应力，这在光子晶体上表面带来约 0.2mm 的空气层，破坏了完美电导体边界条件，会导致特征频率偏高。用于固定光子晶体的胶水层（环氧树脂介电常数约 3.5）等效地减小了介电常数，其效果相当于空气层，使得能隙闭合以及特征频率升高。在测量时，除去光子晶体内部，测得铝板表面也有一定的场泄露出来。光子晶体的有限高度限制了能隙的打开。

对于上述问题，改进方案是设计 z 方向高度更高（10mm）的光子晶体，并且在下层铝板打孔（2mm）代替胶水固定光子晶体，这样可以减小等效空气层的影响，并且给探针留下足够空间。

## 6 总结展望

### 6.1 总结

我们在光子晶体中设计了非阿贝尔拓扑荷结构，并且仿真实验测量了不同拓扑荷以及其对应的边界态，主要研究成果可总结如下：

（1）基于传统拓扑模型的推广，我们研究了四能带  $PT$  对称哈密顿量，通过构建基本群阐明了非阿贝尔拓扑荷的旋转框架和边界态意义，研究发现四元数群  $Q_{16}$  作为序参量空间的基本群描述了其拓扑特性。

（2）我们利用 COMSOL Multiphysics 和 MATLAB 实现了不同拓扑荷结构的仿真与拓扑不变量的计算，在改变参数的仿真中验证了边界态的稳定性，并且通过两组相近的能带验证了非阿贝尔体边对应关系。

（3）使用矢量网络分析仪测量了边界态电场和频率分布，拓扑荷对应的边界态位置得到验证。我们观察到了多个边界态的空间定位与频率响应与模拟结果高度一致，证实了不同拓扑荷所对应边界态的可控性与可测性。限于实验装置远距离边界态的激发未能实现，畴壁电荷的实验检验依赖实验装置的进一步优化。

综上所述，本研究从理论、仿真到实验全方位展开，对光子系统中非阿贝尔拓扑结构的形成机制、物理特性及其边界响应进行了系统探究，验证了非阿贝尔拓扑荷在经典波系统中的现实可实现性。这为未来在光子晶体、声子晶体及其他人工结构中探索高阶拓扑态、非厄米拓扑态乃至拓扑量子信息处理奠定了坚实基础。

### 6.2 展望

本文的工作深化了对非阿贝尔拓扑物态的理解，为未来光子器件的设计提供了新思路。未来研究可以从以下几个方向展开：

（1）目前调控基于静态  $PT$  对称体系，未来可以引入动态调控（Floquet 拓扑绝缘体）实现拓扑相的人为操控，并可研究时间反演对称性破缺对非阿贝尔拓扑态的影响。通过基于电光晶体的动态调制系统，可能诱导出新型 Floquet 非阿贝尔拓扑相，通过引入可调控的增益-损耗分布，在非厄密系统的奇异点处研究非阿贝尔拓扑荷的演化规律，有助于解释拓扑保护和非厄密物理之间的深层联系。

（2）当前模型限于准一维体系，可以推广至二维以及三维光子晶体，研究非阿贝尔拓扑荷在高阶拓扑绝缘体中的影响。目前模型的边界态仅限于畴壁处，在更高维度上可以进一步研究体、边界和角态的对应关系，并且在微纳加工技术上提出了更高要求，模型可缩放至微纳光学尺度，此时隧道效应对于电场局域的影响不可忽略，可能带来新奇的物理现象。

（3）利用非阿贝尔边界态的电场局域效应，实现低损耗拓扑光波导、高  $Q$  值微腔，并且实现工作频率可调控，提升光子器件的抗干扰能力。基于非阿贝尔边界态的光波导有天然的抗背向散射能力，有助于实现多通道、低串扰的光子器件。将相变材料与拓扑光子结构结合可以开发出新型可重构拓扑器件，这为光计算和光存储提供可能。



## 参考文献

- [1] Klitzing K V, Dorda G, Pepper M. New Method for High-Accuracy Determination of the Fine-Structure Constant Based on Quantized Hall Resistance[J]. Physical Review Letters, 1980, 45(6): 494-497.
- [2] Thouless D J, Kohmoto M, Nightingale M P, et al. Quantized Hall Conductance in a Two-Dimensional Periodic Potential[J]. Physical Review Letters, 1982, 49(6): 405-408.
- [3] Haldane F D M. Model for a Quantum Hall Effect without Landau Levels: Condensed-Matter Realization of the "Parity Anomaly"[J]. Physical Review Letters, 1988, 61(18): 2015-2018.
- [4] Kane C L, Mele E J. Quantum Spin Hall Effect in Graphene[J]. Physical Review Letters, 2005, 95(22): 226801.
- [5] Su W P, Schrieffer J R, Heeger A J. Solitons in Polyacetylene[J]. Physical Review Letters, 1979, 42(25): 1698-1701.
- [6] Bernevig B A, Hughes T L, Zhang S-C. Quantum Spin Hall Effect and Topological Phase Transition in HgTe Quantum Wells[J]. Science, 2006, 314(5806): 1757-1761.
- [7] König M, Wiedmann S, Brüne C, et al. Quantum Spin Hall Insulator State in HgTe Quantum Wells[J]. Science, 2007, 318(5851): 766-770.
- [8] Fu L, Kane C L. Topological insulators with inversion symmetry[J]. Physical Review B, 2007, 76(4): 045302.
- [9] Xia Y, Qian D, Hsieh D, et al. Observation of a large-gap topological-insulator class with a single Dirac cone on the surface[J]. Nature Physics, 2009, 5(6): 398-402.
- [10] Kitaev A Y. Unpaired Majorana fermions in quantum wires[J]. Physics-Uspekhi, 2001, 44(10S): 131.
- [11] Raghu S, Haldane F D M. Analogs of quantum-Hall-effect edge states in photonic crystals[J]. Physical Review A, 2008, 78(3): 033834.
- [12] Hafezi M, Mittal S, Fan J, et al. Imaging topological edge states in silicon photonics[J]. Nature Photonics, 2013, 7(12): 1001-1005.
- [13] Wang R, Mao L, Huang H, et al. Coupled topological interface states in one-dimensional phononic crystals composed of a trimer chain[J]. Physics Letters A, 2025, 533: 130210.
- [14] Li F, Huang X, Lu J, et al. Weyl points and Fermi arcs in a chiral phononic crystal[J]. Nature Physics, 2018, 14(1): 30-34.
- [15] Parto M, Wittek S, Hodaei H, et al. Edge-Mode Lasing in 1D Topological Active Arrays[J]. Physical Review Letters, 2018, 120(11): 113901.
- [16] Wu Q, Soluyanov A A, Bzdušek T. Non-Abelian band topology in noninteracting metals[J]. Science, 2019, 365(6459): 1273-1277.

- [17] Guo Q, Jiang T, Zhang R-Y, et al. Experimental observation of non-Abelian topological charges and edge states[J]. Nature, 2021, 594(7862): 195-200.
- [18] Jiang T, Guo Q, Zhang R-Y, et al. Four-band non-Abelian topological insulator and its experimental realization[J]. Nature Communications, 2021, 12(1): 6471.

装

订

线

## 谢辞

大学时光一晃而过，回首过去的岁月，心中感慨良多。写完这篇毕业论文感觉如释重负，有许多人需要感谢。

首先诚挚感谢论文的指导老师姜天舒老师。姜老师严谨细致的作风是我学习的榜样，在与姜老师讨论的过程中我学习到直观思维的重要性，以及如何在对话中发现思维的短板。特别感谢姜老师在我使用 COMSOL 软件时的耐心指导，从最初的参数设计到后来的数据处理，姜老师以鼓励的态度帮助我克服困难，培养了解决问题的能力。

特别感谢我的班主任江涛老师。江老师不仅在学业上给予我诸多指导，更在生活中教会我“格局打开”的人生哲理。每当我遇到科研瓶颈时，江老师的鼓励总能让我重拾信心；在我初入大学感到迷茫时，江老师的关怀帮助我快速适应新的环境。正是江老师的言传身教，让我始终保持积极向上的心态。

感谢张晨宇学长在理论推导和数据处理方面的专业指导，您严谨的科研态度让我深受启发；感谢关振伏学姐提供的服务器资源和计算支持，为我的研究提供了重要保障。

在实验部分，特别感谢复旦大学马少杰课题组的鼎力支持。感谢袁仪学姐在实验设计和操作上的无私帮助，您丰富的实验经验让我少走了许多弯路；感谢徐一凯学长在实验初始阶段的专业指导，您的耐心讲解让我对实验系统有了更深入的理解。